

Tratamiento Numérico de Materiales Compuestos Mediante La Teoría de Homogeneización

F. Zalamea
J. Miquel Canet
S. Oller

Tratamiento Numérico de Materiales Compuestos Mediante la Teoría de Homogeneización

F.Zalamea
J. Miquel Canet
S. Oller

Monografía CIMNE N°-64, Enero 2002

CENTRO INTERNACIONAL DE MÉTODOS NUMÉRICOS EN INGENIERÍA
Edificio C1, Campus Norte UPC
Gran Capitán s/n
08034 Barcelona, España

Primera edición: Enero 2002

**TRATAMIENTO NUMÉRICO DE MATERIALES COMPUESTOS MEDIANTE LA TEORÍA
DE HOMOGENEIZACIÓN**

Monografía CIMNE M 64
© El autor

ISBN: 84-89925-94-1

Depósito legal: B-9023-02

Índice General

I	INTRODUCCIÓN Y ESTADO DEL ARTE	7
1	INTRODUCCIÓN	9
1.1	MOTIVACIÓN	9
1.2	PRESENTACIÓN DEL PROBLEMA	11
1.3	OBJETIVOS	15
1.4	CONTENIDO	16
2	TEORÍA DE HOMOGENEIZACIÓN.- ESTADO DEL ARTE	19
2.1	INTRODUCCIÓN	19
2.2	MÉTODOS DE PROMEDIOS	21
2.2.1	Introducción	21
2.2.2	Formulación en deformaciones (caso general)	23
2.2.3	Formulación en tensiones (caso general)	30
2.3	TEORÍA DE LA EXPANSIÓN ASINTÓTICA	34
2.3.1	Introducción	34
2.3.2	Formulación a través de los desarrollos asintóticos	36
2.3.3	Aplicación del método	41
2.4	ACOPLAMIENTO DE VARIABLES EN EL PROBLEMA NO LINEAL	44
2.4.1	Materiales cuyos componentes son elásticos perfectamente plásticos	44
2.4.2	Materiales cuyos componentes son viscoelásticos o viscoplásticos	50
2.5	NUEVOS TRABAJOS ACERCA DE LA HOMOGENEIZACIÓN	51
2.5.1	Condiciones de contorno y su implementación	51
2.5.2	Solución en dos escalas del problema elástico	54
2.5.3	Cuestionamientos a la teoría de homogeneización y utilización de Métodos adaptativos y multi-grid	55
2.5.4	Homogeneización mediante <i>análisis de transformación de campos</i>	59

2.5.5	Homogeneización mediante el <i>Método de Elementos Finitos</i> <i>Voronoi</i>	62
-------	--	----

II PROPUESTA DE LA TEORÍA DE HOMOGENEIZACIÓN 65

3	TEORÍA DE HOMOGENEIZACIÓN: FORMULACIÓN	67
3.1	INTRODUCCIÓN	67
3.1.1	Utilización de dos escalas	68
3.2	DIVISIÓN DE LA ESTRUCTURA INTERNA DEL COM- PUESTO	70
3.2.1	División de un medio periódico en <i>celdas unidad</i>	70
3.2.2	Vectores de periodicidad	71
3.2.3	Caras o lados de la células	72
3.2.4	Clases de células	74
3.2.5	Vértice	74
3.3	PERIODICIDAD LOCAL DE LAS VARIABLES	76
3.3.1	Efecto del campo de desplazamientos periódico	78
3.4	TENSOR DE DEFORMACIONES HOMOGENEIZADO	81
3.5	ECUACIÓN DE EQUILIBRIO Y TENSOR DE TENSIONES HOMOGENEIZADO	85
3.6	PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA EN LA ESCALA MI- CROSCÓPICA	92
3.6.1	Descripción geométrica	92
3.6.2	Ecuaciones de gobierno	93
3.6.3	Condiciones de contorno de la célula	94
3.6.4	Formulación fuerte del problema	96
3.6.5	Equivalencia con la formulación débil del problema	96
3.6.6	Solución a través del Método de los Elementos Finitos	99
3.6.7	Implementación de las restricciones de periodicidad	102
3.6.8	Solución del problema no lineal	108
3.7	MEDIOS QUE PRESENTAN AGUJEROS O POROS	111
4	SOLUCIÓN DEL PROBLEMA EN DOS ESCALAS 115	
4.1	IDEALIZACIÓN DEL PROBLEMA	116
4.2	FORMULACIÓN DEL PROBLEMA ELÁSTICO EN DOS ESCALAS	120
4.2.1	Datos geométricos y expresiones cinemáticas del pro- blema	121
4.2.2	Ecuaciones de gobierno	122

4.2.3	Determinación del tensor constitutivo elástico homogeneizado mediante un método de perturbación	124
4.2.4	Formulación fuerte del problema elástico	126
4.2.5	Formulación débil del problema elástico	127
4.2.6	Solución del problema a través del Método de los Elementos Finitos	129
4.3	FORMULACIÓN DEL PROBLEMA NO LINEAL EN DOS ESCALAS	134
4.3.1	Datos geométricos y ecuaciones de gobierno	135
4.3.2	Ecuación constitutiva del compuesto	137
4.3.3	Formulación fuerte del problema no lineal en dos escalas	143
4.3.4	Acoplamiento macro-micro-estructural: Conceptos . . .	144
4.3.5	Formulación débil del problema no lineal	146
4.4	MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS EN DOS ESCALAS (MEFDE)	149
4.4.1	Solución incremental a través del Método de los Elementos Finitos	149
4.4.2	Determinación del tensor secante a través de un método analítico	156
4.4.3	Determinación del tensor secante a través de una red neuronal	157
4.5	IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA: GENERACIÓN, ACOPLAMIENTO Y PARALELIZACIÓN DEL CÓDIGO	165
4.5.1	Generación del código	165
4.5.2	Algoritmo y Secuencia de actividades	167
4.5.3	Introducción a la paralelización	171
4.5.4	Introducción al PVM ("Parallel Virtual Machine") . .	172
4.5.5	Estructura de paralelización del <i>Método de los Elementos Finitos en Dos Escalas</i>	174
4.5.6	Balance de carga	182
4.6	COMPARACIÓN DE LA PROPUESTA EN DOBLE ESCALA CON OTROS MÉTODOS	184

III APLICACIONES Y CONCLUSIÓN 189

5	DETERMINACIÓN DE LAS PROPIEDADES ELÁSTICAS DEL COMPUESTO	191
5.1	COMPUESTO FORMADO POR PARTÍCULAS CUADRADAS	192
5.2	MATERIAL CON AGUJEROS	202

6	COMPORTAMIENTO DE MATERIALES REFORZADOS CON FIBRAS EN UNA DIRECCIÓN	207
6.1	BREVE CRONOLOGÍA DE ESTOS MATERIALES	208
6.2	REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS LARGAS	210
6.2.1	Idealización longitudinal de la célula	211
6.2.2	Comportamiento del compuesto bajo esfuerzos de trac- ción	211
6.2.3	Comportamiento del compuesto bajo esfuerzos de cor- tante	215
6.3	REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS CORTAS	219
6.3.1	Idealización longitudinal de la célula	219
6.3.2	Comportamiento a tracción de un compuesto con ma- triz dúctil	221
6.3.3	Compuesto de matriz frágil con refuerzo de fibras cortas	225
6.3.4	Compuesto de matriz de hormigón con el 2% de fibras	228
6.3.5	Compuesto de matriz de hormigón con el 6% de fibras	236
6.4	COMPORTAMIENTO TRANSVERSAL DEL COMPUES- TO FIBRA-MATRIZ	243
7	ANÁLISIS EN DOS ESCALAS	257
7.1	CILINDRO GRUESO CON PRESIÓN INTERNA	258
7.2	PARED SOMETIDA A ESFUERZO CORTANTE	268
7.3	ENSAYO DE UNA PROBETA DE CARBONO-EPOXI	277
8	CONCLUSIONES Y FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGA- CIÓN	295
8.1	CONCLUSIONES	295
8.2	FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN	300
IV	APÉNDICE	303
A	BASES TERMODINÁMICAS	305
A.1	Primera ley de la termodinámica	305
A.2	La segunda ley de la termodinámica	307
B	DEGRADACIÓN DE RIGIDEZ	311
B.1	Bases del modelo de degradación	311
B.2	Algoritmo de implementación	318

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	5
C PLASTICIDAD	319
C.1 Bases de la ecuación constitutiva	319
C.2 Modelo J2 con endurecimiento isótropo y cinemático	323
C.2.1 Algoritmo de implementación	325
Referencias	327

Parte I

INTRODUCCIÓN Y ESTADO
DEL ARTE

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

1.1 MOTIVACIÓN

Como se sabe, la simulación del comportamiento de los materiales es uno de los principales problemas de la física. Dicho comportamiento se formula a través de la *Mecánica de Medios Continuos*. Por lo general, esta representación del comportamiento de los materiales se realiza bajo un punto de vista macroscópico, a través del cual se admite que el medio se comporta como un continuo homogéneo. De esta manera, es posible representar el comportamiento de diversos materiales que además se suponen isótropos, por ejemplo: materiales elásticos, plásticos, viscosos y con degradación. Sin embargo, muchos de los materiales utilizados en la construcción e industria son materiales heterogéneos, es decir constituidos por la combinación de dos o más componentes. A estos materiales se les denomina *materiales compuestos* o simplemente *compuestos*, definiéndoseles como el medio o material heterogéneo que resulta de la combinación de dos o más materiales componentes o fases. En estos materiales la combinación de las fases se produce sin una reacción química que produzca un nuevo material homogéneo, como es el caso de las aleaciones. Además, se considera que en todo el dominio del compuesto los componentes guardan igual proporción y distribución.

Los compuestos abarcan un amplio grupo de materiales utilizados por el hombre a lo largo de la historia, pero es en las últimas décadas cuando el avance tecnológico exige de materiales con estrictas características de resistencia, ductilidad y durabilidad. La imposibilidad de conseguir tales características con materiales convencionales, o factores de tipo económico, han impulsado a la investigación y al desarrollo de nuevos materiales. Entre ellos, los materiales compuestos ofrecen una cuantiosa variedad de posibilidades com-

binando diferentes materiales, formas, proporciones y distribuciones de los componentes.

En las últimas décadas se ha registrado una clara tendencia a elevar el uso de esta clase de materiales y se prevé un mayor aumento para los próximos años. Un ejemplo de ello se indica en la Figura 1.1, la cual se presentó en el *II Congreso Nacional de Materiales Compuestos* celebrado en Madrid (1997). Este gráfico pertenece a un estudio realizado por la empresa Rolls Royce (1990), que analiza "la tendencia del uso de materiales en turbinas de gas aeronáuticas".

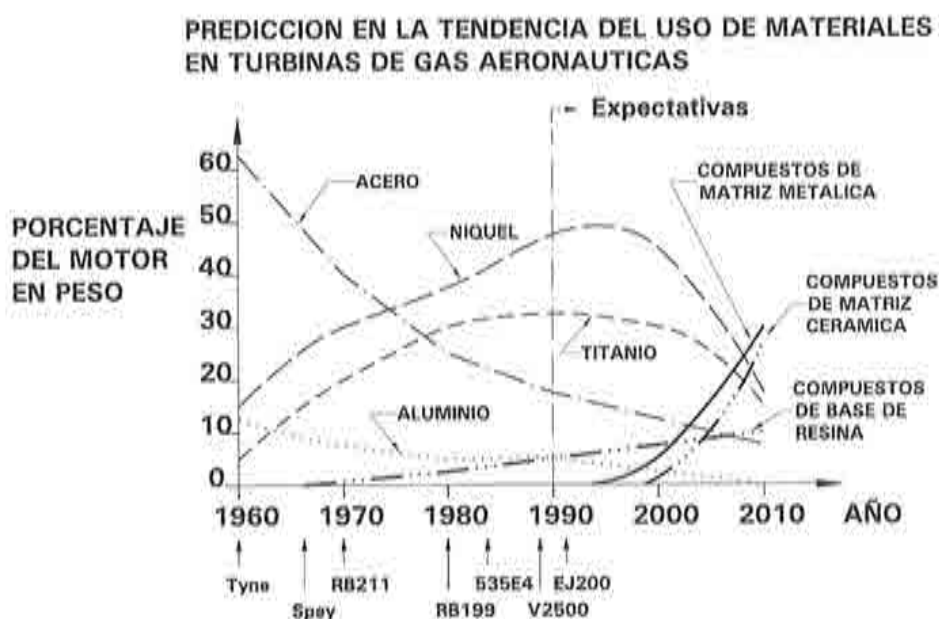


Figura 1.1: Expectativas del uso de materiales en turbinas de gas aeronáuticas, de acuerdo a un estudio realizado por la empresa Rolls Royce.

La figura representa el uso y proyección de los materiales tradicionalmente utilizados, tales como: el níquel, el acero y el titanio, así como también los materiales compuestos usados por esta clase de industria. Según este gráfico los materiales compuestos van desplazando progresivamente a los materiales tradicionales. Pero en la práctica, dicho avance se ve frenado debido a los problemas que se derivan del uso de materiales heterogéneos, tales como: delaminación, desprendimiento de fibras, disminución de la durabilidad ante cargas cíclicas de temperatura y humedad, dispersión de resultados, fa-

bricación, etc. Sin embargo, pese a todos estos inconvenientes, los materiales compuestos siguen ganando terreno frente a los materiales tradicionales. Por consiguiente, es cada vez más importante modelar adecuadamente su comportamiento.

1.2 PRESENTACIÓN DEL PROBLEMA

El presente trabajo se enmarca dentro de las teorías y métodos que hacen posible la representación por ordenador de los materiales compuestos. Como se sabe, la búsqueda de leyes matemáticas que determinan el comportamiento de esta clase de materiales ha sido objeto de estudio durante varias décadas. Pero, su elevada dificultad conduce a elaborar complejas teorías; o por el contrario, se utilizan grandes simplificaciones cuyo resultado genera modelos poco acertados.

Las leyes que gobiernan el comportamiento tenso-deformacional de los materiales se formula a través de rigurosos conceptos físicos y matemáticos desarrollados dentro del contexto de la *Mecánica de Medios Continuos* (Malvern, 1969). Estas leyes de comportamiento se denominan *ecuaciones constitutivas* y pueden ser: elásticas, plásticas, viscosas, de degradación, entre otras. La mecánica computacional a través de métodos numéricos como el *Método de los Elementos Finitos* (Zienkiewicz & Taylor, 1994a) (Bathe, 1982) (Hughes, 1987) (Oñate, 1992), integra dichas leyes de comportamiento y hace posible modelar por ordenador cualquier estructura (cuyos materiales obedecen el comportamiento dictado por las ecuaciones constitutivas).

Sin embargo, el uso directo del Método de los Elementos Finitos no resulta conveniente para la representación de los materiales compuestos, puesto que, cada material componente tiene su propia ley constitutiva y esta ley es válida únicamente en el dominio de dicho componente. Por consiguiente, las dimensiones de los elementos finitos deben tener menores (o al menos iguales) dimensiones que los materiales componentes, para que cada uno de los elementos no contenga más de un material. Esto trae muchos inconvenientes de orden práctico a la hora de realizar una discretización de un cuerpo constituido por un material compuesto, ya que las dimensiones de cada componente usualmente son muy pequeñas con respecto a las dimensiones globales del cuerpo, y en consecuencia se genera una gran cantidad de elementos. Obviamente, esto provoca que la cantidad de información y cálculos necesarios para obtener la solución del problema superen fácilmente las capacidades actuales de procesamiento en ordenador o al menos su costo

computacional es demasiado alto para fines prácticos.

Frente a este problema, la alternativa natural es suponer que el compuesto es un material homogéneo a nivel macroscópico. Para ello se requiere de una ley de comportamiento global del compuesto, donde esté acotado el espacio de tensiones y deformaciones admisibles, tanto en el rango lineal como en el no lineal y que obedezcan las leyes de la termodinámica. Esto se consigue admitiendo algunas suposiciones acerca de su comportamiento, de donde se derivan diferentes modelos. De manera general, estos métodos se los conoce como *macromodelos*. Aquí se pueden encontrar una extensa cantidad de modelos para materiales con determinada clase de fibras largas o fibras cortas, laminados con fibras en una o varias direcciones, laminados de una o varias capas, etc. Estos modelos no pueden ser generalizados, ya que se derivan del estudio particular de cierta clase de compuestos, por consiguiente no son objeto de estudio en esta Monografía. Una recopilación de algunos de los principales modelos se puede encontrar en las siguientes referencias (Hull, 1987) (Oñate *et al.*, 1991) (Car, 2000).

Una de las principales ideas que explotan los macromodelos es el uso de las ecuaciones constitutivas estándar desarrolladas para materiales homogéneos e isotropos, a través de algunas modificaciones que permiten suponer un comportamiento ortótropo e incluso anisótropo. Bajo esta perspectiva se desarrollaron los primeros criterios de fluencia como una generalización del *criterio de fluencia de von Mises* (Hill, 1948). Los criterios más conocidos son: el de *máxima tensión*, el de *rotura de Azzi-Tsai-Hill* y el de *fluencia de Tsai-Wu* (Tsai, 1974) (Tsai & Wu, 1971). Posteriormente se han realizado varias propuestas, entre ellas una forma general de establecer leyes de comportamiento para materiales anisótropos a través de la *teoría de mapeo de espacios* (Betten, 1981) (Betten, 1988) (Oller *et al.*, 1995a). Este método utiliza las ecuaciones constitutivas estándar a través de una transformación del espacio real anisótropo de tensiones y deformaciones en un espacio virtual isotropo. Para lo cual se requiere parametrizar dichos espacios en base a ensayos de laboratorio. Sin embargo, se debe tomar en cuenta que *los resultados de los ensayos de laboratorio realizados sobre un determinado material compuesto no son extrapolables a otros materiales compuestos*. Por ende, al cambiar las propiedades, forma, proporción o distribución de algún componente el material resultante es otro compuesto que se comporta de forma distinta.

Por otra parte, una de las técnicas más utilizadas para representar el comportamiento de los materiales compuestos es la *teoría de mezclas* (Trus-

dell & Toupin, 1960). Este método trata al compuesto como un material homogéneo, en el cual participan el comportamiento de los diferentes constituyentes de acuerdo a su proporción en volumen. La formulación convencional admite que la deformación de los materiales componentes o fases es la misma (Green & P., 1965) (Ortiz & Popov, 1982a) (Ortiz & Popov, 1982b). Una nueva propuesta permite una deformación diferente en las distintas fases bajo el concepto de *deformación serie-paralelo* (Oller *et al.*, 1995b). Una nueva propuesta de carácter general para compuestos reforzados con fibras se realiza a través de una combinación de la teoría de mezclas con la teoría de anisotropía mediante mapeo de espacios (Car, 2000).

La obtención de leyes únicamente macroscópicas tienen el inconveniente de carecer de información microestructural, la cual es fundamental para analizar los fenómenos micromecánicos que generan el comportamiento no lineal de los materiales compuestos. Con el propósito de solventar este inconveniente se buscó nuevas alternativas basados en el estudio del comportamiento de la estructura interna de estos materiales, lo cual dió lugar a una nueva forma de obtener leyes de comportamiento denominada *micromodelos* (Obraztsov & Vasilev, 1982). En éstos se estudia los micromecanismos que se generan en el compuesto en base a ensayos sobre un determinado material compuesto. Bajo un punto de vista similar se han abierto paso una serie de métodos que utilizan doble escala (o múltiples escalas). Es decir, se aborda el problema de los materiales compuestos bajo dos puntos de vista diferentes, uno macroscópico y otro microscópico. De tal forma que se buscan las propiedades del compuesto a través de la información microscópica que se genera en un volumen representativo. De la manera de representar dicho volumen se derivan diferentes métodos, entre estos se puede citar: el *modelo de ensamble de esferas* (Hashin, 1962) (Hashin, 1983), el *self-consistent method* (Hill, 1965) (Budiansky, 1965) (Hashin, 1970) (Christensen, 1979), el *método de Mori-Tanaka* (Mori & Tanaka, 1973) y los métodos que utilizan una *celda unidad* (*teoría de promedios* y la *teoría de los desarrollos asintóticos*). De estos diferentes métodos, los de la última clase tienen mayor aceptación y es justamente en donde se ha encontrado una gran potenciabilidad, razón por la cual se estudian en la presente monografía, bajo el nombre genérico de *teoría de homogeneización*. Esta teoría ha sido objeto de discusión durante más de tres décadas, tiempo en el cual ha recibido importantes contribuciones, principalmente por investigadores franceses, holandeses y norteamericanos. No obstante, hace más de 30 años, Hill (Hill, 1967) puntualizó el mayor inconveniente del estudio de un material a nivel microestructural (“...for non-linear systems, the computations needed to establish any constitutive law are formidable indeed ...”) el cual es el enorme esfuerzo computacional

que se requiere.

1.3 OBJETIVOS

En la práctica, la complejidad de la representación numérica de los materiales compuestos conduce a caracterizar cada clase de éstos materiales a través de métodos distintos. Así por ejemplo, existen modelos numéricos orientados a representar el comportamiento de determinados materiales reforzados con fibras continuas, otros para determinados materiales reforzados con fibras cortas, otros para cierta clase de mamposterías, etc. Cada uno de estos modelos está fundamentado en diferentes suposiciones y simplificaciones que sólo son aceptables para un determinado tipo de compuesto, en consecuencia no pueden ser generalizados. Todo esto hace del tratamiento numérico de los materiales compuestos un tema engorroso. Por el contrario, en este trabajo se busca estudiar al compuesto bajo un punto de vista general y en lo posible se desea obtener información acerca de los fenómenos que se producen a nivel de componentes, con el propósito de reproducir el comportamiento del material compuesto tanto a un nivel global como local. De acuerdo a la literatura sobre el tema, los métodos que generan esta información son aquellos que utilizan dos escalas.

De la revisión de los métodos existentes en dos escalas, como la teoría de promedios, la teoría de la expansión asintótica y las nuevas propuestas que se han realizado en estos últimos años, se busca puntos de convergencia que establezcan una base conceptual sólida, que permita obtener las propiedades locales y globales del compuesto. La formulación establecida debe ser clara y rigurosa, pero sobre todo capaz de determinar el comportamiento de diferentes compuestos. Para ello se requiere determinar las ecuaciones de gobierno, establecer convenientemente el problema de valores de contorno del compuesto en cada una de las dos escalas y formular la solución del problema mediante las técnicas numéricas adecuadas como lo es el Método de los Elementos Finitos (MEF). Este último punto implica, abordar el problema de su implementación, imposición de las condiciones de contorno, solución bajo un contexto macro-micro-estructural, convergencia, etc. Finalmente, validar el método propuesto con los otros métodos presentados, aplicar el método desarrollado para el estudio de un grupo amplio de compuestos (por ejemplo: compuestos formados de fibra y matriz) y contrastar los resultados obtenidos con resultados de ensayos experimentales, para determinar la validez y alcance de la propuesta. De manera general, la presente investigación tiene como objetivo contribuir con el desarrollo de un método capaz de caracterizar diferentes materiales compuestos y de ser posible bajo la formulación estándar de la *Mecánica de Medios Continuos*.

1.4 CONTENIDO

El tema de materiales compuestos abarca un amplio conjunto de conocimientos (como por ejemplo: clases de materiales compuestos, clases de materiales componentes, tratamientos de los materiales utilizados, procesos de fabricación, ensayos de laboratorio, aplicaciones, etc) que se encuentran distribuidos en diferentes ramas de la ingeniería: la química, la industrial, la civil y la aeronáutica. El presente trabajo de investigación centra el estudio en la representación del comportamiento tenso-deformacional de estos materiales por ordenador y evita el resto de temas, ya que para ellos existe textos especializados con información detallada al respecto. Esta monografía está orientada al tratamiento numérico de los materiales compuestos a través de la *teoría de homogeneización*, en base a la *Mecánica de Medios Continuos* estándar.

La primera parte de este trabajo está constituida por el presente capítulo de *Introducción* y un segundo capítulo denominado *Estado del Arte*, en el cual se revisan algunos de los principales métodos para modelizar los compuestos mediante homogeneización. Estos métodos se exponen de manera que en lo posible guarden tanto un orden histórico como conceptual. Dentro del Estado del Arte se recoge los trabajos de mayor relevancia de la *teoría de homogeneización*, como lo es: el *método de promedios* (Hill, 1967) (Mandel, 1972) (véase el apartado 2.2) y el *método de los desarrollos asintóticos* (Sanchez-Palencia, 1980) (Bensoussan *et al.*, 1978) (Duvaut, 1976) (véase el apartado 2.3), en donde se formulan los conceptos generales de esta teoría. La extensión de la teoría de homogeneización al rango no lineal conduce a encontrar que las variables de estado macroscópicas dependen de un infinito número de variables internas microscópicas (Suquet, 1982) (Suquet, 1987) (véase el apartado 2.4). A continuación se comentan diferentes propuestas presentadas en los últimos años (véase el apartado 2.5), en donde se formulan nuevas formas de imponer las condiciones de contorno y nuevas propuestas para solucionar el problema no lineal a través de métodos en dos escalas.

En la segunda parte de la Monografía se presenta una propuesta innovadora de la formulación de la *teoría de homogeneización* para medios periódicos (véase capítulo 3). Esta recoge los principales conceptos presentados en las propuestas anteriores, tales como: la división del problema del material compuesto en dos escalas y la utilización de un *volumen elemental representativo* para su representación a nivel microestructural. La formulación desarrollada se fundamenta en el concepto de *periodicidad local* (Sanchez-Palencia, 1987) (Levi, 1987), y concuerda con la hipótesis (que es de aceptación general) que los valores efectivos macroscópicos de tensiones y deformaciones correspon-

den al promedio de los valores microscópicos. Sin embargo, antes de proceder a determinar las magnitudes locales (y el correspondiente paso a sus valores globales), se requiere profundizar acerca de las consecuencias de la simetría de la microestructura y su división en unidades estructurales (véase el apartado 3.2). Lo cual permite establecer varios conceptos que posteriormente son utilizados para construir un puente desde las magnitudes locales hacia las magnitudes globales. En especial, a través de los *vectores de periodicidad* de una *celda unidad* se obtiene el *tensor de deformación homogeneizado*, dicho tensor representa una medida de la deformación global del dominio representativo (véase el apartado 3.4). Por otra parte, partiendo de la *ecuación de equilibrio* a nivel microestructura (bajo la hipótesis de periodicidad local) y definiendo el *tensor de tensiones homogeneizado* en base a la clásica teoría de promedios, se obtiene la ecuación de equilibrio a nivel macroscópico (véase el apartado 3.5). A continuación, se formula el problema de valores de contorno a nivel de la microestructura (véase apartado 3.6), pero en este caso se prescinde de la utilización de tensores de influencia (Hill, 1967), concentración (Mandel, 1972) o localización (Suquet, 1987), como también de las funciones periódicas (Sanchez-Palencia, 1980) (Lene & Duvaut, 1981). En el subapartado 3.6.6 se soluciona el problema mediante el Método de los Elementos Finitos (MEF). La implementación de las condiciones de contorno apropiadas se realiza a través de los *multiplicadores de Lagrange* (véase subapartado 3.6.7). En la siguiente apartado (3.7), se extiende esta teoría a medios que presentan poros o agujeros. Toda esta formulación permite abordar el problema microestructural de un compuesto de forma clara, como una extensión de la *mecánica de medios continuos* hacia el estudio de estructuras periódicas.

En el capítulo 4 se aborda el problema en las dos escalas. En primer lugar se discute acerca de la idealización y las consideraciones de la teoría de homogeneización (véase apartado 4.1). A continuación se formula el problema lineal (véase apartado 4.2). Para su solución se requiere obtener las *constantes elásticas del compuesto*, para ello se propone un método coherente con la formulación utilizada, véase el subapartado 4.2.3. A continuación, el problema elástico de materiales compuestos se soluciona mediante el Método de los Elementos Finitos en dos escalas, pero de forma desacoplada (véase subapartado 4.2.6). La formulación del problema no lineal de materiales compuestos se presenta en el apartado 4.3. En este caso, la ley de comportamiento del compuesto se obtiene a través de la celda unidad (véase subapartado 4.3.2), esta ley de comportamiento está conducida por la deformación global del compuesto y formulada en el espacio de tensiones microscópicas. La solución global del problema requiere del acoplamiento de la macroestructura con la microestructura (véase el subapartado 4.3.4), esto se consigue numéricamente

mediante la solución discreta del problema de valores de contorno en cada una de las dos escalas mediante un *Método de Elementos Finitos en Dos Escalas* (véase el apartado 4.4). En donde, la solución del problema no lineal se realiza dentro de un esquema iterativo a nivel macroscópico y microscópico. A nivel macroscópico, la estrategia de convergencia utilizada corresponde al *método de cuasi-Newton*, para esto se propone la obtención de un *tensor constitutivo homogeneizado secante* a través de dos métodos, con cada uno de los cuales se acelera la convergencia y consecuentemente se disminuye el coste numérico de los problemas no lineales (subapartados 4.4.2 y 4.4.3). La implementación del código del Método de Elementos Finitos en Doble Escala (MEFDE) se presenta en el apartado 4.5. Como una importante herramienta para la implementación y optimización de la propuesta se utiliza la paralelización (a través de PVM ("Parallel Virtual Machine"), véase el subapartado 4.5.5), con lo cual se mejora sustancialmente el tiempo de cálculo. La estructura del programa en paralelo permite dividir el problema en varios procesos de menores dimensiones, que pueden ser abordados ya sea en un ordenador con varios procesadores o por varios ordenadores conectados en red.

Finalmente, en la tercera parte de la Monografía se presenta la aplicación y validación de la propuesta. En primer lugar se realiza el estudio dentro del rango elástico de simples compuestos con el propósito de aclarar algunos de los conceptos presentados, como por ejemplo: la imposición de las condiciones de contorno, la determinación de las propiedades elásticas del compuesto y el posible mejoramiento de los resultados mediante un refinamiento de malla (véase capítulo 5). Luego se aplica el método propuesto a la obtención del comportamiento lineal y no lineal de materiales reforzados con fibras en una sola dirección (fibras largas y fibras cortas). En este caso, se estudia de forma separada el comportamiento en dirección longitudinal a la fibra y el comportamiento transversal a la fibra (véase capítulo 6). A continuación se soluciona problemas no lineales en las dos escalas. Entre estas aplicaciones se tiene: la determinación del comportamiento de un tubo grueso sometido a presión interior, el material de este ejemplo corresponde a un compuesto reforzado con fibras (véase el apartado 7.1). Después se presenta el ensayo a cortante de una pared de mampostería de ladrillo (véase el apartado 7.2). Por último se representa un ensayo de una probeta de una matriz epoxi con fibras continuas (véase el apartado 7.3). Los resultados de estos ejemplos se contrastan con otros métodos o con ensayos experimentales. Finalmente, se presentan las conclusiones y futuras líneas de investigación. El apéndice contiene un breve resumen de las leyes de la termodinámica y la formulación de las ecuaciones constitutivas utilizadas para representar el comportamiento de los materiales componentes.

Capítulo 2

TEORÍA DE HOMOGENEIZACIÓN.- ESTADO DEL ARTE

2.1 INTRODUCCIÓN

La representación del comportamiento de los materiales homogéneos se consigue a través de leyes o ecuaciones matemáticas formuladas (dentro del contexto de la *mecánica de medios continuos*) a nivel macroscópico. Así, la mayoría de formulaciones extrapolan dicho concepto y conciben el comportamiento de los materiales compuestos bajo un punto de vista macroscópico, aunque ello conlleva a ignorar lo que sucede a nivel de los materiales constituyentes. Sin embargo, desde hace algunas décadas se han realizado formulaciones que buscan obtener el comportamiento global del compuesto mediante los campos de tensiones y deformaciones que se producen a nivel de los materiales componentes. De aquí surgen nuevas formas de representar el comportamiento de los materiales heterogéneos dentro de un contexto multi-escala, en donde se utiliza un *volumen elemental representativo* para modelizar al compuesto; entre éstas se puede citar el *modelo de ensamble de esferas* (Hashin, 1962) (Hashin, 1983) en donde se llena un dominio mediante esferas de diferente talla, respetando la relación volumétrica de las fases. Otros trabajos proponen un método que se denomina "*self-consistent method*" (Hill, 1965) (Budiansky, 1965) (Hashin, 1970) (Christensen, 1979) en donde se representa las heterogeneidades de un medio como una inclusión (elipsoidal o cilíndrica) dentro de una matriz infinita de propiedades elásticas desconocidas. Por otra parte, se propone también modelos micromecánicos basado en el *método de Mori-Tanaka* (Mori & Tanaka, 1973), estos consideran fibras o fracturas de

forma elipsoidales, cilíndricas o planas embebidas en una matriz isotropa, transversalmente isotropa u ortótropa. En general, estos métodos siguen una formulación con *autodeformaciones* ("eigenstrain")¹ (ε_{ij}^*), en donde se considera un sólido elástico lineal, homogéneo e infinito y se admite la inclusión de una *autodeformación* ("eigenstrain") uniforme dentro una región elipsoidal. Esta idea es originalmente propuesta por Eshelby (Eshelby, 1958).

Por otra parte, de acuerdo a (Sanchez-Palencia, 1987), en el estudio de los medios heterogéneos se puede adoptar dos puntos de vista diferentes. Uno de ellos se denomina *global o macroscópico*. En éste las dimensiones de las heterogeneidades del medio son muy pequeñas y por lo tanto son ignoradas. En consecuencia, se considera que el compuesto es un material homogéneo. Para ello se utiliza una *escala global* representada por x_i , tal como lo presenta la Figura 2.1. El otro punto de vista que se adopta es el *local o microscópico*, en donde se analiza la estructura interna del compuesto. Para ello se utiliza una *escala local* y_i , en la cual se representa una porción del medio conocido como *volumen elemental representativo*. Dicho dominio está formado por los pequeños constituyentes o fases. Naturalmente, se supone que las dimensiones de las fases son suficientemente grandes como para satisfacer las hipótesis de la mecánica del continuo, es decir mucho mayores a la distancia entre moléculas.

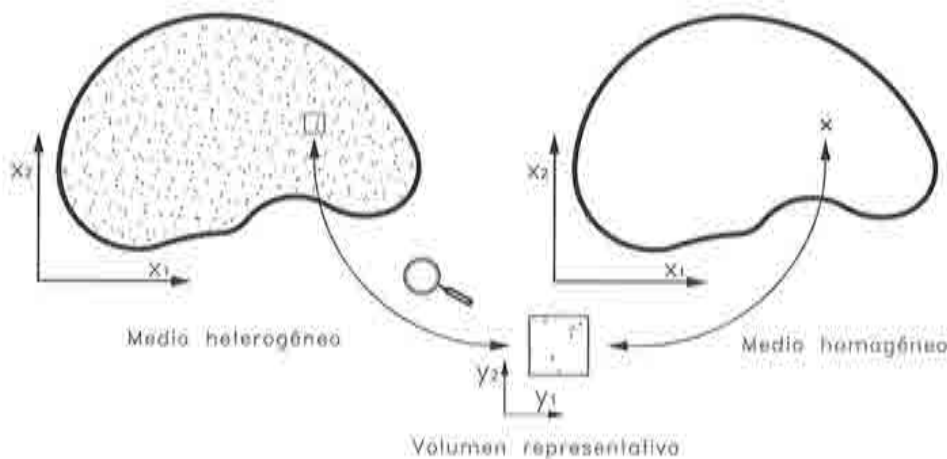


Figura 2.1: Teoría de homogeneización; utilización de dos escalas.

¹Se admite que la *deformación total* está formada por una parte elástica y otra inelástica prescrita ($\varepsilon = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^*$).

Se considera además la hipótesis que el medio heterogéneo es *estadísticamente homogéneo*, aunque la experiencia obtenida sugiere que conseguir un dominio estadísticamente homogéneo no es tarea fácil, sin embargo se parte de la idea que es posible determinar un volumen elemental representativo (Suquet, 1987). Bajo estos conceptos pueden encontrarse diferentes formulaciones, tales como: el *método de promedios*, la *teoría de la expansión asintótica*, etc. A continuación se revisan algunos de los desarrollos de mayor relevancia.

2.2 MÉTODOS DE PROMEDIOS

2.2.1 Introducción

El *método de promedios*, también denominado *método heurístico*, fue el punto de partida del trabajo de investigación realizado por Suquet (Suquet, 1982), en donde se proponen varias aportaciones a la teoría de homogeneización, aquí se presentan algunas de ellas. Este autor define la teoría de homogeneización como: *el procedimiento que consiste en sustituir un material fuertemente heterogéneo por un material homogéneo el cual se desea equivalente al precedente dentro del rango usual de cargas*. Se denomina material *fuertemente heterogéneo* (o material compuesto) un material dentro del cual una muestra de tamaño manipulable contiene un gran número de heterogeneidades (granos, cristales, fibras, agujeros, fisuras, etc) embebidos dentro de una matriz de propiedades diferentes (la matriz y las heterogeneidades son los constituyentes).

Con el propósito de obtener una ley de comportamiento macroscópico de algunos materiales, Hill (Hill, 1967) y Mandel (Mandel, 1972) proponen que dichas magnitudes pueden ser obtenidas a través del *promedio* de las magnitudes microscópicas que definen el estado del sistema. Es decir, sea V el volumen de un dominio representativo del medio heterogéneo. Entonces, las variables macroscópicas de tensiones o deformaciones se obtienen a través del promedio de sus respectivos valores microscópicos dentro de dicho dominio, esto es:

$$\sigma^x = \langle \sigma \rangle_V, \quad \text{ó} \quad \epsilon^x = \langle \epsilon \rangle_V \quad (2.1)$$

donde σ^x y ϵ^x representan los tensores de tensiones y deformaciones a nivel macroscópico², σ y ϵ son los campos correspondientes de tensiones y defor-

²En el trabajo de Suquet, así como en la *teoría de la expansión asintótica*, los tensores a nivel macroscópico se representan como: σ^0 y ϵ^0 .

maciones a nivel microscópico³. El paso de estos campos microscópicos a sus respectivos macroscópicos se justifica a través del *operador promedio* $\langle \cdot \rangle$, el cual se encuentra definido de la siguiente forma: Sea x las coordenadas de un punto bajo la escala macroscópica, V el dominio del volumen representativo y la función f es una variable de estado de dicho dominio que depende de dos escalas: una x , que representan las variables macroscópicas y otra y para las variables microscópicas⁴, entonces:

$$f^x(x) = \frac{1}{V} \int_V f(x, y) dV := \langle f(x, y) \rangle_V \quad (2.2)$$

y considerando como variables de estado los tensores de tensiones y deformaciones, se tiene

$$\sigma^x(x) = \langle \sigma(x, y) \rangle_V \quad \delta \quad \varepsilon^x(x) = \langle \varepsilon(x, y) \rangle_V$$

En este caso, el problema dentro de la escala microscópica exhibe dos diferencias notables con respecto al clásico problema de valores de contorno:

- 1) Las cargas consisten en promedios de campos y no de desplazamientos o fuerzas de masa o superficie.
- 2) No existen o no están claras las condiciones de contorno en el dominio representativo.

En cualquier caso, el problema elástico de los materiales compuestos se aborda de la siguiente manera: se busca obtener de forma aproximada el *tensor constitutivo homogeneizado elástico* C^x (o su inverso D^x). Con lo cual, es posible desacoplar el problema y establecer una la ley de comportamiento del medio heterogéneo elástico, como una función cuyas variables dependen únicamente de la escala macroscópica x . Suquet generaliza el método de promedios y lo aplica a medios periódicos.

³Cuando puede haber confusión se expresan como: σ^y y ε^y .

⁴Dentro del capítulo del Estado del Arte, constantemente se requiere hacer referencia a una función cualquiera f que depende de más de una escala o variables (las cuales pueden ser no escalares), por ejemplo: (x, y) . En tales casos, se ha preferido representar las variables dentro del paréntesis como escalares, esto es: $f(x, y)$ en vez de $f(x, y)$.

2.2.2 Formulación en deformaciones (caso general)

La ley de comportamiento de un medio heterogéneo en función de sus dos escalas, macroscópica y microscópica, se escribe:

$$\sigma_{ij}(x, y) = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}(u(x, y)) \quad (2.3)$$

donde C es el tensor constitutivo elástico en un punto. De acuerdo con la condición de promedio (ver ecuación 2.1), las magnitudes macroscópica cumplen:

$$\sigma_{ij}^x(x) = \langle \sigma_{ij}(x, y) \rangle_V = \langle C_{ijkl}(x, y) \varepsilon_{kl}(u(x, y)) \rangle_V \quad (2.4)$$

se admite que, en cualquier instante la deformación microscópica⁵ $\varepsilon(u(x, y))$ es una función lineal de su homóloga macroscópica $\varepsilon(u^x(x))$, entonces se puede representar como

$$\varepsilon_{ij}(u(x, y)) = d_{ijkl} \varepsilon_{kl}(u^x(x)) \quad (2.5)$$

donde, el tensor d es el tensor de transformación que se denomina *tensor de concentración de deformaciones*. Reemplazando la ecuación 2.5 en la ecuación 2.4 se obtiene

$$\sigma_{ij}^x(x) = C_{ijkl}^x(x) \varepsilon_{kl}(u^x(x)) \quad (2.6)$$

en donde, $C_{ijkl}^x = \langle C_{ijpq} d_{pqkl} \rangle_V$ es el tensor constitutivo efectivo del medio heterogéneo. Por consiguiente, la ley de homogeneización es un *promedio de la ley microscópica ponderada por un tensor de concentración de deformaciones* d (también llamado *tensor de influencia* (Hill, 1967) o *tensor de localización* (Suquet, 1987)). Esta ley de homogeneización depende de dicho tensor, el cual permite obtener la deformación microscópica en función de la macroscópica.

Método de Hill-Mandel

Este método⁶ obtiene una ley constitutiva elástica del material compuesto mediante la aplicación de deformaciones macroscópicas ε^x impuestas al volumen representativo V . Entonces, considérese el siguiente problema de valores

⁵Usualmente cuando una variable se coloca como dependiente de dos escalas (x, y) se hace referencia principalmente al efecto microscópico.

⁶La presentación de este métodos se basa en el trabajo de Suquet (Suquet, 1982).

de contorno a nivel de la microestructura:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(y) &= C_{ijkl}(y) \varepsilon_{kl}^y(u(y)) & ; & & \varepsilon_{ij}^y &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j}{\partial y_i} \right) & \text{en } V \quad (2.7) \\ \frac{\partial \sigma_{ij}(y)}{\partial y_i} &= 0 & & & & \text{ecuación de equilibrio en } V \\ \bar{u}_i(y) &= \varepsilon_{ij}^x y_j & & & & \text{condición de contorno sobre } \partial V \end{aligned}$$

en donde, y_i representa las coordenadas de referencia para todas las partículas que pertenecen a V , σ representa el tensor de tensiones, ε^y es el tensor de deformaciones con respecto a la escala microscópica⁷, C es el tensor constitutivo elástico de los componentes y \bar{u} es un desplazamiento (uniforme) impuesto en el borde del volumen representativo. El conjunto de ecuaciones 2.7 establecen un problema elástico bien formulado de valores de contorno conocido como desplazamientos impuestos o *problema de Dirichlet* (acerca del problema de Dirichlet véase (Lublimer, 1990)), que admite una solución única.

Puesto que se considera que el problema es lineal, el campo de desplazamientos $u(y)$ es una función lineal del campo de deformación uniforme $\varepsilon(u^x)$ impuesto, entonces

$$u_i(y) = v_i^{kl}(y) \varepsilon_{kl}(u^x) \quad (2.8)$$

donde, v_i^{kl} es la componente (i) del vector de desplazamientos v^{kl} solución del problema 2.7 para un estado de deformación macroscópico unidad⁸, definido de la siguiente manera

$$\varepsilon_{ij}(u^x) = I_{ij}^{kl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (2.9)$$

donde I^{kl} es un tensor de segundo orden cuyos componentes (ij) se definen de forma similar al tensor identidad de cuarto orden I , es decir $I_{ij}^{kl} = I_{ijkl}$. Por ejemplo, para un problema bidimensional, se tiene

$$I^{11} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad ; \quad I^{22} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad ; \quad 2I^{12} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

⁷En algunos trabajos se representa la deformación con respecto a la escala macroscópica como ε_x en vez de ε^x y la deformación con respecto a la escala microscópica como ε_y en vez de ε^y .

⁸En este caso, $\varepsilon_{kl}(u^x)$ cumple únicamente la función de un parámetro del problema 2.7.

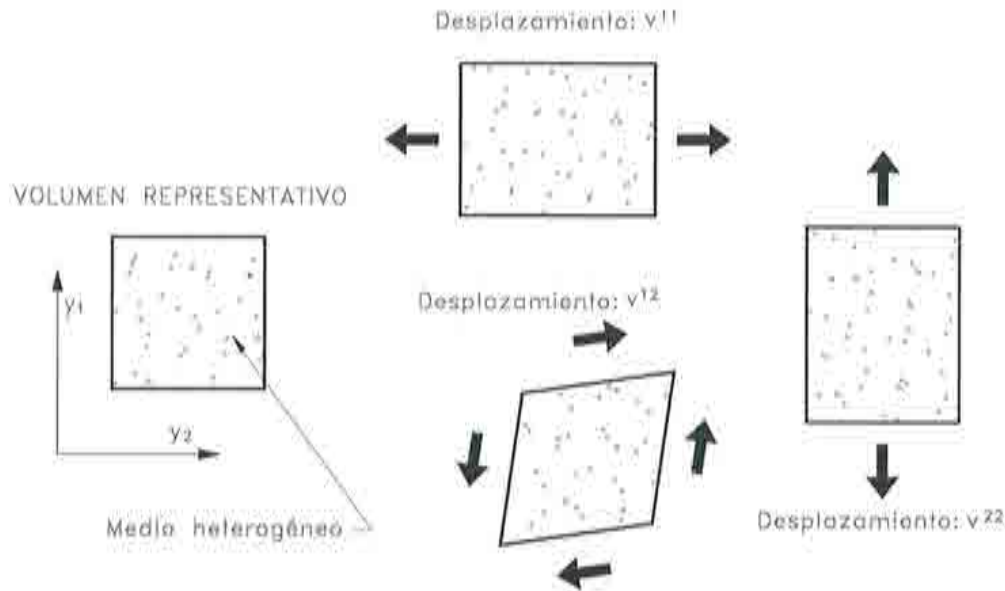


Figura 2.2: Desplazamientos impuestos a un volumen representativo de un medio heterogéneo.

De esta forma, v^{kl} son los desplazamientos microscópicos inducidos por las deformaciones macroscópicas unidad, tal como lo presenta la Figura 2.2, esto es:

v^{11} es el vector de desplazamientos microscópicos correspondiente a una deformación macroscópica de alargamiento puro en la dirección y_1 .

v^{22} es el vector de desplazamientos microscópicos correspondiente a una deformación macroscópica de alargamiento puro en la dirección y_2 .

v^{12} es el vector de desplazamientos correspondiente a una deformación macroscópica de cizallamiento puro en las direcciones y_1 y y_2 .

De la ecuación 2.8 se obtiene el campo de deformaciones

$$\varepsilon_{ij}^y(u(y)) = \varepsilon_{ij}^y(v^{kl}(y)) \varepsilon_{kl}(u^x) \quad \text{en } V \quad (2.10)$$

y el tensor d que interviene en la ecuación 2.5 corresponde a

$$d_{ijkl} = \varepsilon_{ij}^y(v^{kl}(y)) \quad \text{en } V$$

el tensor d se denomina *tensor de concentración de deformaciones*; éste relaciona las deformaciones microscópicas en función de la deformación macroscópica. Finalmente, se obtiene el tensor constitutivo elástico del compuesto C^w como un promedio de la ley microscópica ponderada a través del tensor de concentración de deformaciones,

$$C_{ijkl}^w = \langle C_{ijpq}(y) d_{pqkl}(y) \rangle_V \quad (2.11)$$

De acuerdo con Hill (Suquet, 1982), el tensor homogenizado $C_{ijkl}^w = \langle C_{ijpq} \varepsilon_{pq}(v^{kl}) \rangle_V$ presenta las siguientes simetrías:

$$C_{ijkl}^w = C_{jikl}^w = C_{klij}^w \quad (2.12)$$

cuya demostración se fundamenta en el siguiente lema de la energía elástica:

Lema de Hill: Sea v un campo de desplazamientos microscópicos y s un campo de tensiones microscópicas asociado que verifican una de las siguientes condiciones:

- $v_i = \varepsilon_{ij}^x y_j$ en ∂V , siendo ε_{ij}^x un valor constante aplicado a ∂V y además $\frac{\partial s_{ij}}{\partial y} = 0$ en V .
- $s_{ij} n_j = \sigma_{ij}^x n_j$ en ∂V , siendo σ_{ij}^x un valor constante aplicado a ∂V y además $\frac{\partial s_{ij}}{\partial y} = 0$ en V .

entonces:

$$\langle \varepsilon_{ij}^y(v) s_{ij} \rangle_V = \langle \varepsilon_{ij}^y(v) \rangle_V \langle s_{ij} \rangle_V \quad (2.13)$$

la demostración se encuentra en la referencia citada.

Formulación para materiales periódicos

Gran parte de los materiales compuestos corresponden a materiales periódicos, o bien si el material heterogéneo es del tipo aleatorio, se puede también analizar el volumen elemental a través de condiciones periódicas. En cualquier caso, para la idealización de los materiales compuestos, Suquet (Suquet, 1982) diferencia entre: *materiales periódicos* y *materiales cuasiperiódicos*. Se establece que los materiales o medios periódicos son aquellos que se pueden representar a través de una *celda base*, ya sea ésta paralelepípeda o hexagonal. En cambio, el término *cuasiperiódico* se justifica bajo la presencia de defectos en la periodicidad del material. Sin embargo, estos medios también pueden ser representados por una celdas base, admitiendo que sus características

geométricas, como también propiedades de los materiales componentes, son funciones continuas de las variables macroscópicas x_i . Es decir, dos celdas base vecinas son prácticamente idénticas, pero las celdas base alejadas pueden ser diferentes.

Suquet describe los campos microestructurales como campos fluctuantes provocados por la presencia de gran cantidad de pequeñas heterogeneidades, de aquí que estos campos son rápidamente oscilantes. Para establecer la formulación realiza las siguientes consideraciones: Sea Y el *volumen representativo* de un material periódico⁹, de tal forma que este dominio se repite periódicamente¹⁰. Considerando la geometría del medio, es natural la búsqueda de un campo de desplazamientos microscópicos $\mathbf{u}(y)$ tal que los campos de tensiones y deformaciones asociados sean periódicos. Para lo cual, se define un espacio periódico de tensiones S_{per} , como:

$$S_{per}(Y) = \{ \mathbf{s} | s_{ij} = s_{ij} ; \mathbf{s} | \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} \text{ es } Y\text{-antiperiódico}^{11} \}.$$

Se considera además, un campo de deformación periódico que es la combinación de campos lineales y campos periódicos, en consecuencia la cinemática del problema se describe como un espacio de desplazamientos periódicos DP (microscópicos), que cumple la siguiente condición:

$$DP(Y) = \{ \mathbf{u} | u_i = \varepsilon_{ij}^x y_j + \bar{v}_i ; \bar{v}_i \text{ es } Y\text{-periódico}^{12} \}.$$

Entonces, el desplazamiento microscópico $\mathbf{u}(y)$ se obtiene solucionando el siguiente problema de valores de contorno sobre la celda base:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(y) &= C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^y(u(y)) && \text{ecuación constitutiva en } Y(2.14) \\ \frac{\partial \sigma_{ij}(y)}{\partial y_i} &= 0 && \text{ecuación de equilibrio en } Y \\ \langle \varepsilon_{ij}^y(u) \rangle_Y &= \varepsilon_{ij}(u^x) && \text{ecuación de promedios} \\ \sigma &\in S_{per}(Y) , \quad \mathbf{u} \in DP(Y) && \text{restricciones periódicas} \end{aligned}$$

el problema anterior es un problema bien formulado que admite una solución

⁹Si el *volumen representativo* del medio heterogéneo corresponde a un medio periódico se representa el dominio con Y .

¹⁰En la literatura acerca de homogeneización, se utiliza la expresión: Y periódico para decir que Y es el período con el cual se repite una función determinada.

¹¹Entiéndase por *función Y -antiperiódica* una función que presenta, cada período Y , valores de la misma magnitud pero signo contrario.

¹²Entiéndase por *función Y -periódica* una función que presenta, cada período Y , los mismos valores.

única de σ y u (Suquet, 1982).

En virtud de la linealidad del problema 2.14 la solución de u se puede escribir como:

$$u_i = \tilde{v}_i^{kl}(y) \varepsilon_{kl}(u^x) \quad (2.15)$$

y \tilde{v}^{kl} representa un campo de desplazamientos periódico, el cual corresponde a la solución del siguiente problema elástico,

$$\begin{aligned} s^{kl} &= C(y) \varepsilon^y(\tilde{v}^{kl}) && \text{ecuación constitutiva en } Y \quad (2.16) \\ \frac{\partial s^{kl}}{\partial y} &= 0 && \text{ecuación de equilibrio en } Y \\ \langle \varepsilon^y(\tilde{v}^{kl}) \rangle_Y &= I^{kl}, \text{ donde:} && I_{ij}^{kl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{jk}\delta_{il}) \\ s^{kl} &\in S_{per}(Y), \tilde{v}^{kl} \in DP(Y) && \text{restricciones periódicas} \end{aligned}$$

en donde, s^{kl} representa el campo de tensiones microscópicas asociado a \tilde{v}^{kl} , y como en el caso precedente, este campo \tilde{v}^{kl} representa los desplazamientos microscópicos inducidos por las deformaciones macroscópicas unidad.

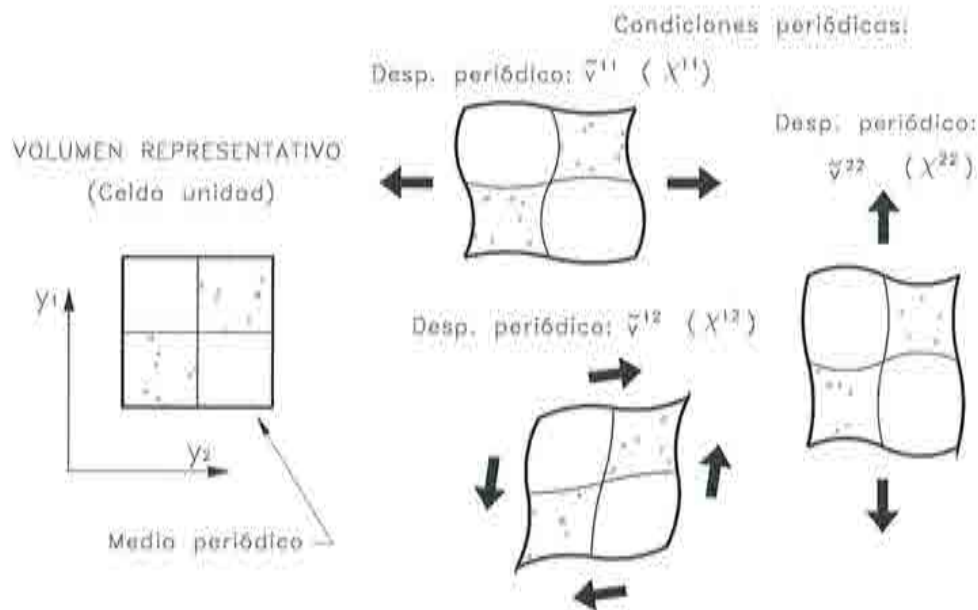


Figura 2.3: Imposición de desplazamientos periódicos a la celda.

El tensor de concentración de deformaciones \mathbf{d} , que interviene en la ecuación 2.5, se obtiene a partir de la ecuación 2.15,

$$d_{ijkl}(y) = \varepsilon_{ij}(\tilde{v}^{kl}(y)) \quad (2.17)$$

y los coeficientes del tensor constitutivo C_{ijkl}^x son determinados como el promedio dentro del volumen representativo de los coeficientes constitutivos elásticos (de los materiales componentes) ponderado por el tensor de concentración de deformaciones, esto es:

$$C_{ijkl}^x = \langle C_{ijpq} d_{pqkl} \rangle_Y$$

Suquet además presenta que es posible confirmar la simetría del tensor constitutivo mediante una pequeña variación del lema de Hill (ver ecuación 2.13).

Por otra parte, en la siguiente referencia (Lene & Duvaut, 1981), se indica que las funciones de desplazamiento periódico ($DP(Y)$) pueden generar problemas numéricos y es preferible usar unas *funciones periódicas* χ^{kl} , definidas como:

$$\chi_i^{kl} = \tilde{v}_i^{kl} - I_{ij}^{kl} y_j \quad (2.18)$$

en donde, las funciones χ_{ij} se obtienen a través de la solución de:

$$\int_Y C_{pqrs} \varepsilon_{rs}^y(\chi^{ij}) \varepsilon_{pq}^y(v) dy = - \int_Y C_{ijpq} \varepsilon_{pq}^y(v) dy \quad ; \quad \forall v \text{ periódico} \quad (2.19)$$

El uso de las funciones periódicas puede encontrarse con mayor detalle en las siguientes referencias (Lene & Duvaut, 1981) (Lene, 1986) (Guedes & Kikuchi, 1990). Dichas funciones periódicas es la forma usual de imponer las condiciones de contorno en el método que utiliza los desarrollos asintóticos (dentro del rango elástico), el cual se presenta más adelante.

2.2.3 Formulación en tensiones (caso general)

De manera similar que en la sección anterior, se puede formular la ley de comportamiento del material heterogéneo a través de las tensiones (Suquet, 1982). Entonces, el comportamiento del material compuesto, expresado en sus dos escalas, se escribe:

$$\varepsilon_{ij}(u(x, y)) = D_{ijkl}(x, y) \sigma_{kl}(x, y) \quad (2.20)$$

en donde el tensor D es el inverso del tensor constitutivo elástico C . De acuerdo con el método de promedios, las magnitudes macroscópicas deben cumplir:

$$\varepsilon_{ij}(u^x(x)) = \langle D_{ijkl}(x, y) \sigma_{kl}(x, y) \rangle_V \quad (2.21)$$

Admitiendo una relación lineal entre las tensiones microscópicas σ en función de su promedio $\langle \sigma \rangle = \sigma^x$, se tiene

$$\sigma_{ij}(x, y) = c_{kl ij}(x, y) \sigma_{kl}^x(x) \quad (2.22)$$

reemplazando la ecuación 2.22 en 2.21 resulta:

$$\varepsilon_{ij}(u^x(x)) = D_{ijkl}^x(x) \sigma_{kl}^x(x) \quad (2.23)$$

donde:

$$D_{ijkl}^x(x) = \langle D_{ijpq}(x, y) c_{klpq}(x, y) \rangle_V \quad (2.24)$$

La ley de homogeneización 2.23 y 2.24 es un *promedio de la ley microscópica ponderada para un tensor c denominado tensor de concentración de tensiones* (Mandel, 1972) (Suquet, 1982).

Método de Hill-Mandel

Como en el caso anterior¹³, considérese un volumen representativo V del material compuesto. Entonces a nivel de la microestructura se plantea el siguiente problema elástico:

$$\varepsilon_{ij}^y(y) = D_{ijkl}(y) \sigma_{kl}(y) \quad \text{ecuación constitutiva en } V \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}(y)}{\partial y_i} = 0 \quad \text{ecuación de equilibrio en } V \quad (2.26)$$

$$\bar{t}_i = \sigma_{ij}^x n_j \quad \text{condición de contorno sobre } \partial V \quad (2.27)$$

¹³La presentación del método se basa en el trabajo de investigación de (Suquet, 1982).

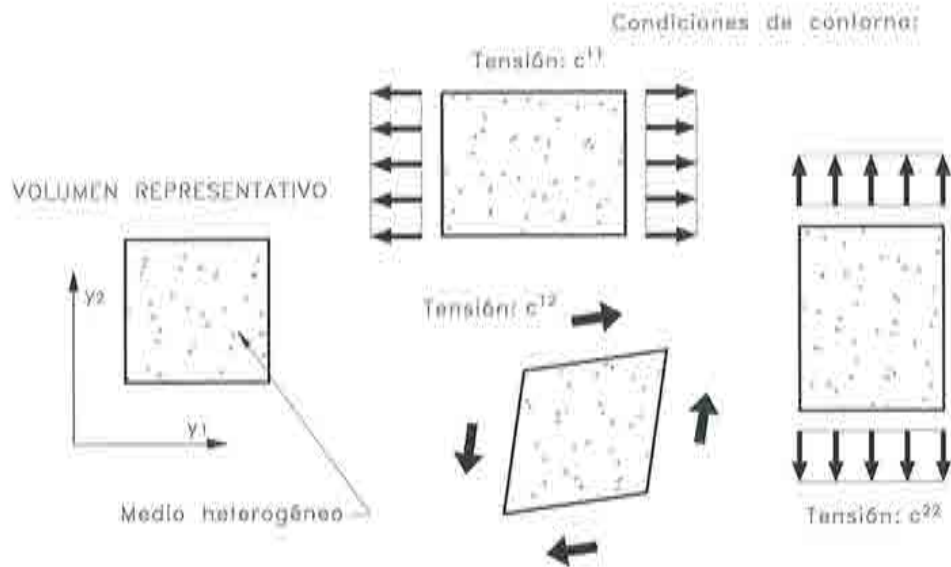


Figura 2.4: Tensión uniforme impuesta a un volumen representativo de un medio heterogéneo.

Las ecuaciones anteriores describen un problema bien formulado de valores de contorno conocido como de fuerzas impuestas o *problema de Neumann* (acerca del problema de Neumann véase (Lublimer, 1990)). En efecto, ya que se verifica que el momento angular de fuerzas exteriores es nulo, esto asegura la existencia de una solución única (Suquet, 1982) de los campos de tensiones y desplazamientos (σ, u) . De acuerdo a la condición de promedios sobre el campo de tensiones, se tiene

$$\langle \sigma_{ij}(y) \rangle_V = \sigma_{ij}^x \quad (2.28)$$

y admitiendo la linealidad del problema, es posible escribir

$$\sigma_{ij}(y) = c_{ij}^{kl}(y) \sigma_{kl}^x \quad (2.29)$$

dónde c_{ij}^{kl} es la componente (ij) del tensor c^{kl} solución del problema 2.25, 2.26 y 2.27 para un estado de tensión macroscópico I^{kl} . El tensor c^{kl} se denomina *tensor de concentración de tensiones* y representa las tensiones microscópicas inducidas por las tensiones macroscópicas unidad (ver figura 2.4), tal que:

- c^{11} representa las tensiones microscópicas inducidas por una tensión macroscópica de tracción simple en la dirección y_1 .

- \mathbf{c}^{22} representa las tensiones microscópicas inducidas por una tensión macroscópica de tracción simple en la dirección y_2 .
- \mathbf{c}^{12} representa las tensiones microscópicas inducidas por una tensión de cisallamiento puro en las direcciones y_1 y y_2 .

El tensor \mathbf{c} que interviene en 2.24 es:

$$c_{ijkl} = c_{ij}^{kl} \quad (2.30)$$

finalmente, los coeficientes homogenizados del material se obtienen como un promedio ponderado a través del tensor de concentración de tensiones, esto es:

$$D_{ijkl}^x = \langle D_{ijpq} c_{pq}^{kl} \rangle_V \quad (2.31)$$

La segunda parte del lema de Hill (ver ecuación 2.13) establece la simetría del tensor de flexibilidad.

Formulación para medios periódicos

Considérese un dominio formado por un material periódico, de tal manera que el volumen representativo del compuesto corresponde a un dominio Y , denominado celda unidad, el cual es periódico. Entonces, la solución del problema se busca mediante campos de tensiones y desplazamientos periódicos, mediante el siguiente problema elástico sobre la celda:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^x(u(y)) &= D_{ijkl}(y) \sigma_{kl} && \text{ecuación constitutiva en } \S 2.32 \\ \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial y_i} &= 0 && \text{ecuación de equilibrio estático} \\ \langle \sigma_{ij} \rangle_Y &= \sigma_{ij}^x && \text{ecuación de promedios en } Y \\ \sigma &\in S_{per}(Y) \quad , \quad \mathbf{u} \in DP(Y) && \text{restricciones periódicas} \end{aligned}$$

en donde, $S_{per}(Y)$ y $DP(Y)$ representan respectivamente un espacio de tensiones y desplazamientos periódicos¹⁴. De acuerdo con Suquet (Suquet, 1982) el conjunto de ecuaciones del problema 2.32 es un problema bien formulado que admite una solución única de (σ, \mathbf{u}) . Puesto que se admite que el problema 2.32 es lineal, la tensión σ se puede expresar de la siguiente forma:

$$\sigma_{ij}(y) = \tilde{c}_{ij}^{kl}(y) \sigma_{kl}^x(y)$$

¹⁴El espacio de tensiones periódicas $S_{per}(Y)$ y desplazamientos periódicos $DP(Y)$ están definidos en la *formulación para medios periódicos* en deformaciones (el subapartado anterior), tal como lo presenta Suquet (Suquet, 1982).

donde el tensor \tilde{c}^{kl} se denomina *tensor de concentración de tensiones* y resulta de la solución del siguiente problema elástico en el dominio de la celda Y :

$$\begin{aligned} \varepsilon^y(u^{kl}) &= D(y) \tilde{c}^{kl} && \text{ecuación constitutiva en } Y \text{ (2.33)} \\ \frac{\partial \tilde{c}^{kl}}{\partial y} &= 0 && \text{micro-equilibrio en } Y \\ \langle \tilde{c}^{kl} \rangle_Y &= \mathbf{I}^{kl} && \text{ecuación de promedios en } Y \\ \tilde{c}^{kl} &\in S_{per}(Y) \quad , \quad u^{kl} \in DP(Y) && \text{restricciones periódicas} \end{aligned}$$

y como el método anterior, los campos \tilde{c}^{kl} representan las tensiones microscópicas inducidas por las tensiones macroscópicas. Es decir:

- \tilde{c}_{11} representa la tensión microscópica inducida por la tensión macroscópica de tracción simple en la dirección y_1 .
- \tilde{c}_{12} representa la tensión microscópica inducida por la tensión macroscópica de cisallamiento en la dirección y_1 y y_2 , etc . . .

De esta forma, el tensor c que interviene en la ecuación 2.24 es:

$$c_{ijrs} = \tilde{c}_{ij}^{rs} \quad (2.34)$$

y se obtiene los coeficientes elásticos D_{pqrs}^x mediante la superposición de efectos, esto es:

$$D_{ijrs}^x = \langle D_{ijpq} \tilde{c}_{pq}^{rs} \rangle_V \quad (2.35)$$

2.3 TEORÍA DE LA EXPANSIÓN ASINTÓTICA

2.3.1 Introducción

Esta formulación matemática realizada a través de los *desarrollos asintóticos* descompone el problema de los medios heterogéneos en escalas de diferente orden de magnitud. De esta forma, se obtiene en cada una de las escalas las ecuaciones que gobiernan el comportamiento tenso-deformacional del material bajo un riguroso sustento matemático. Esta teoría fue propuesta y desarrollada por Sanchez-Palencia (Sanchez-Palencia, 1974) (Sanchez-Palencia, 1980), Bensoussan (Bensoussan *et al.*, 1978), Duvaut (Duvaut, 1976), Lene (Lene & Duvaut, 1981), entre otros. El lector interesado en profundizar acerca de los conceptos matemáticos de los métodos asintóticos puede consultar las siguientes referencias (Sanchez-Hubert & Sanchez-Palencia, 1992) (Cole & Kevorkian, 1980).

Como se mencionó al inicio del capítulo, en los problemas con materiales compuestos se puede adoptar dos puntos de vista diferentes. Si se adopta un punto de vista microscópico, es posible apreciar en el material los pequeños componentes y por consiguiente los respectivos campos de las variables de estado. Estos campos microscópicos presentan fluctuaciones u oscilaciones, cuya longitud de onda está relacionada con la dimensión de los componentes. Si por el contrario se adopta un punto de vista macroscópico, en éste no se perciben las heterogeneidades del medio, ni las rápidas oscilaciones de los campos de las variables. Esta diferencia de magnitud, entre la longitud de onda del campo microscópico y el macroscópico, guía a dividir el espacio de referencia en dos espacios de diferente orden de magnitud. En consecuencia, se utiliza un espacio global o macroscópico, al cual se denomina con la variable x_i . Además, se considera un espacio local o microscópico y_i , en el cual se representa la *estructura interna del compuesto* o *microestructura*. Las escalas de estos espacios están relacionadas mediante un pequeño parámetro ϵ , que representa la diferencia de magnitud entre las longitudes de onda de las dos escalas

$$y = \frac{x}{\epsilon}. \quad (2.36)$$

Entonces, es posible obtener un operador diferencial en dos escalas deducido de la siguiente forma: sea una función $f^\epsilon(x)$, en donde ϵ es la longitud de onda del campo fluctuante microscópico. Entonces, esta función puede ser escrita de forma equivalente en las dos escalas $f^\epsilon(x) = f(z, y)$, tal que z_i ($z_i = x_i$) es la variable macroscópica y $y_i = x_i/\epsilon$ es la microscópica. De esta

forma, la derivada de la función $f^\epsilon(x)$ con respecto a las dos escalas es:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial f}{\partial y_i} + \frac{\partial f}{\partial z_i} \quad (2.37)$$

puesto que las variables: y_i y z_i son consideradas independientes, se reemplaza la variable macroscópica z_i por x_i , esto es:

$$\frac{d}{dx_i} = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial}{\partial y_i} + \frac{\partial}{\partial x_i}. \quad (2.38)$$

Ahora bien, dentro de un contexto multiescala, el campo de desplazamientos \mathbf{u}^ϵ se puede descomponer de la siguiente forma

$$\mathbf{u}^\epsilon(x) = \mathbf{u}(x, y) = \mathbf{u}^0(x, y) + \epsilon \mathbf{u}^1(x, y) + \epsilon^2 \mathbf{u}^2(x, y) + \dots \quad (2.39)$$

donde \mathbf{u}^ϵ es el campo de deformaciones del medio heterogéneo, el cual se descompone en la suma de funciones diferentes ($\mathbf{u}^0, \mathbf{u}^1, \dots$) que coexisten bajo diferentes ordenes de magnitud ($\epsilon^{-1}, \epsilon^0, \epsilon^1, \dots$). En general, se admite que estas funciones cambian lentamente en cada una de las escalas.

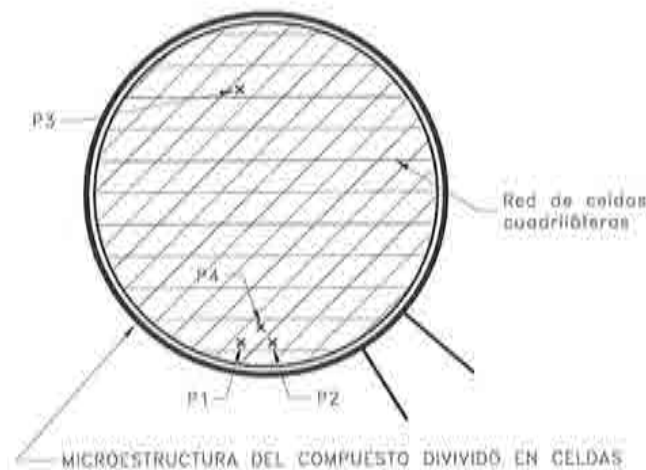


Figura 2.5: División de un medio en celdas unidad.

Si el compuesto es un medio periódico, este principio se lo conoce como *hipótesis de periodicidad local* (Bensoussan *et al.*, 1978) (Sanchez-Palencia, 1987) (Levi, 1987). Es decir, considérese que se tiene un medio dividido en *celdas unidad* de dominio Y , tal como presenta la Figura 2.5, considérese

además que se han identificado dos puntos $P1$ y $P2$ en celdas vecinas que son homólogos por periodicidad. El principio expresa que el valor de la función f^ϵ (que representa el campo de una variable de estado del problema) es en estos puntos (aproximadamente) igual, puesto que dichos puntos con respecto a la escala local son equivalentes y en relación a la escala global dichos puntos se encuentran en posiciones muy cercanas. Por el contrario, el valor de la función es en general distinto para un punto cualquiera $P3$ homólogo por periodicidad pero alejado de $P1$, ya que la distancia es grande con respecto a la escala x_i . Así también, el valor de la función será distinto para un punto $P4$ que se encuentra dentro de la misma celda pero alejado del punto inicial $P1$, puesto que en este caso la distancia entre dichos puntos es grande con respecto a la escala y_i .

Para obtener las ecuaciones que gobiernan en cada una de las dos escalas, la mayor parte de trabajos utilizan los tres primeros términos de la descomposición del campo de desplazamientos (ver ecuación 2.39) y además descomponen el campo de tensiones. Sin embargo, por sencillez y para una mejor explicación del método, es posible obtener las mismas expresiones utilizando únicamente los dos primeros términos del campo de desplazamientos, tal como se presenta a continuación. Aunque en lo posible, se intenta seguir la formulación estándar de esta teoría, que se puede encontrar en las siguientes referencias (Lene, 1986) (Devries *et al.*, 1989).

2.3.2 Formulación a través de los desarrollos asintóticos

Considérese un cuerpo elástico el cual ocupa una región Ω relacionado a un sistema de ejes x . Este cuerpo está sujeto a un sistema de fuerzas de masa b y fuerzas de superficie t sobre una porción $\partial\Omega_t$ del contorno del dominio $\partial\Omega$. En la otra porción del contorno $\partial\Omega_n$, se impone un desplazamiento nulo. Considérese además que, este material es elástico y presenta una fina estructura periódica, tal que el dominio Ω se recupera por la repetición de un dominio base: rectangular, hexagonal o una forma más complicada. Se designa por Y al período característico del material, el cual ha sido ampliado por homotecia y fijado uno para todo el dominio Ω . El parámetro que designa la relación de homotecia es ϵ . Este valor es pequeño y transforma el dominio Y al período dentro del material elástico. Por consiguiente, la estructura elástica del material queda completamente determinada si se describe un simple período. Este período ampliado Y está relacionado a un sistema de ejes y .

Se admite que $C_{ijkl}(y)$ son los *coeficientes elásticos* sobre Y , los cuales

pueden variar rápidamente, pero satisfacen las relaciones de simetría

$$C_{ijkl}(y) = C_{jikl}(y) = C_{klij}(y)$$

y relaciones de positividad

$$\exists \alpha > 0, \quad C_{ijkl}(y)\xi_{ij}\xi_{kl} \geq \alpha\xi_{ij}\xi_{ij}, \quad \forall \xi_{ij} = \xi_{ji}$$

Las funciones $C_{ijkl}(y)$ definidas sobre Y son extendidas por periodicidad al completo espacio y_i , tal que se supone que va ha ser cubierto por contiguos períodos idénticos a Y .

Los coeficientes elásticos en el material Ω son entonces C_{ijkl}^ϵ definidos por

$$C_{ijkl}^\epsilon(x) = C_{ijkl}\left(\frac{x}{\epsilon}\right)$$

por consiguiente, los campos de tensiones y desplazamientos del material heterogéneo deben satisfacer el siguiente problema de valores de contorno a nivel global¹⁵:

$$\begin{aligned} \nabla \sigma^\epsilon + \rho b &= 0, & \text{en } \Omega & \quad (2.40) \\ \sigma^\epsilon &= C^\epsilon \varepsilon(u^\epsilon), & \varepsilon &= \frac{1}{2}(\nabla u + (\nabla u)^T) \\ \sigma^\epsilon \cdot n &= t, & \text{sobre } \Omega_t & \\ u^\epsilon &= 0, & \text{sobre } \Omega_u & \end{aligned}$$

el problema 2.40 tiene solución única $(u^\epsilon, \sigma^\epsilon)$. Sin embargo, por la gran cantidad de heterogeneidades en el medio elástico, no es posible el computo de u^ϵ cuando ϵ es pequeño. Por ende, se busca obtener un límite a través de la expansión asintótica.

Admítase que el campo de desplazamientos está formado por: un campo macroscópico promedio u^0 que sólo depende de la escala macroscópica, lo cual se justifica al considerar el material como homogéneo bajo la escala global. Más otro campo u^1 que completa los desplazamientos respectivos de las partículas. Puesto que las celdas unidad son iguales, este campo de desplazamientos se repite aproximadamente en el dominio de celdas cercanas (hipótesis de periodicidad local (Sanchez-Palencia, 1987) (Levi, 1987)). Ahora el campo de desplazamientos se puede escribir en función de las escalas

¹⁵La notación ∇u es equivalente a $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$, como también $(\nabla u)^T$ es equivalente a $\frac{\partial u_j}{\partial x_i}$

x_i, y_i y del orden ϵ , como la suma de funciones que varían lentamente dentro de su dominio,

$$u_i^\epsilon(x) = u_i(x, y) = u_i^0(x) + \epsilon u_i^1(x, y) \quad (2.41)$$

Al ser la función \mathbf{u}^1 periódica se cumple la siguiente condición,

$$u_i^1(x, y) = u_i^1(x, y + \epsilon) \quad (2.42)$$

en donde ϵ es la dimensión de la celda unidad,

En pequeñas deformaciones, la deformación en un punto del material se expresa:

$$\varepsilon_{ij}(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

Si se considera esta expresión a través del operador gradiente expresado en las dos escalas (ver ecuación 2.38), se tiene

$$\varepsilon_{ij}^\epsilon(x, y) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial u_i^\epsilon}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^\epsilon}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\partial u_i^\epsilon}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j^\epsilon}{\partial y_i} \right) \right] \quad (2.43)$$

y descomponiendo el campo de desplazamientos \mathbf{u}^ϵ por su equivalente en desarrollos asintóticos, resulta

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^\epsilon(x, y) = & \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial u_i^0}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^0}{\partial x_i} \right) + \epsilon \left(\frac{\partial u_i^1}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^1}{\partial x_i} \right) + \right. \\ & \left. \epsilon^{-1} \left(\frac{\partial u_i^0}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j^0}{\partial y_i} \right) + \left(\frac{\partial u_i^1}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j^1}{\partial y_i} \right) \right] \quad (2.44) \end{aligned}$$

el segundo término entre paréntesis $(\nabla_x \mathbf{u}^1 + (\nabla_x \mathbf{u}^1)^T)$ puede ser despreciado puesto que está multiplicado por el valor de ϵ (muy pequeño). Además, como \mathbf{u}^0 sólo depende de la escala macroscópica x_i , el tercer término entre paréntesis¹⁶ $(\nabla_y \mathbf{u}^0 + (\nabla_y \mathbf{u}^0)^T)$ es nulo.

Entonces, la deformación se puede escribir de la siguiente forma¹⁷:

$$\varepsilon_{ij}^\epsilon = \varepsilon_{ij}^x + \varepsilon_{ij}^y \quad (2.45)$$

¹⁶La notación $\nabla_y \mathbf{u}$ es equivalente a $\frac{\partial u_i}{\partial y_j}$, como también $(\nabla_y \mathbf{u})^T$ es equivalente a $\frac{\partial u_j}{\partial y_i}$.

¹⁷En la teoría de la expansión asintótica es usual representar la deformación macroscópica ε_{ij}^x como ε_{ij}^0 y la deformación microscópica ε_{ij}^y como ε_{ij}^1 .

donde,

$$\varepsilon_{ij}^x = \varepsilon_{ij}(u^0) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i^0}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^0}{\partial x_i} \right) \quad (2.46)$$

$$\varepsilon_{ij}^y = \varepsilon_{ij}(u^1) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i^1}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j^1}{\partial y_i} \right) \quad (2.47)$$

Por otra parte, el tensor de tensiones ($\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}$) se expresa como¹⁸

$$\sigma_{ij}(x, y) = C_{ijkl}(x, y)(\varepsilon_{kl}^x + \varepsilon_{kl}^y) \quad (2.48)$$

estableciendo la ecuación de equilibrio estático ($\nabla \sigma + \rho b = 0$) y derivando con respecto a las dos escalas, resulta¹⁹

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial y_j} + \rho b_i = 0. \quad (2.49)$$

Obsérvese que en uno de los términos interviene el parámetro ϵ , lo cual implica que este término tiene un orden diferente a los otros dos, esto permite dividir la ecuación 2.49 en las ecuaciones que se cumplen en cada una de las dos escalas:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial y_j} = 0 \quad \text{en la celda } (Y) \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho b_i = 0 \quad \text{en el cuerpo } (\Omega) \quad (2.51)$$

Utilizando notación tensorial, la ecuación 2.50 se escribe

$$\nabla_y \sigma = 0, \quad \text{donde} \quad \sigma = C(y)(\varepsilon^x + \varepsilon^y) \quad (2.52)$$

La deformación $\varepsilon^x(u^0)$ juega el rol de un parámetro con respecto a el sistema diferencial en y_i . Debido a la linealidad de σ y u^1 , éstas variables se pueden expresar de la siguiente forma

$$\sigma = s^{kl}(y) \varepsilon_{kl}^x(u^0), \quad u^1 = \chi^{kl}(y) \varepsilon_{kl}^x(u^0) \quad (2.53)$$

donde s^{kl} es el tensor microscópico de tensiones asociado a $\varepsilon^x(u^0)$ y χ^{kl} representan unas *funciones periódicas*. De esta forma, el problema bajo la

¹⁸El método de los desarrollos asintóticos estándar descompone la tensión en $\sigma^e = \sigma^0 + \sigma^1 + \sigma^2 + \dots$. Sin embargo, este trabajo obtiene las mismas expresiones sin tal descomposición.

¹⁹Obsérvese que la tensión $\sigma^e(x)$ se representa simplemente por $\sigma(x, y)$.

escala microscópica se puede expresar como:

$$\begin{aligned} \nabla_y s^{kl} &= 0 && \text{micro - equilibrio en } Y \text{ (2.54)} \\ s^{kl} &= C(y)[I^{kl} + \varepsilon^y(\chi^{kl})] && \text{ecuación constitutiva } Y \\ \chi^{kl} &\text{ es } Y\text{-periódico,} && s^{kl}(n) \text{ es } Y\text{-antiperiódico} \end{aligned}$$

El tensor I^{kl} tiene las siguientes componentes

$$I_{ij}^{kl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \quad (2.55)$$

se puede probar que el sistema 2.54 determina el vector $\chi^{kl}(y)$.

Por otra parte, para cualquier función $f(x, y)$ se define su valor medio (de la misma forma que en la *teoría de promedios*) como:

$$\langle f \rangle := \frac{1}{V} \int_Y f(x, y) dV = f^x \quad (2.56)$$

La solución de la ecuación 2.53 está dada por

$$\sigma(x, y) = C(y)[I^{kl} - \varepsilon^y(\chi^{kl})]\varepsilon_{kl}^x(u^0) \quad (2.57)$$

y tomando el valor medio en el dominio Y como la tensión homogeneizada, se tiene

$$\sigma_{ij}^x = \langle \sigma_{ij} \rangle = C_{ijkl}^x \varepsilon_{kl}^x(u^0) \quad (2.58)$$

en donde,

$$C_{ijkl}^x = \langle C_{ijkl}(y) \rangle - \langle C_{ijkl}(y) \varepsilon_{pq}^y(\chi^{kl}(y)) \rangle \quad (2.59)$$

estos valores definen el material homogéneo equivalente y se denominan *coeficientes homogeneizados*²⁰.

La ecuación 2.51 (ecuación de equilibrio en la escala macroscópica) de los desarrollos asintóticos, queda

$$\nabla_x \sigma^x + \rho b = 0, \quad \text{en } \Omega$$

De tal manera que, la tensión media $\sigma^x = \langle \sigma \rangle$ y el campo de desplazamiento u^0 son la solución del siguiente problema elástico de valores de contorno

$$\begin{aligned} \nabla_x \sigma^x + \rho b &= 0 && \text{ecuación de equilibrio en } \Omega \text{ (2.60)} \\ \sigma_{ij}^x &= C_{ijkl}^x \varepsilon_{kl}^x(u^0) && \text{ecuación constitutiva elástica} \\ \bar{t} &= \sigma^x \cdot n, && \text{vector de tracción sobre } \partial\Omega_t \\ \bar{u}^0 &= 0, && \text{desplazamientos restringidos sobre } \partial\Omega_u \end{aligned}$$

²⁰En este trabajo C_{ijkl}^x se denomina también *tensor constitutivo homogeneizado*.

Los coeficientes C_{ijkl}^x definidos por 2.59 son independiente de x_i . El tensor σ^x se denomina *tensor de tensiones macroscópicas* y el tensor $\varepsilon^x = \varepsilon^x(u^0)$ se denomina *tensor de deformaciones macroscópicas*, que satisface

$$\varepsilon^x = \langle \varepsilon^x(u^0) + \varepsilon^y(u^1) \rangle = \langle \varepsilon^x(u^0) \rangle; \quad \langle \varepsilon^y(u^1) \rangle = 0. \quad (2.61)$$

Equivalencia con la teoría de promedios

Defínase un campo de desplazamientos periódicos²¹ como: $v = u^1 + \varepsilon^x y$. Entonces, el campo de deformación de este campo de desplazamiento es: $\varepsilon^y(v) = \varepsilon^y(u^1) + \varepsilon^x$, en donde ε^x representa el valor medio definido sobre la celda base Y . De tal forma que, los coeficientes homogeneizados se obtienen de la solución del problema elástico siguiente:

$$\begin{aligned} \nabla_y \sigma &= 0 && \text{en } Y && (2.62) \\ \sigma &= C(y) \varepsilon^y(v) && \text{en } Y \\ \langle \varepsilon^y(v) \rangle &= \varepsilon^x && \text{en } Y \\ \varepsilon^y(v) &\text{ es } Y\text{-periódico, } && \sigma(n) \text{ es } Y\text{-antiperiódico} \end{aligned}$$

y se obtiene los coeficientes homogeneizados, que relacionan σ^x con ε^x , como indica la fórmula 2.58. El problema 2.62 es el método de homogeneización en términos de la teoría de promedios.

2.3.3 Aplicación del método

Para utilizar la formulación presentada se propone un procedimiento denominado *localización*, en la que se obtiene la tensión microscópica $\sigma(x, y)$, $y = x/\varepsilon$ de la siguiente forma:

1. Se determina los seis campos de vectores²² χ^{kl} sobre Y asociados con el tensor I^{kl} solución del problema 2.54, el cual es un problema de tipo elástico sobre el dominio no homogéneo Y .
2. Desde los campos de vectores χ^{kl} se obtiene los coeficientes homogeneizados C_{ijkl}^x por la fórmula 2.59.
3. Solucionando el problema elástico 2.60 sobre Ω , se obtiene el campo macroscópico de tensiones $\sigma^x(x)$ y el campo macroscópico de deformaciones $\varepsilon^x(x)$ para $x \in \Omega$.

²¹También lo presenta (Suquet, 1982)

²²Para problemas bidimensionales se requieren únicamente tres campos de vectores χ^{kl} .

4. Usando la fórmula 2.57 se puede calcular $\sigma(x, y)$. Para x fijo en Ω , este campo de tensiones sobre Y representa la tensión macroscópica $\sigma^x(x) = \langle \sigma(x, y) \rangle$ localizada dentro de un dominio ϵY periódico, en $x \in \Omega$.

A partir de esta formulación se han propuesto diferentes caminos para abordar distintas clases de problemas, algunos de carácter no lineal. Por ejemplo, en el trabajo publicado por (Lene, 1986), el cual presenta que el tensor constitutivo elástico de diferentes materiales periódicos (obtenido a través de la teoría de homogeneización) es ortótropo, propone una ecuación constitutiva de daño por “*debonding*”, es decir despegue entre fibra y matriz. En este caso, se hacen las siguientes suposiciones:

- Cada componente se comporta de forma elástica.
- El campo de desplazamientos tangenciales es discontinuo en la interfase de los componentes.

Se introduce una ley de propagación del daño a través de una sola variable interna K que representa el despegue. La ecuación se formula dentro de la termodinámica de los materiales generalizados. Véase los detalles en la referencia.

En otro artículo (Devries *et al.*, 1989) se propone una ecuación constitutiva de daño o degradación del compuesto por rotura de la fibra, para compuestos reforzados en una dirección. Esta ecuación constitutiva se utiliza para obtener el comportamiento de una matriz epoxi reforzada con fibra de vidrio. La formulación se obtiene ajustando el comportamiento de las propiedades del compuesto con una función de dos variables de daño introducidas, las cuales representan:

1. Variable d_1 , la densidad de rotura de una fibra.
2. Variable d_2 , la densidad de fibras rotas en una sección.

En esta ecuación se describe la propagación de la fibra adoptando la hipótesis de normalidad.

De manera general, se puede decir que, varios trabajos sobre homogeneización buscan reproducir el comportamiento no lineal de cierta clase de materiales compuestos a través de unas pocas variables internas, las cuales representan de manera global los procesos de carácter no lineal importantes

dentro del volumen de la celda, como puede ser: fractura de fibras, despegue de componentes, deformaciones inelásticas, fisuras, etc. De esta forma se consigue simplificar los complejos micromecanismos que se producen dentro de la microestructura. Sin embargo, dicho procedimiento, utilizado para extender la teoría de los desarrollos asintóticos y también la teoría de promedios, no está exento de inconvenientes. Por una parte, es muy difícil realizar simplificaciones sin alterar el comportamiento del compuesto representado y además, se debe abordar el problema de cada clase de material compuesto como un problema particular.

2.4 ACOPLAMIENTO DE VARIABLES EN EL PROBLEMA NO LINEAL

En los trabajos presentados por Suquet (Suquet, 1982) (Suquet, 1987) se estudia los conceptos desarrollados en la teoría de homogeneización y se busca extenderlos al comportamiento no lineal. En este caso, el grado de complejidad es muy elevado, es por ello que Suquet realiza su estudio de acuerdo al comportamiento de los materiales componentes; es decir: compuestos cuyos componentes son visco-elásticos, compuestos elasto-plásticos, etc. Uno de los principales resultados de esta investigación es que *las variables macroscópicas del problema dependen de las variables microscópicas*. En consecuencia, no es posible desacoplar estos campos, como lo es en el caso elástico. A continuación se presenta un estudio para un compuesto cuyos constituyentes son materiales elásticos perfectamente plásticos y un estudio para materiales viscoelásticos o viscoplásticos (Suquet, 1987). El interés de estos desarrollos se centra en los conceptos y las conclusiones obtenidas, y se evita de esta manera buena parte de las operaciones matemáticas y pasos intermedios realizados. El lector interesado en el detalle del desarrollo matemático tiene que referirse a (Suquet, 1987).

2.4.1 Materiales cuyos componentes son elásticos perfectamente plásticos

Se considera que cada constituyente tiene una superficie de fluencia, la cual delimita un conjunto $P(y)$ que contiene todos los estados de tensiones que el material puede físicamente admitir²³

$$\sigma(y) \in P(y), \quad y \in V, \quad (2.63)$$

donde $P(y)$ está definido a través de la función de la superficie de fluencia $f(y, \sigma)$:

$$P(y) = \{\sigma | f(y, \sigma)\}. \quad (2.64)$$

Se admite que este conjunto $P(y)$ es convexo cerrado y sus constituyentes obedecen la regla de la normalidad. Se considera también que existe el siguiente conjunto para las tensiones macroscópicas:

$$P^* = \{\sigma^* | \sigma_{ij}^* = \sigma_{ji}^*, \text{ tal que existe } \sigma \text{ que satisface: } \langle \sigma \rangle = \sigma^*, \\ \sigma(y) \in P(y), \quad \forall y \in V\} \quad (2.65)$$

²³Para simplificar la nomenclatura, en adelante se ha preferido colocar el superíndice únicamente a las magnitudes macroscópicas. Es decir: σ representa la tensión microscópica y σ^* representa la tensión macroscópica.

2.4. ACOPLAMIENTO DE VARIABLES EN EL PROBLEMA NO LINEAL 45

Definiciones similares para P^x se encuentran en trabajos anteriores basados en el análisis límite²⁴: (Hill, 1967) (Drucker, 1959) (Shu & Rosen, 1967) (Mc Laughtlin, 1970).

La ley constitutiva a nivel microscópico, para materiales elasto-plásticos, se puede expresar de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \varepsilon(u) &= \varepsilon^e + \varepsilon^p & \varepsilon^e &= \mathbf{D} : \sigma & (2.66) \\ \sigma(y) &\in P(y) & \forall y &\in V \\ \dot{\varepsilon}^p(y) : \bar{\sigma} - \sigma(y) &\leq 0 & \forall \bar{\sigma} &\in P(y) \end{aligned}$$

donde, ε^e es la deformación elástica, ε^p es la deformación plástica, $P(y)$ es el conjunto de superficies de fluencia que delimitan el estado tensional admisible $\bar{\sigma}$ de los componentes y \mathbf{D} es el tensor constitutivo elástico de flexibilidad.

Potencial Macroscópico

Se admite que las variables mecánicas macroscópicas, que son supuestas como funciones aditivas, proceden del promedio del nivel microscópico (teoría de promedios). Entre ellas: la masa, la energía interna, la entropía, y la disipación.

De esta forma, mediante el equilibrio de energía virtual (conocido también como condición de Hill (ver ecuación 2.13, que establece $\langle \sigma : \varepsilon \rangle = \sigma^x : \varepsilon^x$), se encuentra que la deformación se puede expresar como

$$\varepsilon^x = \mathbf{D}^x : \sigma^x + \langle \mathbf{c}^T : \varepsilon^p \rangle \quad (2.67)$$

donde, \mathbf{c} es el *tensor de concentración de tensiones*²⁵. Entonces, $\mathbf{D}^x : \sigma^x$ representa la parte elástica de la deformación macroscópica, por consiguiente

$$\varepsilon^{x(e)} = \mathbf{D}^x : \sigma^x = \langle \mathbf{c}^T : \mathbf{D} : \sigma \rangle = \langle \mathbf{c}^T : \varepsilon^e \rangle \quad (2.68)$$

y la parte plástica de la deformación es dada por

$$\varepsilon^{x(p)} = \langle \mathbf{c}^T : \varepsilon^p \rangle \quad (2.69)$$

por lo tanto, ni la parte elástica ni la parte plástica de la macro deformación es el promedio de sus análogas microscópicas.

²⁴Estas referencias las presenta (Suquet, 1987).

²⁵También denominado *tensor de localización de tensiones* (Suquet, 1987), o *tensor de influencia*.

Si se considera que la energía interna macroscópica es el promedio de la energía interna microscópica y además suponiendo únicamente procesos a igual temperatura, la micro energía se reduce a la energía elástica:

$$\rho^x \mathcal{E}^x = \langle \rho \mathcal{E} \rangle = \frac{1}{2} \langle (\varepsilon(u) - \varepsilon^n) : C : (\varepsilon(u) - \varepsilon^n) \rangle = \frac{1}{2} \langle \sigma : D : \sigma \rangle$$

Suquet divide la tensión microscópica actual $\sigma(y)$ en dos partes: la primera concuerda con un material perfectamente elástico y la segunda es un *tensor de tensiones residuales autoequilibrado* (entiéndase por *autoequilibrado* un campo fluctuante con media nula $\langle \sigma^r \rangle = 0$).

$$\sigma(y) = c(y) : \sigma^x + \sigma^r(y) \quad (2.70)$$

Mediante esta descomposición se puede demostrar que la energía interna es

$$\rho^x \mathcal{E}^x = \frac{1}{2} \sigma^x : D^x : \sigma^x + \frac{1}{2} \langle \sigma^r : D : \sigma^r \rangle \quad (2.71)$$

El primer término de la expresión de la energía elástica del compuesto, corresponde a la energía elástica macroscópica, mientras que el segundo término es la *energía almacenada* y representa la energía elástica de las tensiones residuales, que usualmente es un valor positivo.

Considere que el material compuesto ha sido sobre cargado al estado de tensiones microscópicas $\sigma(y)$ con las tensiones residuales σ^r . El espacio de fluencia macroscópica es el conjunto de tensiones macroscópicas $\check{\sigma}^x$ el cual puede ser investigado desde el estado actual σ^x por un camino elástico, a lo largo del cual no cambian las tensiones residuales remanentes. El estado microscópico $\check{\sigma}$ satisface la siguiente relación

$$\check{\sigma} - \sigma(y) = c(y) : (\check{\sigma}^x - \sigma^x), \quad (2.72)$$

despues de algunas operaciones resulta

$$\check{\sigma}^x \in P^x(\{\sigma^r\}) = \cap c(y)^{-1}[(P(y) - \{\sigma^r(y)\})] \quad \forall y \in V. \quad (2.73)$$

El espacio de fluencia macroscópico $P^x(\{\sigma^r\})$ es un conjunto convexo²⁶ (intersección de conjuntos convexos). Para su determinación en un tiempo t dado se requiere del conocimiento del campo completo de tensiones residuales. En consecuencia, "no es posible eliminar completamente el nivel microscópico desde el comportamiento macroscópico, como lo es en el caso elástico" (Suquet, 1987).

²⁶En este apartado, cuando una variable se presenta entre corchetes, por ejemplo: $\{\sigma^r\}$ representa el campo completo de la variable.

2.4. ACOPLAMIENTO DE VARIABLES EN EL PROBLEMA NO LINEAL²⁷

Estructura de la ley constitutiva macroscópica

Suquet desarrolla la estructura que tendría una ley constitutiva a nivel macroscópico, indicando que se busca analizar únicamente de forma cualitativa, puesto que no es posible desacoplar las variables de las dos escalas. Entonces, admitiendo que las variables de estado son:

- La deformación macroscópica ε^x .
- El *campo completo* de microdeformaciones plásticas $\{\varepsilon^p(y), y \in V\}$. Esto significa un número infinito de variables internas²⁷.

Una vez especificadas estas variables, el estado actual de tensiones se obtiene de la siguiente forma:

- a) la tensión macroscópica σ^x se deduce a través del tensor de deformación macroscópico ε^x y el campo microscópico $\{\varepsilon^p\}$ mediante la ecuación 2.67.
- b) El campo σ^r puede ser calculado como una función lineal del campo de deformación plástica microscópica ε^p , el cual se considera conocido,

$$\sigma^r = -\mathcal{R} : \varepsilon^p \quad \text{esto es} \quad \sigma^r(y) = - \int_V \mathcal{R}(y, y') \varepsilon^p(y') dy \quad (2.74)$$

en donde, \mathcal{R} es un operador integro-diferencial expresado en términos de la función de Green.

Una vez identificadas las variables de estado, se debe determinar la energía interna del material. Se conoce en los cálculos previos que

$$\rho^x \mathcal{E}^x = \frac{1}{2} \sigma^x : D^x : \sigma^x + \frac{1}{2} \langle \sigma^r : D : \sigma^r \rangle$$

expresando la \mathcal{E}^x en términos de las variables de estado $(\varepsilon^x, \{\varepsilon^p\})$

$$\rho^x \mathcal{E}^x = \frac{1}{2} (\varepsilon^x - \varepsilon^{x(p)}) : C^x : (\varepsilon^x - \varepsilon^{x(p)}) + \frac{1}{2} \langle \sigma^r : (\varepsilon(u^r) - \varepsilon^p) \rangle$$

mediante la ecuación 2.74 y el hecho que σ^r es autoequilibrado, se tiene

$$\rho^x \mathcal{E}^x(E, \{\varepsilon^p\}) = \frac{1}{2} (\varepsilon^x - \varepsilon^{x(p)}) : C^x : (\varepsilon^x - \varepsilon^{x(p)}) + \frac{1}{2} \langle \mathcal{R} \varepsilon^p : \varepsilon^p \rangle \quad (2.75)$$

²⁷En términos rigurosos un dominio, que en este caso es la celda unidad, tiene infinito número de puntos y por consiguiente infinito número de grados de libertad. Por lo tanto, resulta un número infinito de valores de las variables internas.

Las *leyes de estado* relacionan las fuerzas termodinámicas asociadas con las variables de estado y las variables de estado las solucionan. Las fuerzas termodinámicas son definidas como

$$\rho^x \frac{\partial \mathcal{E}^x}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^x} \quad y \quad -\rho^x \frac{\partial \mathcal{E}^x}{\partial \{\boldsymbol{\varepsilon}^p\}} \quad (2.76)$$

entonces:

$$\rho^x \frac{\partial \mathcal{E}^x}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^x} = \mathbf{C}^x : (\boldsymbol{\varepsilon}^x - \boldsymbol{\varepsilon}^{x(p)}) = \boldsymbol{\sigma}^x \quad (2.77)$$

y por un campo virtual de la deformación plástica microscópica $\delta \boldsymbol{\varepsilon}^p$

$$\begin{aligned} \left\langle -\rho^x \frac{\partial \mathcal{E}^x}{\partial \{\boldsymbol{\varepsilon}^p\}} : \delta \boldsymbol{\varepsilon}^p \right\rangle &= \left\langle \mathbf{C}^x : (\boldsymbol{\varepsilon}^x - \boldsymbol{\varepsilon}^{x(p)}) \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{x(p)}}{\partial \{\boldsymbol{\varepsilon}^p\}} : \delta \boldsymbol{\varepsilon}^p \right\rangle - \langle \mathcal{R} \boldsymbol{\varepsilon}^p : \delta \boldsymbol{\varepsilon}^p \rangle \\ &= \langle \boldsymbol{\sigma}^x : \mathbf{c}^T : \delta \boldsymbol{\varepsilon}^p \rangle - \langle \mathcal{R} \boldsymbol{\varepsilon}^p : \delta \boldsymbol{\varepsilon}^p \rangle \\ &= \langle \delta \boldsymbol{\varepsilon}^p : (\mathbf{c} : \boldsymbol{\sigma}^x + \boldsymbol{\sigma}^r) \rangle \\ &= \langle \delta \boldsymbol{\varepsilon}^p : \boldsymbol{\sigma} \rangle \end{aligned} \quad (2.78)$$

La fuerza termodinámica asociada con el estado del campo de la variable $\{\boldsymbol{\varepsilon}^p\}$ es el campo de tensión microscópico $\{\boldsymbol{\sigma}\}$. Reorganizando la ley constitutiva macroscópica, se tiene:

Leyes de estado

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^x &= \rho^x \frac{\partial \mathcal{E}^x}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^x} \quad , \quad \{\boldsymbol{\sigma}\} = -\rho^x \frac{\partial \mathcal{E}^x}{\partial \{\boldsymbol{\varepsilon}^p\}} \quad (2.79) \\ \{\boldsymbol{\sigma}\} &\in \mathcal{P} \quad \mathcal{P} = \{\boldsymbol{\tau}(y) \in \mathbf{P}(y) \text{ para cada } y \text{ en } V\} \end{aligned}$$

donde $\boldsymbol{\tau}$ es una tensión admisible que depende de y (fluctuante).

Leyes complementarias

$$(\{\boldsymbol{\varepsilon}^p\} , \{\bar{\boldsymbol{\sigma}}\} - \{\boldsymbol{\sigma}\}) \leq 0 \quad \forall \{\bar{\boldsymbol{\sigma}}\} \in \mathcal{P}. \quad (2.80)$$

Suquet concluye expresando "esta información sobre la ley macroscópica tiene poca utilidad, puesto que ley constitutiva involucra a un infinito número de variables internas $\{\boldsymbol{\varepsilon}^p\}$ ".

Este inconveniente, que surge del acoplamiento de las variables en las dos escalas, ha generado mucha dificultad en el intento de extender los métodos existentes de homogeneización hacia la solución de problemas no lineales.

2.4. ACOPLAMIENTO DE VARIABLES EN EL PROBLEMA NO LINEAL 49

Por consiguiente, bajo la idea que no es posible manejar una ecuación constitutiva con un número infinito de variables internas, se busca obtener modelos aproximados, en donde este campo de variables internas se resume en unas pocas variables. Generalmente se reemplaza el campo de variables internas microscópicas $\{\alpha\}$ (o el campo de deformaciones plásticas $\{\varepsilon^p\}$) por una forma más simple. Por ejemplo, en el caso de una matriz reforzada con fibras, un solo valor de α puede representar a esta variable interna en todo el dominio de la matriz a nivel de la celda unidad y otro valor de α a la variable interna del dominio de la fibra. Procedimientos similares se utilizan en (Rice, 1970) (Suquet, 1982) (Michel, 1984) (Lene, 1986) (Devries *et al.*, 1989). Para materiales con microporos o fisuras Suquet (Suquet, 1982) propone una ecuación constitutiva de degradación, en donde las variables internas están relacionadas con la generación y geometría de los defectos, estos pueden ser: microporos esféricos, elipsoidales, cilíndricos o fisuras planas.

La idea de realizar esta clase de simplificaciones ha sido mantenida tanto por los autores de la teoría de promedios, como también por los autores de la teoría de los desarrollos asintóticos, bajo la afirmación que no es posible obtener de forma "exacta"²⁸ los campos de tensiones y deformaciones a nivel microscópico. Sin embargo, el avance tecnológico actual de los ordenadores puede haber modificado dicha hipótesis.

²⁸Entiéndase como solución "exacta", la solución real o también la solución numérica obtenida mediante una técnica adecuada, como lo es el Método de los Elementos Finitos.

2.4.2 Materiales cuyos componentes son viscoelásticos o viscoplásticos

Si los constituyentes son viscoelásticos o viscoplásticos son válidas las ecuaciones 2.79 y 2.80 de la ley constitutiva macroscópica. En este caso, la ley constitutiva a nivel de componentes es

$$\varepsilon(\dot{u}) = \dot{\varepsilon}^e + \dot{\varepsilon}^{an} = D(y)\dot{\sigma} + \frac{\partial \varphi}{\partial \sigma}(y, \sigma) \quad (2.81)$$

donde φ es el potencial que define la parte inelástica del incremento de deformación y ε^{an} es la deformación inelástica. Las relaciones 2.67 y 2.69 permanecen válidas y definen la parte elástica e inelástica de la deformación macroscópica. Además, siguiendo (Rice, 1970) se puede presentar que el compuesto admite un *potencial macroscópico* desde el cual se puede obtener la parte inelástica del incremento de deformación:

$$\dot{\varepsilon}^{x(an)} = \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma^x}(\sigma^x, \sigma^r) \quad (2.82)$$

donde, $\Phi(\sigma^x, \sigma^r) = \langle \varphi(y, \sigma) \rangle = \langle \varphi(y, c : \sigma^x + \sigma^r) \rangle$.

La forma completa de la ley constitutiva macroscópica es:

$$\dot{\varepsilon}^x = D^x \dot{\sigma}^x + \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma^x}(\sigma^x, \sigma^r) \quad (2.83)$$

donde las tensiones residuales σ^r son encontradas como la solución del problema microscópico

$$\varepsilon(\dot{u}^r) = D\dot{\sigma}^r + \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma^r}(\sigma^x, \sigma^r) \quad (2.84)$$

σ^r autoequilibrado, $\varepsilon(u^r)$ campo de deformaciones admisibles.

Una vez más los niveles macroscópico y microscópico están acoplados a través de las tensiones residuales σ^r .

Como en el subapartado anterior, para conseguir modelos de aplicación práctica Suquet (Suquet, 1987) presenta el desarrollo de algunos modelos aproximados, donde realiza simplificaciones importantes para disminuir la complejidad del problema, reemplaza el campo de variables internas microscópicas $\{\alpha\}$ (o el campo de tensiones residuales $\{\sigma^r\}$) por una forma más simple.

2.5 NUEVOS TRABAJOS ACERCA DE LA HOMOGENEIZACIÓN

Como se ha presentado en el capítulo anterior, los *coeficientes elásticos homogeneizados* del material compuesto se obtienen a través de un volumen elemental representativo o celda unidad. Con la determinación de dichos coeficientes, el problema elástico puede ser solucionado de forma desacoplada. A continuación se va a comentar algunos de los trabajos representativos donde se aborda el problema elástico en cada una de las escalas. Además se propone, el uso de los métodos adaptativos y estimadores de error para asegurar la fiabilidad de tales resultados. Por otra parte, se encuentran trabajos donde se cuestiona la teoría de homogeneización. Finalmente, se ha dirigido la atención hacia la solución del problema no lineal. En este caso, uno de los problemas importantes que tratan algunos trabajos es acerca de la imposición de las condiciones de contorno en la celda unidad, puesto que la descomposición de los campos en una parte uniforme y otra periódica puede no ser lo adecuado en problemas no lineales. Por último, se revisan algunas propuestas que utilizan técnicas no convencionales para abordar el problema no lineal mediante el Método de los Elementos Finitos en varias escalas.

2.5.1 Condiciones de contorno y su implementación

Uno de los problemas básicos de la teoría de homogeneización y que hasta el momento no existe acuerdo entre los investigadores es acerca de la forma de imponer las condiciones de contorno en el volumen unidad representativo. Como se conoce, en mecánica de sólidos el problema estándar de valores de contorno obtiene los campos de tensiones σ y desplazamientos u dentro de un dominio Ω (generado por unas determinadas sollicitaciones). Para lo cual, se requiere conocer las condiciones de borde del dominio, es decir los valores prescritos del vector de tensiones $\bar{l}(n)$ o desplazamientos \bar{u} en el contorno del dominio $\partial\Omega$. Existen tres condiciones de borde utilizadas en el análisis de estructuras (Lublimer, 1990), las cuales se las conoce como:

- El problema de Dirichlet donde parte o todo el contorno está sometido a desplazamientos impuestos $\partial\Omega_u$.
- El problema de Neumann donde parte de su contorno o su totalidad está bajo fuerzas impuestas $\partial\Omega_t$.
- La condición mixta en la que existe una combinación de las dos condiciones anteriores $\partial\Omega_u$ y $\partial\Omega_t$.

Naturalmente, las condiciones de borde buscan reproducir las condiciones reales, aunque idealizadas, de una estructura. En este caso, a nivel de la microestructura se intenta reproducir las condiciones que se generan en el interior de la estructura interna del compuesto. Como se presentó en los apartados anteriores, la teoría de promedios plantea la hipótesis (que es de aceptación general) que las tensiones y deformaciones macroscópicas corresponden al promedio de los respectivos campos microscópicos. Para forzar el cumplimiento de al menos uno de los dos campos se utilizó o bien la condición de Dirichlet (Hill, 1967) (imposición de un desplazamiento uniforme), o la condición de Neumann (Mandel, 1972) (imposición de una tensión uniforme). El error introducido por dichas condiciones es despreciable cuando las dimensiones de las heterogeneidades son muy pequeñas con respecto al volumen elemental representativo. Sin embargo, para la solución numérica de un volumen que contiene muchas heterogeneidades se requiere un esfuerzo computacional grande. Esto condujo a que trabajos posteriores consideren los materiales periódicos, en donde un volumen elemental relativamente simple contiene la información completa acerca de la microestructura del compuesto. Así, las propuestas de la teoría de homogeneización con media periódica, basados tanto en la teoría de promedios (Suquet, 1982), como en los desarrollos asintóticos (Sanchez-Palencia, 1980) (Duvaut, 1976) (Bensoussan *et al.*, 1978) (Lene & Leguillon, 1982), reproducen las condiciones de periodicidad a través de las funciones periódicas. Pero estos métodos, al descomponer los campos de las variables microscópicas en una parte uniforme y otra periódica utilizan la superposición de efectos, lo cual los restringe a problemas elásticos (véase (Suquet, 1987) página 241). Es por ello, que algunos trabajos recientes exploran diferentes posibilidades para imponer las condiciones de contorno en el problema no lineal.

Swan (Swan, 1994) propone una técnica del control de deformaciones (ε^x), para la homogeneización de compuestos inelásticos periódicos, la cual se basa en la descomposición aditiva del campo de desplazamientos ($u = \bar{u} + u_p$), en una contribución lineal que es impuesta, más una contribución periódica que se desconoce. En esta publicación se indica que las celdas unidad presentan lados opuestos que tienen la misma forma. La solución se obtiene de forma incremental a través de una técnica *predictor-corrector*, en la que el predictor es la parte lineal del campo de desplazamientos y en adelante se aplican correctores periódicos, hasta conseguir el equilibrio del dominio. Se propone también una técnica de control de tensiones (σ^x), ésta presenta un mayor grado de complejidad, puesto que además de buscar el equilibrio del dominio, se requiere adicionar restricciones en deformaciones y desplazamientos. Este problema fue solucionado mediante una implementación basada en la

formulación mixta de elementos finitos a través del método de penalización. El lector interesado en los principios de las formulaciones mixtas puede referirse a (Zienkiewicz & Taylor, 1994a) (Simo & Hughes, 1998) (Hughes, 1987).

Por otra parte, en una investigación que trata sobre la determinación de las propiedades elásticas de la mampostería, A. Anthoine (Anthoine, 1995) propone una interesante forma de imponer las condiciones de contorno. En este caso, la formulación presentada se fundamenta en la forma heurística, basada en la teoría de promedios. Se encuentra que la mampostería, idealizada en dos dimensiones, es susceptible de ser dividida en celdas cuadriláteras y hexagonales, cuyos lados están relacionados por una *base de vectores*²⁰. En este artículo se solucionan únicamente aquellas celdas cuadriláteras con base de vectores ortogonales. Para solucionar las celdas hexagonales se presenta que algunas de éstas pueden ser reemplazadas por una celda cuadrilátera de base ortogonal (aunque esta última tiene el doble de su tamaño). Para solucionar el problema sobre el dominio de la celda se utiliza los *multiplicadores de Lagrange*, cuya descripción se encuentra con poco detalle en el apéndice de la publicación. Finalmente, obtiene las propiedades del material, para lo cual utiliza, por simetría, sólo la cuarta parte de la celda unidad. Además, compara la solución obtenida con propuestas anteriores de homogeneización para mampostería; dichas propuestas siguen un procedimiento de varios pasos (dos, tres y múltiples pasos) (Pietruszczak & Niu, 1992) (Maier *et al.*, 1991) (Pande *et al.*, 1989). La propuesta presentada por Anthoine tiene la ventaja de conseguirlo en uno solo.

En una publicación posterior A. Anthoine (Anthoine & Pegon, 1996) analiza nuevamente una mampostería, pero en este trabajo los materiales componentes (ladrillo y mortero) tienen comportamiento no lineal. El estudio se realiza para tres tipos diferentes de carga; en la representación del compuesto no se utiliza la celda completa, sino que por simetría se reduce a la cuarta parte. El ablandamiento o "softening" de los materiales generan dificultades de convergencia que son solucionadas a través de técnicas numéricas avanzadas como "arc-length". Se propone un método de control de deformaciones y control de tensiones impuesto por los valores macroscópicos respectivos a través de los multiplicadores de Lagrange. Usualmente el método de los multiplicadores tienen la desventaja de generar valores nulos en la diagonal de la matriz de rigidez, sin embargo el método utilizado en esta referencia no presenta dicha dificultad, gracias al aumento del funcional mediante dos

²⁰Esta *base de vectores* se denominan posteriormente en la propuesta de esta Monografía como *vectores de periodicidad*.

vectores de multiplicadores de Lagrange λ_1 y λ_2 que representan las fuerzas del contorno. Este método se presenta más adelante con mayor detalle, puesto que es el que se utiliza en esta Monografía, pero de forma más simple y general.

Un artículo presentado por (Michel *et al.*, 1999) propone otro método de control de deformaciones y control de tensiones para la determinación del comportamiento del compuesto. La formulación presentada se basa en la descomposición del campo de desplazamientos en una parte uniforme y otra periódica ($\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}_p$). Su aplicación se restringe a materiales elásticos y materiales rígidos-plásticos (elásticos perfectamente plásticos). En esta formulación se propone el concepto de *grado de libertad macroscópico*. Esto es, se introduce en cada uno de los elementos de la celda unidad discretizada un nodo adicional llamado *nodo macroscópico*, el cual tiene la función de agregar los grados de libertad adicionales, en donde se imponen o introducen las restricciones macroscópicas (ε^x ó σ^x). Se discuten las condiciones de contorno periódicas mediante los multiplicadores de Lagrange. Se presenta los detalles de su implementación dentro del esquema del Método de los Elementos Finitos. Por otra parte, en esta misma referencia se presenta un método basado en la *Transformada Rápida de Fourier* como una alternativa al Método de los Elementos Finitos. Este método considera el problema de un material de referencia homogéneo y elástico bajo una autodeformación ("eigenstrain") no homogénea y periódica. La solución del problema se consigue mediante la forma explícita de la *función periódica de Green* del medio en referencia.

2.5.2 Solución en dos escalas del problema elástico

En esta sección se hace referencia al trabajo presentado por (Guedes & Kikuchi, 1990). En este trabajo se considera que el compuesto es un material periódico, se utiliza y discute la teoría de homogeneización a través de los desarrollos asintóticos, se presenta con mayor detalle la determinación de los coeficientes elásticos homogeneizados³⁰ para el material compuesto. Luego se presenta un estimador del error (a priori) para analizar la calidad de la aproximación numérica.

A continuación los autores proponen solucionar el problema elástico de los materiales compuestos de forma similar a la presentada en las referencias (Lene, 1986) (Devries *et al.*, 1989), esto es:

³⁰Estas corresponde a las constantes escalares del tensor constitutivo homogeneizado.

1. Realizar el pre-procesamiento del compuesto. Esto consiste en obtener a través de la celda unidad los coeficientes homogeneizados.
2. Solucionar el problema macroscópico suponiendo que el material es homogéneo, cuyo comportamiento fue establecido en el paso anterior (1).
3. A continuación se realiza el post-proceso. Esto se refiere a la obtención posterior de los campos de tensiones y deformaciones a nivel microscópico, en los puntos de interés de la macroestructura.

Finalmente los autores introducen un método adaptativo para mejorar la precisión de los coeficientes homogeneizados. Este método consiste en realizar una discretización más fina en aquellas partes de la celda unidad donde se determina los mayores errores de aproximación asociados a la solución numérica (mediante el Método de Elementos Finitos). Estas zonas son determinadas a través del estimador del error desarrollado. Para verificar la bondad del método adaptativo, los autores comparan un refinamiento uniforme de la discretización de la celda unidad y los resultados con el método adaptativo, obteniéndose naturalmente mejores resultados con el último método.

2.5.3 Cuestionamientos a la teoría de homogeneización y utilización de Métodos adaptativos y multi-grid

Como se conoce, los métodos adaptativos son una estrategia para mejorar la calidad de la solución obtenida a través del Método de los Elementos Finitos. Estos métodos se encuentran bajo diferentes denominaciones, de acuerdo a la forma de conseguir la mejora. Entre estas se tiene: técnicas que utilizan un refinamiento de la malla conocidos como "*h-methods*", técnicas que incrementan el orden polinomial de las funciones de aproximación "*p-methods*", si se utiliza relocalización de los nodos "*r-methods*" o combinaciones de las anteriores, por ejemplo: "*hp-methods*". Por otra parte, los métodos "multi-grid" es una técnica que busca aproximar la solución del problema o acelerar su convergencia mediante la solución iterativa de la estructura discretizada en diferentes niveles. Es decir, transmitiendo la solución desde una malla más gruesa a una más fina y viceversa.

En esta sección se comentan los trabajos presentados por Fish y coautores (Fish & Wagiman, 1993) (Fish & Markolefas, 1993) (Fish *et al.*, 1994b) (Fish *et al.*, 1994a) (Fish & Belsky, 1995a) (Fish & Belsky, 1995b) que cuestionan la

teoría de homogeneización, pero además han realizado varias contribuciones en el refinamiento de la solución del problema elástico de medios heterogéneos en varias escalas a través de los métodos ya indicados. Por ejemplo, en la referencia (Fish & Wagiman, 1993) se lee: "Los desarrollos asintóticos presentan una rigurosa deducción matemática en los medios heterogéneos cuando se cumple con las siguientes suposiciones:

1. La micro-estructura es periódica, es decir el compuesto se forma de la repetición espacial de una estructura muy pequeña o celda unidad.
2. Los términos de la descomposición del desplazamiento $\mathbf{u}^k(x, y)$ son periódicos dentro de \mathbf{y} con el mismo período de la microestructura.

Sin embargo, si el material es localmente no periódico o materiales periódicos pero cuya solución es no periódica en \mathbf{y} por la presencia de efectos locales (contorno de la macroestructura, despegue entre componentes, etc.), entonces los desarrollos asintóticos dan una aproximación pobre de los campos locales". En un artículo (Fish *et al.*, 1994b) se expresa: "Desafortunadamente, en las áreas de alta concentración de tensiones, tanto en el nivel macromecánico (macro-craque) o nivel mesomecánico (lados libres, despegue de componentes), la suposición que la solución macroscópica (o microscópica) es uniforme dentro del dominio del volumen elemental representativo no es válida".

Finalmente, en otra referencia (Fish & Belsky, 1995a) se dice: "Es bien conocido que en el límite de $\epsilon \rightarrow 0$ la solución del problema del medio heterogéneo se aproxima al problema de valores de contorno con coeficientes homogeneizados. Desafortunadamente, en muchas situaciones prácticas cuando el valor de ϵ es finito y la solución del problema homogeneizado tiene un alto gradiente, la solución obtenida puede distar bastante de la solución del problema inicial. Las principales fuentes de error se localizan en las porciones del dominio del problema donde la solución tiene altos gradientes. Irónicamente, estas son precisamente las regiones de mayor interés desde el punto de vista práctico". Por otra parte, la visión de estos investigadores, puede resumirse en la siguiente opinión (Fish & Belsky, 1995b) "La teoría matemática de la homogeneización sirve para capturar la frecuencia baja que presenta el medio heterogéneo, mientras que en los lugares con altos gradientes la respuesta es oscilatoria, es por ello que se introduce un término perturbador, la solución se determina aplicando técnicas de relajación hasta conseguir convergencia".

Estas ideas tomadas de las publicaciones aclaran la forma de abordar el problema. En el artículo titulado "*Multiscale finite element method for a locally nonperiodic heterogeneous medium*" (Fish & Wagiman, 1993), proponen

descomponer el dominio global en una parte periódica, en la cual se utiliza la solución de la teoría de homogeneización. En el resto del dominio, donde se suponen que dominan los efectos locales, se considera como una porción no periódica (por ejemplo: en el contorno). En esta porción del problema se sobrepone una malla fina, cuyas condiciones de contorno es el desplazamiento obtenido en la solución del problema global. En este caso, el campo de desplazamientos corresponde al campo de desplazamiento macroscópico (u^0) enriquecido por una contribución de la microestructura (a través del segundo término de la descomposición asintótica u^1). La solución se obtiene de forma acoplada (ver detalles en la referencia). Sin embargo (en opinión del autor de esta monografía), no está claro que esta división, ni la introducción de esta perturbación lleven a mejores resultados.

Un trabajo más elaborado (Fish & Markolefas, 1993) propone un método adaptativo "s-method" para problemas elásticos, el cual se basa en la superposición de una malla fina donde un estimador de error indica que se requiere. Se opera de la siguiente forma:

1. Se propone un estimador de error, el cual se aplica nodo por nodo.
2. Se identifica las regiones críticas de acuerdo a los contornos de la densidad de error estimado.
3. Se sobrepone una malla fina en dichos lugares donde se han determinado errores inaceptables.
4. Se obtiene la solución del refinamiento adaptativo.
5. Se valora la calidad de la solución a través de una norma global y local.

el proceso requiere repetir los pasos 4 y 5 hasta obtener la precisión deseada. Luego (Fish *et al.*, 1994b), desarrollan un indicador y estimador de la reducción del error en la microescala ("Microscale reduction error indicator and estimators"), el cual se basa en la estimación de los términos de alto orden que se desprecian en la clásica formulación en doble escala de la teoría de la expansión asintótica.

Otro artículo en esta misma dirección recoge los trabajos anteriores (Fish *et al.*, 1994a). En este artículo se generaliza el "s-method" sobreponiendo mallas en varios niveles. Para ello se presenta dos versiones, una para mallas estructuradas y otra para no estructuradas. La versión con mallas estructuradas se soluciona con un solver iterativo para sistemas simétricos positivos definidos, se analiza dos procedimientos: el uso de preconditionador

de gradiente conjugado y un algoritmo "multi-grid" jerárquico. Se discute el proceso adaptativo basado en un estimador de error y una estrategia de refinamiento. Finalmente se propone una estrategia para simular la formación de discontinuidades y su propagación a través de un método adaptativo jerárquico que utiliza campos discontinuos.

Por otra parte, un cambio de estrategia se encuentra en la publicación (Fish & Belsky, 1995a) (Fish & Belsky, 1995b) que titula "*Multi-grid method for periodic heterogeneous media*" (parte 1 y 2). En este trabajo, se abandona la hipótesis de uniformidad de los campos de las variables en la escala macroscópica. Se propone unos operadores de transformación para pasar la información de la malla gruesa a la fina y viceversa ("intergrid transfer operators"), para lo cual se utiliza los términos de los desarrollos asintóticos. La solución se realiza de forma iterativa en las dos escalas, una en la macroscópica y otra a nivel de los componentes. Nuevamente se utiliza el indicador y estimador de reducción del error en la microescala.

Cabe agregar que, la descalificación de la solución periódica no se realiza de forma rigurosa. Por otra parte, puesto que la respuesta depende de la solución obtenida con el Método de los Elementos Finitos, es obvio que el uso de los métodos adaptativos (en cada una de las escalas) van a mejorar el resultado. Sin embargo, no está claro que la introducción de dichas perturbaciones y la correspondiente relajación sea lo adecuado, más bien da la impresión que en este caso la solución depende tanto del valor de la perturbación como del nivel o escala en donde se lo introduce. Además, la utilización de toda estas técnicas de refinamiento eleva considerablemente la complejidad del problema elástico de materiales compuestos.

Finalmente, se ha presentado una propuesta diferente para materiales heterogéneos, pero que sigue una línea de investigación en esta dirección. Esta se denomina "*Homogenized Dirichlet Projection Method*" (HPDM). En este caso se obtiene los efectos de la microestructura bajo diferentes escalas sobre la respuesta a nivel macroscópico del medio heterogéneo. Al igual que en el caso anterior, se introduce un estimador de error y se refina sucesivamente en los varios niveles o escalas mediante un método jerárquico. Ver los detalles en la siguientes referencias (Zohdi *et al.*, 1996) (Moes *et al.*, 1998) (Oden *et al.*, 1999).

2.5.4 Homogeneización mediante *análisis de transformación de campos*

El método de *análisis de la transformación de campos* es una nueva forma de solucionar los problema inelásticos de compuestos en la escala microscópica. Este método fue desarrollado por G. J. Dvorak (Dvorak, 1991) (Dvorak, 1992) (Dvorak *et al.*, 1994). El método se puede aplicar tanto a una celda unidad, como a métodos que caracterizan de forma diferente al volumen representativo, tales como: el "*Self-consistent method*", "*Mori-Tanaka method*", u otros métodos que utilizan la solución de Eshelby³¹ (Eshelby, 1958). Conceptualmente, a partir de unas ecuaciones constitutivas este método proporciona una aproximación uniforme por regiones, o trozos, de las deformaciones locales instantáneas, o campos de tensiones, en los diferentes componentes; con lo cual, es posible estimar las magnitudes globales instantáneas de un volumen representativo del compuesto a través del valor promedio en dicho dominio.

Para la formulación del método se admite la descomposición aditiva de la deformación total ($\epsilon = \epsilon^e + \epsilon^*$). De esta manera, se almacena todas las deformaciones inelásticas, o tensiones de relajación, como campos de auto-deformaciones ("eigenstrain") (ϵ^*) o autotensiones ("eigenstress"), referidos conjuntamente como *campos de transformación*, dentro de un cuerpo que de otra manera sería elástico. Los campos residuales generados por los campos de transformación son evaluados con ciertas *funciones de influencia de transformación* o *tensores de factores de concentración*. Estos resultan de la solución del problema elástico, aplicado localmente las autodeformaciones o autotensiones, a través de una de las diferentes métodos que utilizan el volumen representativo. De esta forma, las funciones de influencia dependen sólo de las propiedades elásticas de los materiales componentes y de la geometría de la microestructura, los cuales permanecen constantes durante todo el proceso (deformaciones infinitesimales). Una vez determinadas, estas funciones se utilizan para escribir un sistema de ecuaciones diferenciales que permite evaluar las deformaciones o tensiones locales instantáneas. De acuerdo a Dvorak, se pueden introducir fácilmente diferentes ecuaciones constitutivas y además encuentra que reduce el costo computacional respecto a los métodos que solucionan mediante el MEF la celda unidad, al menos cuando se utiliza discretizaciones gruesas de estos dominios.

³¹Estos métodos consideran un medio isotrópico elástico e infinito en donde suponen la inclusión de una autodeformación ("eigenstrain") uniforme dentro de una región elipsoidal.

Por otra parte, en el trabajo presentado por J. Fish (Fish *et al.*, 1997) (Fish & Shek, 1999) se propone un método en dos escalas en el cual se combina la teoría de homogeneización a través de los desarrollos asintóticos y el método de análisis de la transformación de campos desarrollado por Dvorak. La formulación resulta extensa y compleja. La idea de Fish y coautores es la siguiente, mediante la teoría de la expansión asintótica se descompone el problema en dos escalas y obtiene las leyes que gobiernan en cada una de ellas. La solución convencional del problema en la microestructura a través de las funciones periódicas, es adecuado para problemas elásticos. En cambio, con el método de análisis de la transformación de campos se busca determinar el comportamiento inelástico del compuesto, a través de las funciones de transformación de influencia o tensores de factores de concentración. Para esto, en el artículo (Fish *et al.*, 1997) se presenta primero la teoría de la expansión asintótica, pero en este caso se descompone además de los campos usuales (esto es: desplazamientos u^{ϵ} , deformaciones ϵ^{ϵ} y tensiones σ^{ϵ}) las autodeformaciones ("eigenstress") ϵ^{*e} . A continuación, se extienden algunos de los conceptos desarrollados en la teoría de transformación de campos, obteniendo expresiones que relacionan campos arbitrarios de transformación con los campos de las variables de estado de los materiales componentes.

Fish y coautores mantienen la idea que "desde el punto de vista práctico no es factible la solución de sistemas estructurales no lineales de medios heterogéneos a través de la solución precisa de los campos microestructurales, por el enorme esfuerzo computacional que se requiere". Por consiguiente proponen un procedimiento computacional denomina *esquema de promedio en dos puntos para compuestos de dos fases*, en el cual se sacrifica precisión a cambio de menor costo numérico. Este método consiste en obtener los tensores de factores de concentración como un promedio de los valores de los elementos o regiones que corresponden a cada fase; esto es, uno para la fibra y otro para la matriz. De esta forma, el método en dos escalas se realiza a través de los siguientes pasos, en cada incremento:

1. Se determina la respuesta de la estructura global usando el esquema de homogeneización matemática en 2 puntos, esto significa que la historia del material se actualiza como un valor constante por cada fase (fibra-matriz) en cada punto de integración de la macroestructura.
2. Se almacena la historia de los campos macroscópicos en la base de datos.
3. Se realiza el post-proceso que consiste en obtener los campos microscópicos en aquellos puntos críticos de la solución macroscópica, a través de la

historia almacenada.

Se reporta un ejemplo de aplicación en donde la solución es bastante rápida, con un error del orden del 3%. Sin embargo, al no estar acotado el error, este método es cuestionable, puesto que en problemas fuertemente no lineales estos pequeños errores generar otros de mayor importancia.

En un artículo reciente J. Fish y coautores (Fish & Shek, 1999) proponen otro método basado nuevamente en *la teoría de la expansión asintótica* y *la teoría de transformación de campos*. Este método busca mejorar la aproximación de problemas no lineales con respecto al método anterior (esquema de promedio de 2 puntos) y se denomina un *esquema adaptativo de 2/n puntos*. Luego de un complejo desarrollo matemático en donde se juntan estas dos teorías, se presenta el *esquema de 2 puntos* y el *esquema de n puntos*. En el *esquema de n puntos* se utiliza una aproximación uniforme dentro de cada elemento (n elementos) de los campos de autodeformaciones ("eigenstrain")³². A este método se lo presenta como óptimo en precisión. En cambio, en el *esquema de 2 puntos* el campo de autodeformaciones ("eigenstrain") y los *factores de concentración elástica* de cada una de las fases son aproximados como valores constantes. Estas simplificaciones permiten solucionar rápidamente la celda a cambio de precisión. Este método se denomina adaptativo porque en la solución del problema en dos escalas combina los dos esquemas mencionados. Para ello opera de la siguiente manera: en principio el problema de los materiales compuesto se soluciona a través de una celda por cada punto de integración de la macroestructura, mediante el esquema de 2 puntos. A continuación el algoritmo identifica aquellas regiones que son consideradas como críticas. Entonces, en dichas regiones se calculan dos veces el problema de la celda, primero mediante el esquema de 2 puntos y después con el esquema de n puntos. En base a estos resultados se estima un error de aproximación. En las zonas dentro de esta región crítica que tiene error de aproximación mayor a una determinada tolerancia, se calcula en adelante con el esquema de n puntos. De esta forma, el dominio macroscópico es dividido en una parte donde se utiliza el esquema de 2 puntos y otra donde se utiliza el esquema de n puntos. La zona en donde se utiliza el esquema de n puntos puede extenderse en cada uno de los incrementos de carga.

³²Este *esquema de n puntos* corresponde a la forma clásica de la *teoría de transformación de campos* para problemas no lineales.

2.5.5 Homogeneización mediante el *Método de Elementos Finitos Voronoi*

Este método es otra innovadora propuesta para problemas no lineales, el cual representa un material heterogéneo a través de elementos finitos Voronoi (Ghosh *et al.*, 1995; Ghosh *et al.*, 1996). Este método fue concebido para reproducir el comportamiento de materiales con distribución aleatoria de las heterogeneidades. Para ello, representa un volumen de un medio con dispersión arbitraria de heterogeneidades mediante una partición del dominio en polígonos convexos de varios lados denominados *elementos Voronoi*. Para representar las heterogeneidades, cada uno de estos elementos contienen una segunda fase o inclusión dentro del dominio, tal como se presenta en la figura 2.6. En este caso, cada uno de estos elementos Voronoi pueden ser

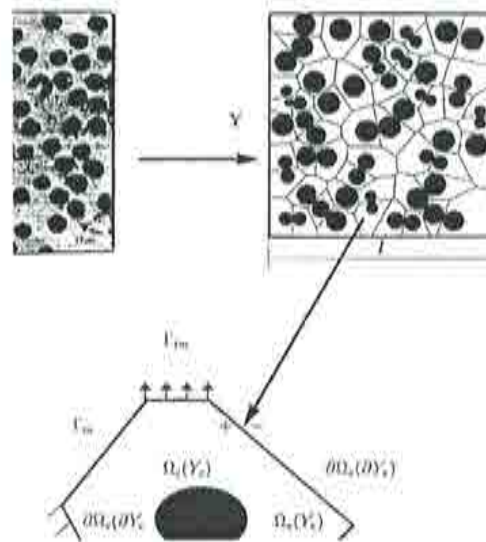


Figura 2.6: Idealización del medio heterogéneo mediante una partición del volumen representativo con elementos Voronoi.

considerados como una celda base, de tal forma que varios de estos elementos dentro del dominio representativo caracterizan un volumen de un medio con dispersión aleatoria de sus heterogeneidades. Con el propósito de facilitar su utilización los autores han desarrollado generadores de malla que crean estos polígonos basados en su forma, talla y localización de heterogeneidades (Ghosh & Mukhopadhyays, 1991; Ghosh & Mukhopadhyays, 1993).

Esta formulación busca reducir el costo computacional que se genera al determinar los campos microestructurales dentro del compuesto, ya que en los materiales aleatorios la determinación exacta de los campos microscópicos no es tan relevante como la determinación de los campos a nivel macroscópicos. En este método cada elemento Voronoi representa un elemento finito, cuya formulación se realiza a través de un *método híbrido de tensiones* introducido por (Pian, 1964). Posteriormente, para representar al compuesto se incorpora una heterogeneidad dentro de la matriz del elemento Voronoi (Ghosh & Mukhopadhyays, 1993), cuyo efecto se introduce mediante la restricción de continuidad del vector de tracciones en el interfase matriz-inclusión. En la interfase, el campo de tensiones y deformaciones puede ser discontinuo, mientras que el campo de desplazamientos se considera continuo. Las discontinuidades en el campo de tensiones se consiguen mediante la posibilidad de que se produzcan saltos dentro de los coeficientes en la interpolación polinómica de las tensiones. De tal manera que, el funcional de *energía complementaria* del elemento cumple la restricción de continuidad del vector de tracción en la interfase matriz-inclusión impuesta a través de multiplicadores de Lagrange.

Posteriormente, se propone abordar el problema elástico de materiales compuestos mediante un método de dos escalas (Ghosh *et al.*, 1995). El método presentado obtiene las ecuaciones que gobiernan en cada una de las escalas mediante la teoría de los desarrollos asintóticos y el análisis del volumen representativo se realiza mediante el método de los elementos finitos Voronoi. En el artículo (Ghosh *et al.*, 1996) se extiende este método a problemas no lineales. Además se presentan interesantes ejemplos que comparan el método propuesto con la teoría de homogenización mediante los desarrollos asintóticos, con resultados obtenidos a partir de ensayos de laboratorio y con ecuaciones constitutivas determinadas para ciertos compuestos. Los resultados obtenidos son bastante buenos y a un costo computacional menor con respecto a los métodos que utilizan la celda unidad. En una publicación posterior (Lee *et al.*, 1999) se introduce un criterio de fractura dentro del elemento y un método adaptativo en la escala macroscópica.

Este innovador método resulta sumamente eficaz para el estudio de compuestos con distribución aleatoria y además puede representar una celda unidad de un medio periódico, incluso en algunos casos con un solo elemento finito Voronoi, esto le confiere una gran ventaja por la rapidez del resultado. Pero, por las suposiciones que se realizan en su formulación, la precisión de los campos microscópicos, otorgado por un único elemento finito Voronoi, es menor que el obtenido mediante una celda unidad (con varios elementos finitos), aunque el valor promedio global de estos campos sea muy aproxi-

64 *CAPÍTULO 2. TEORÍA DE HOMOGENEIZACIÓN.- ESTADO DEL ARTE*

mado. Por otra parte, por su formulación se puede encontrar dificultades al intentar extender esta metodología a problemas (de medios periódicos) que presenten: despegue de componentes, formas complicadas de heterogeneidades, compuestos con más de dos fases, etc.

Parte II

PROPUESTA DE LA TEORÍA DE HOMOGENEIZACIÓN

Capítulo 3

TEORÍA DE HOMOGENEIZACIÓN: FORMULACIÓN

3.1 INTRODUCCIÓN

En *el Estado del Arte* se ha presentado los métodos más relevantes de la *teoría de homogeneización* dirigidos a solucionar el problema de los materiales compuestos. Entre estos, el método que utiliza la *teoría de la expansión asintótica* es el que se ha impuesto en estos últimos años. Sin embargo, se han encontrado muchas dificultades al extender, tanto la *teoría de la expansión asintótica* como la *teoría de promedios*, al problema del comportamiento no lineal de los materiales compuestos. Por este motivo, recientemente se han propuesto algunas técnicas no convencionales, como por ejemplo: la *teoría de transformación de campos* o los *elementos finitos Voronoi*.

En este capítulo se propone una nueva alternativa de la *teoría de homogeneización* para medios periódicos. La formulación desarrollada utiliza la Mecánica de Medios Continuos estándar y concuerda con las ideas principales presentadas en el Estado del Arte. Es decir, se admite que los valores efectivos a nivel macroscópico de tensiones y deformaciones están asociados al promedio de los campos correspondientes microscópicos y la descomposición del problema en dos escalas, como lo presenta la teoría de la expansión asintótica. Pero, se buscan nuevos mecanismos o conceptos que pudieran haber pasado inadvertidos. El análisis parte de las consecuencias que se derivan de la periodicidad del medio y su división en celdas unidad. En dicho análisis se proporciona una serie de conceptos que, junto a la *hipótesis de periodicidad local* (Sanchez-Palencia, 1987), permiten deducir de forma rigurosa

algunas de las variables macroscópicas a partir de los campos de las variables microscópicas. Además, se obtienen las ecuaciones que gobiernan al problema en cada una de las dos escalas, sin tener que recurrir a los desarrollos asintóticos. A continuación se plantea el problema de valores de contorno a nivel de la microestructura a través de las restricciones de borde adecuadas para la celda unidad, tanto en el rango lineal como no lineal. Su solución se determina mediante el Método de los Elementos Finitos, en donde las restricciones de contorno son impuestas mediante los multiplicadores de Lagrange (Anthoine & Pegon, 1996). Finalmente se extiende esta formulación a los medios que contienen agujeros o poros.

El problema global del material compuesto se plantea dentro del contexto de doble escala. Para la solución del problema no lineal se asimila que no es posible desacoplar las variables de estado microestructurales (Suquet, 1982; Suquet, 1987), es por ello que se propone obtener el comportamiento del compuesto de forma numérica a través del *Método de los Elementos Finitos*. Esto es, solucionar el problema por el camino natural, el cual indica que las variables macroestructurales dependen de un infinito número de variables internas. La formulación presentada se justifica plenamente porque están involucrados aspectos geométricos de la microestructura. Además, no se requiere hacer ninguna suposición sobre la naturaleza de los materiales componentes, ni dudosas simplificaciones del problema. El resultado es un método general, que no requiere el desarrollo explícito de una ecuación constitutiva, puesto que es el ordenador, a través de un algoritmo, quien determina el comportamiento del material a partir de la información de la microestructura. La obtención de los campos a nivel microestructural conducen a elevar el costo computacional, tanto en procesamiento de cálculo como en manejo de información. Sin embargo, la complejidad del problema así lo requiere. En este trabajo se presenta una formulación rigurosa y coherente que, gracias a las capacidades actuales de los ordenadores, es capaz de solucionar problemas de materiales compuestos mediante la determinación de los campos de las variables a nivel microscópico. De esta forma, se aborda también los fenómenos micromecánicos que en estos materiales acontecen.

3.1.1 Utilización de dos escalas

La complejidad que representa el comportamiento de los diferentes materiales conduce a analizarlos únicamente al nivel en el cual se producen los fenómenos de interés. Así, la *Mecánica del Medio Continuo* utiliza una escala denominada *macroscópica*, en la cual busca reproducir el comportamiento fe-

nomenológico de los materiales observado en los ensayos de laboratorio. Por el contrario, la *crystalografía* que estudia el comportamiento y las propiedades de las moléculas o cristales, utiliza una escala *atómica* en la que representa a cada material mediante un pequeño dominio denominado *celda unidad*. Así también, se busca representar el comportamiento de los medios heterogéneos a nivel macroscópico. Sin embargo, dicho comportamiento es consecuencia de complejos campos de tensiones y deformaciones producidos a nivel de sus constituyentes. Estos campos de tensiones y deformaciones microestructurales podrían obtenerse a través del Método de los Elementos Finitos, si la representación de la estructura, formada por el material compuesto, se realizara discretizando a nivel de los materiales componentes. Obviamente, esta discretización genera tal cantidad de grados de libertad que en la mayoría de los casos fácilmente se sobrepasaría las capacidades de los ordenadores, e incluso suponiendo que a través de las herramientas adecuadas dichos campos microscópicos sean reproducidos, ellos contendrían tanta información que su aspecto sería caótico.

Por consiguiente, es natural la búsqueda de simetrías que permitan reducir o compactar información a nivel microestructural. La teoría de homogeneización ofrece este camino al considerar el problema de los materiales compuestos en un estado límite, en donde es posible dividir el problema en dos escalas de diferente orden de magnitud (Sanchez-Palencia, 1974), la primera denominada *escala macroscópica* o *global*, cuya notación es (x) . En dicha escala se busca el comportamiento de la estructura global formado por el compuesto, como si éste fuera un material homogéneo. Además, se dispone de una segunda escala (y) denominada *microscópica* o *local*, en la que se caracteriza un *volumen elemental representativo*, donde se determinan los campos microestructurales. La división del problema en dos escalas se justifica cuando la diferencia de magnitud entre dichas escalas es grande. Es decir, si L es la dimensión del medio global o la longitud de onda característica del problema macroscópico y si l es la dimensión de la celda o el período de la longitud de onda característica en la microestructura, la relación entre las dos escalas ϵ tiende a cero

$$\epsilon = \frac{l}{L} \rightarrow 0. \quad (3.1)$$

Esta formulación, al igual que las formulaciones presentadas, busca aprovechar las consecuencias que se derivan de la periodicidad de la estructura interna del compuesto. En este caso, la *hipótesis de periodicidad local* (Sanchez-Palencia, 1987), (Levi, 1987) (Estado del Arte, apartado 2.3), presenta que las simetrías de los campos de las variables surgen de forma natural, como

consecuencia del principio de minimización de energía. Bajo esta hipótesis se pretende determinar unas magnitudes macroscópicas de tensiones y deformaciones, que sintetizan los campos microscópicos y representan el comportamiento del compuesto, como si este material fuera homogéneo. Para dar el salto entre las magnitudes de la escala microscópica a la macroscópica, primero se va a analizar la división del medio en *unidades estructurales* (o celdas unidad) junto a las consecuencias de la periodicidad del medio a nivel microscópico.

3.2 DIVISIÓN DE LA ESTRUCTURA INTERNA DEL COMPUESTO

La *teoría de homogeneización* analiza el problema de los materiales compuestos a nivel microestructural a través de un *volumen elemental representativo* del compuesto. Como se conoce, estos materiales están formados por una distribución periódica o una distribución aleatoria de materiales componentes. En cualquier caso, la distribución y proporciones de los materiales componentes tiene que mantenerse en todo el dominio, puesto que de lo contrario el compuesto resultante tiene que ser considerado como otro material. En los medios con distribución aleatoria de heterogeneidades, el volumen representativo, entendido como una muestra del compuesto, requiere albergar muchas heterogeneidades para contener información suficiente del compuesto, esto dificulta la solución del problema sobre todo a nivel computacional. En cambio, en los medios periódicos un volumen relativamente simple puede albergar toda la información de la microestructura. En este trabajo se va a tratar únicamente los medios periódicos, puesto que los materiales con distribución aleatoria requieren además de un análisis bajo el punto de vista estadístico.

3.2.1 División de un medio periódico en *celdas unidad*

Se entiende por medio periódico al medio heterogéneo cuyos constituyentes siguen un patrón determinado o distribución periódica, la cual se mantiene constante en todo el material. Esta propiedad de periodicidad genera a nivel de componentes una estructura regular que permite su división en unidades estructurales, véase por ejemplo la Figura 3.1. Estas unidades estructurales tienen la única particularidad de ser entre sí exactamente iguales y se les conocen como *celda unidad*. Sin embargo, en el presente trabajo se prefiere

3.2. DIVISIÓN DE LA ESTRUCTURA INTERNA DEL COMPUESTO 71

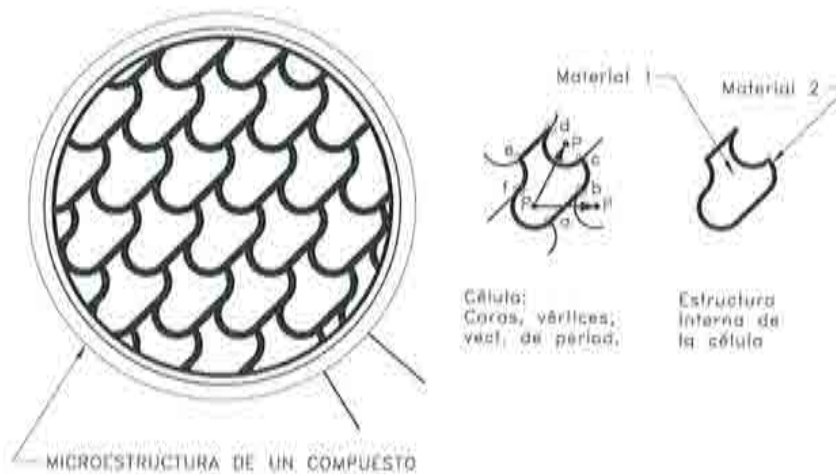


Figura 3.1: A la izquierda se presenta la estructura interna de un medio periódico, a la derecha una célula del material.

llamar *célula*, para enfatizar no solo su forma, sino también su contenido. Cabe puntualizar que el concepto de la celda unidad como una unidad estructural fue utilizado desde mucho antes en la *física del estado sólido* dentro del estudio de la red cristalina, véase por ejemplo (Pávlov & Jójlov, 1987).

En el Estado del Arte (apartado 2.3) se indica que una celda unidad que representa a un medio periódico en dos dimensiones se le clasifica como un dominio: cuadrilátero, hexagonal o una forma más complicada (Lene, 1986). Sin embargo, se recogen y proponen algunos conceptos que permiten identificar toda celda unidad, incluso las más complicadas, como una célula cuadrilátera o una célula hexagonal. De esta manera, se facilita la comprensión de estas estructuras, como también las restricciones de borde a las que se encuentran sometidas. Este trabajo trata únicamente el problema bidimensional, aunque los conceptos son válidos para el espacio tridimensional.

3.2.2 Vectores de periodicidad

De acuerdo a la definición de un medio periódico, la estructura interna del medio se genera por la repetición de componentes. Este fenómeno ocasiona ciertas simetrías en el medio, las cuales permiten dividir al compuesto en células. En especial, la simetría que se desea resaltar es la simetría por traslación. De tal forma que, cada partícula del medio está relacionada a

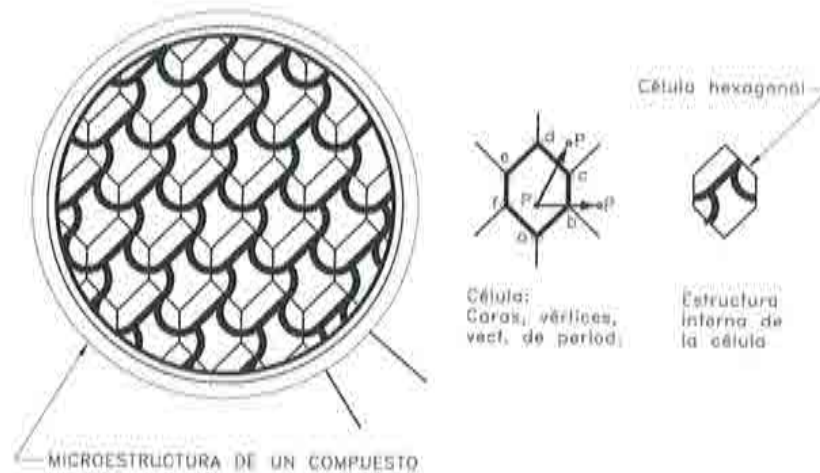


Figura 3.2: En la parte izquierda se presenta un medio periódico dividido en células hexagonales, a su derecha se encuentra: la célula, sus vectores de periodicidad y caras: ab , bc , cd , de , ef y fa .

otras partículas que se encuentran distribuidas regularmente y bajo ciertas direcciones (relación de periodicidad). Es decir, si se señala un punto P cualquiera en una célula (véase la Figura 3.1 o Figura 3.2), y a continuación se señala el punto equivalente por periodicidad en cada una de las células vecinas, entonces a estas partículas o puntos se definen entre sí como *puntos periódicos*. De esta forma, se define como *vector de periodicidad*¹ (\mathbf{D}), al vector que une puntos periódicos. Ahora bien, estos vectores de periodicidad no son más que la simetría de traslación. Por consiguiente, cada célula está asociada a una base de vectores (Lene, 1986) (Anthoine, 1995) o vectores de periodicidad \mathbf{D}^k ($k = 1, 2$ *espacio bidimensional*) específicos. Se remarca que, estos vectores relacionan a cada punto del medio con sus respectivos puntos periódicos.

3.2.3 Caras o lados de la células

La división del compuesto en células es una partición virtual que se realiza mediante *superficies materiales*². En consecuencia, el dominio de la célula es

¹En algunos trabajos sobre teoría de la expansión asintótica, se denomina *vectores base*, ver (Lene, 1986).

²Se entiende por *superficie material* a una superficie constituida siempre por las mismas partículas, dicha superficie puede moverse en el espacio.

3.2. DIVISIÓN DE LA ESTRUCTURA INTERNA DEL COMPUESTO 73

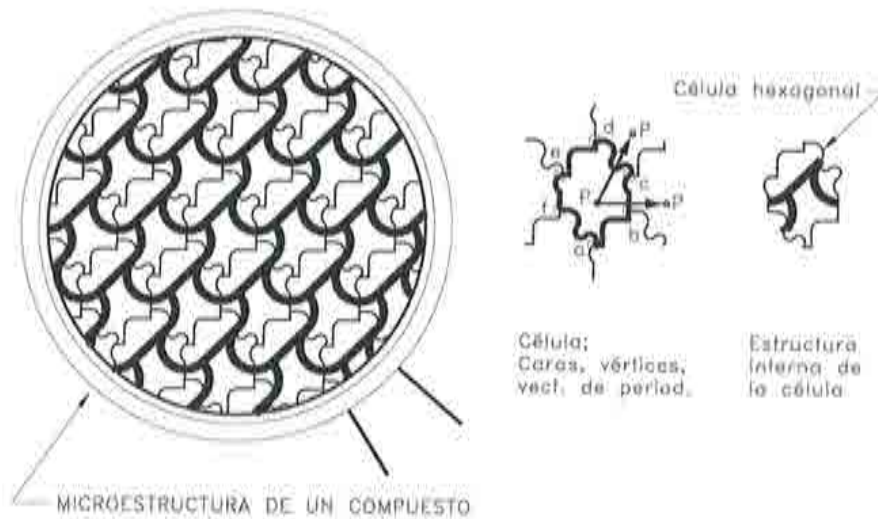


Figura 3.3: Microestructura de un compuesto dividido en células hexagonales, cuyas caras no son regulares. A la derecha del gráfico se encuentra: la célula, sus vectores de periodicidad y caras: ab, bc, cd, de, ef y fa.

un *volumen material*³ que está limitado por pares de superficies materiales. Es decir, para cada superficie que pertenece al contorno del dominio de la célula existe otra superficie de igual forma ubicada en el lado opuesto de la misma.

Una *cara* o *lado de la célula* está formado por una o varias superficies materiales adyacentes cuyas partículas con respecto a las partículas de las superficies materiales opuestas están relacionados por el mismo vector de periodicidad. Por ejemplo, en la Figura 3.1 la curva *fe* y la curva *bc* son lados opuestos, también denominados como *caras periódicas*. Estos lados están relacionados por un único vector, el cual se va a etiquetar como D^1 . Además, es fácil verificar que la célula de la Figura 3.1 tiene 3 pares de caras periódicas: las curvas *fe* y *bc*, las curvas *af* y *cd* (el vector de periodicidad es D^2), finalmente las líneas *ab* y *ed* (el vector de periodicidad es una combinación lineal de los otros dos, esto es: $D^2 - D^1$). En este caso, la división en células se realiza con lados curvos y rectos. En la Figura 3.2 la división se realiza con lados rectos y en la Figura 3.3 las células tienen lados irregulares. En esta última figura las caras están formadas por más de una

³Se entiende por *volumen material* a un espacio cerrado limitado por una o más superficies materiales.

superficie material.

3.2.4 Clases de células

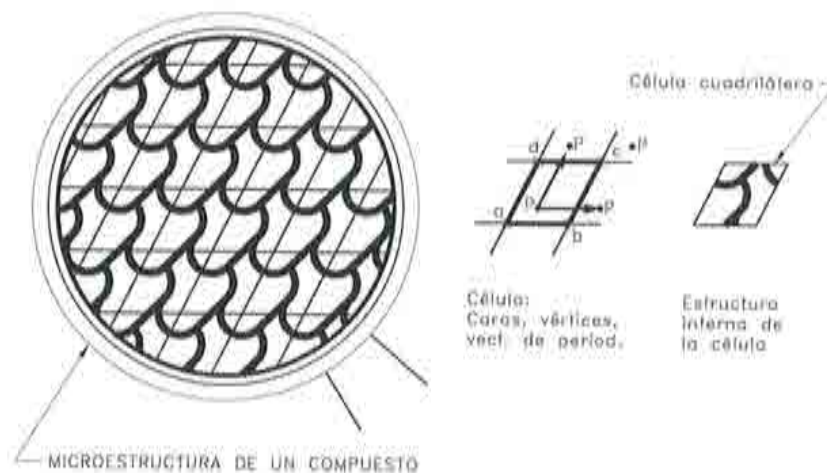


Figura 3.4: Estructura interna del compuesto dividida en células cuadriláteras.

El grupo o clase de célula está asociado al número de caras o lados que presenta. Gracias a la definición presentada de cara, el número de grupos de células es reducido, tanto en el espacio bidimensional como en el tridimensional. De esta forma, un medio periódico representado en dos dimensiones puede ser dividido únicamente en células de 4 caras o *cuadriláteras*, o bien en células de 6 caras o *hexagonales*. Por ejemplo, la célula de la Figura 3.1 es un dominio hexagonal, pero también se puede generar otros dominios hexagonales diferentes, tal como el que se presenta en la Figura 3.2 y 3.3. Además se puede dividir al medio en células cuadriláteras, véase por ejemplo las Figuras 3.4 y 3.5. Se debe observar que en la última célula cambian los vectores de periodicidad, así como también el área del dominio (se duplica).

3.2.5 Vértice

Al considerar únicamente el dominio de una célula, cada punto que pertenece al contorno del dominio tiene un sólo punto periódico, el cual está ubicado en el lado opuesto de la célula. Excepto, el lugar geométrico donde termina una

3.2. DIVISIÓN DE LA ESTRUCTURA INTERNA DEL COMPUESTO 75

cara y comienza otra, éste se denomina en adelante como *vértice*. En consecuencia, las células cuadriláteras tienen 4 vértices y las hexagonales 6. Sin

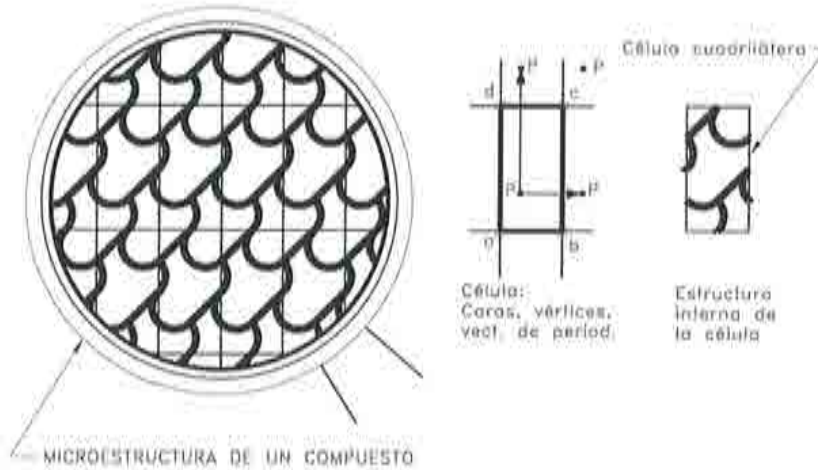


Figura 3.5: Estructura interna del compuesto dividida en células cuadriláteras (rectangulares), en la parte derecha se presenta: la célula, vectores de periodicidad, vértices y caras periódicas.

embargo, existe una diferencia importante entre la relación de estos vértices en las diferentes clases de células. En la cuadrilátera los cuatro vértices de la célula son puntos periódicos, lo cual puede verificarse en las Figuras 3.4 y 3.5, donde los cuatro vértices son los puntos a, b, c, d . En cambio, en las células hexagonales, véase Figuras 3.1, 3.2 y 3.3, los seis vértices están divididos en dos grupos de tres puntos periódicos cada uno, estos son a, c, e y b, d, f .

Finalmente, al conjunto de caras que divide el material en células forma una red o malla, a la que se le denomina *red cuadrilátera* o *red hexagonal* de acuerdo las células que se generan. Cabe indicar que la posición de una red es arbitraria, puesto que si se traslada (sin rotación), ésta continúa dividiendo al medio en células de la misma forma, cambiando únicamente la posición de los constituyentes dentro del dominio de la célula.

Obsérvese que al ser la célula un concepto puramente geométrico, cualquiera de las posibles células puede ser utilizada para representar la estructura interna periódica del medio. Por consiguiente, el método propuesto debe proporcionar igual resultado a partir de cualquiera de las células. En otras palabras, la formulación debe ser objetiva.

3.3 PERIODICIDAD LOCAL DE LAS VARIABLES

En un medio continuo, el concepto de deformación y tensión se concibe para un punto; es decir, no está ligado a las dimensiones de un dominio. También se admite que dichas variables son campos continuos que varían suavemente en su vecindad. Dentro del mismo contexto, si se considera el material compuesto únicamente a nivel macroscópico es posible suponer que los campos de deformaciones y tensiones globales cumplen con estos requisitos. Sin embargo, a nivel de componentes se presentan cambios bruscos de estas variables a consecuencia de sus distintas propiedades. De tal forma que a nivel microestructural dichos campos presentan un gran número de irregularidades o fluctuaciones que dificultan extremadamente su manejo. Esto conduce a la búsqueda de nuevos mecanismos para el manejo de las variables del problema.

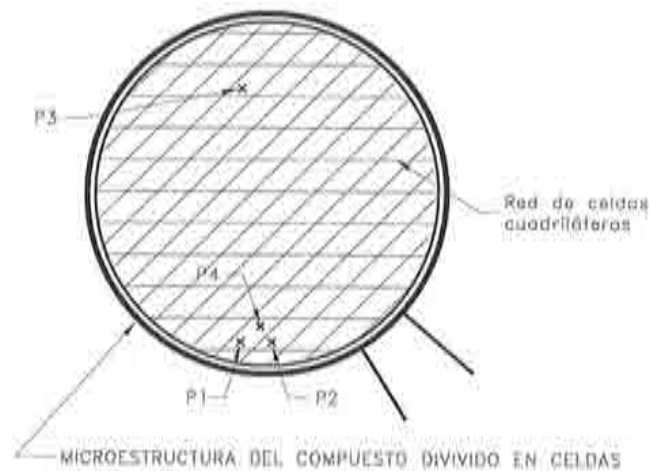


Figura 3.6: Los puntos P1, P2, y P3 homólogos por periodicidad.

La alternativa que se propone en el presente trabajo está relacionada con la hipótesis de *periodicidad local* (Sanchez-Palencia, 1987) (Levi, 1987) (formulada en los desarrollos asintóticos, apartado 2.3). Este principio asegura que dentro de un medio periódico los campos de las variables de estado presentan periodicidad local. Dicha periodicidad de las variables surge de forma natural al considerar el problema de esta clase de medios. Supóngase que un cuerpo Ω está formado por un material compuesto periódico y que éste es dividido en células Y muy pequeñas (Figura 3.6). Supóngase también que el

cuerpo sufre un desplazamiento o deformación por fuerzas que actúan en su contorno. A nivel de la microescala, considérese una célula cualquiera que no se encuentre justamente en el borde. Obviamente, dicha célula sufre una transformación a consecuencia de las fuerzas que se generan en su contorno, al igual que sucede con las células vecinas. El principio de minimización de energía asegura que cada uno de estos dominios buscan su equilibrio interno con el mínimo consumo de energía. Puesto que por definición estos dominios son iguales (tanto en forma como en propiedades) y están distribuidos regularmente uno a continuación del otro, el campo de fuerzas y desplazamientos que se genera en estos dominios es el mismo (también es posible justificar este resultado por el principio de *Sain-Venant* en elasticidad (Oleinik *et al.*, 1992) (Anthoine, 1995)). En otras palabras, si se toma como referencia el contorno de la célula, las caras periódicas de las células vecinas, aunque cambien de forma, se mantienen "paralelas" (ver Figura 3.7), lo cual asegura la compatibilidad de desplazamientos, de lo contrario se produciría un solapamiento del material o se formarían oquedades. Cabe observar que este peculiar campo

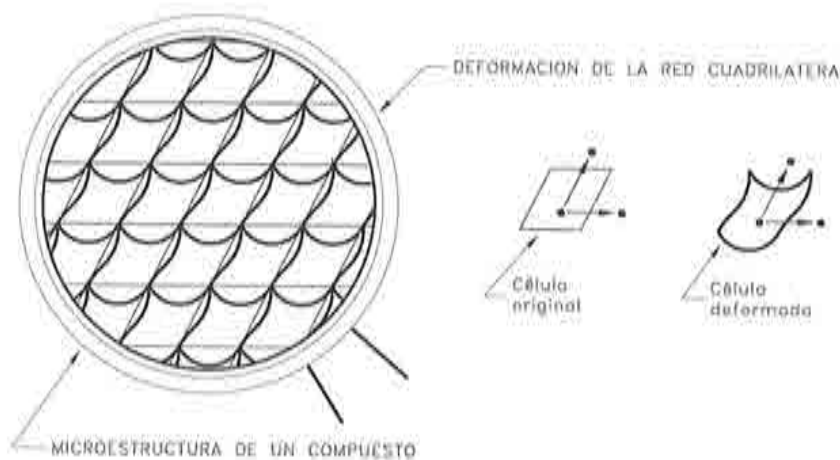


Figura 3.7: Deformación de una red cuadrilátera, bajo un campo de desplazamiento periódico, sin que se produzca un cambio en los vectores de periodicidad.

de desplazamientos tiene la característica de mantener la periodicidad local del medio. Algo similar ocurre con las fuerzas que se generan en el contorno de la célula, dado que las fuerzas que actúan en la cara de una célula, por el principio de acción y reacción, se transmiten con la misma magnitud y en dirección opuesta a la célula vecina. De aquí que en estas celdas se producen fuerzas de la misma magnitud y dirección opuesta en sus caras periódicas.

Este principio se ha denominado en la literatura sobre homogeneización como un campo de fuerzas antiperiódico (véase Estado del Arte, subapartado 2.2.2, en la formulación para medios periódicos).

3.3.1 Efecto del campo de desplazamientos periódico

Como se mencionó en el apartado anterior, en los medios periódicos se producen campos de desplazamientos que mantienen la periodicidad local del medio. Un análisis de estos campos revela que estos desplazamientos generan simultáneamente dos consecuencias. La primera es un desplazamiento diferencial de las partículas dentro de la célula, que provoca la deformación de las caras (ondulaciones). Si este desplazamiento no altera los vectores de periodicidad, dicho desplazamiento se puede entender como una perturbación, puesto que sólo se manifiesta a nivel microestructural. Por ejemplo: en la Figura 3.7 se presenta un dominio dividido en células a través de una *red cuadrilátera*; al dominio se le impone un campo de desplazamientos periódicos, con la particularidad que no afecta la distancia de las caras de las células, pero sí afecta a su forma. Obsérvese que, pese a la perturbación que sufren los dominios de las células, la dimensión global de la *red cuadrilátera* no cambia. Nótese además que la distancia entre vértices (y en general puntos periódicos) no se altera.

La segunda consecuencia de un campo de desplazamientos periódico es modificar la base de los vectores periódicos. Por ejemplo, considérese que la celda se deforma, pero en este caso se afecta la distancia entre caras periódicas, ver Figura 3.8. En este caso, puesto que las células vecinas sufren la misma transformación (condición periódica), ésta altera la dimensión global de la *red* y el efecto se amplifica desde el nivel microscópico al macroscópico. Cada uno de estos dos efectos, que se producen simultáneamente, tiene su importancia. El primero, que se puede considerar como un desplazamiento diferencial de las partículas, se requiere para que las celdas alcancen su equilibrio interno. El segundo, que altera los vectores de periodicidad, está relacionado con la deformación del medio.

En las células hexagonales, se puede generar perturbaciones tanto a partir de cambios de forma en las caras, como también con desplazamientos de tres de sus vértices periódicos, sin crear un efecto que se manifieste a nivel global, tal como lo presenta la Figura 3.9. Esto sucede porque los vectores de periodicidad dentro de una célula están definidos por tres vértices periódicos de la célula. Entonces, se puede trasladar con igual desplazamiento los otros tres vértices sin alterar los vectores de periodicidad, puesto que la célula es muy

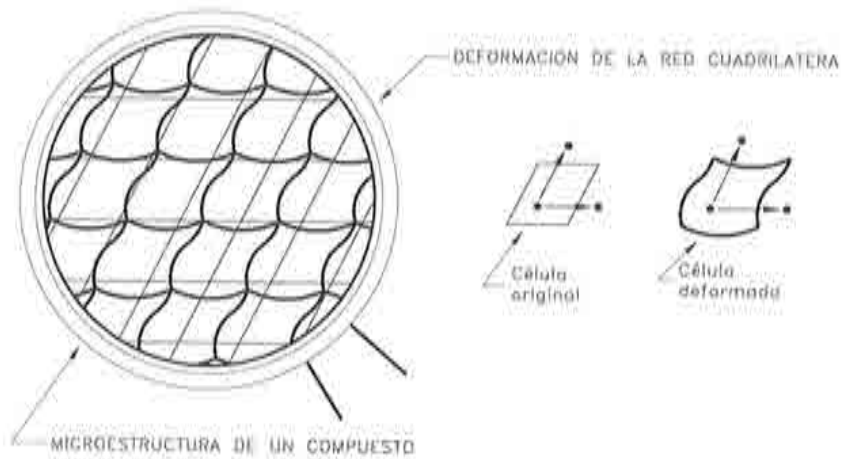


Figura 3.8: Deformación de la red bajo un campo de desplazamientos periódico que modifica la base de vectores de la célula.

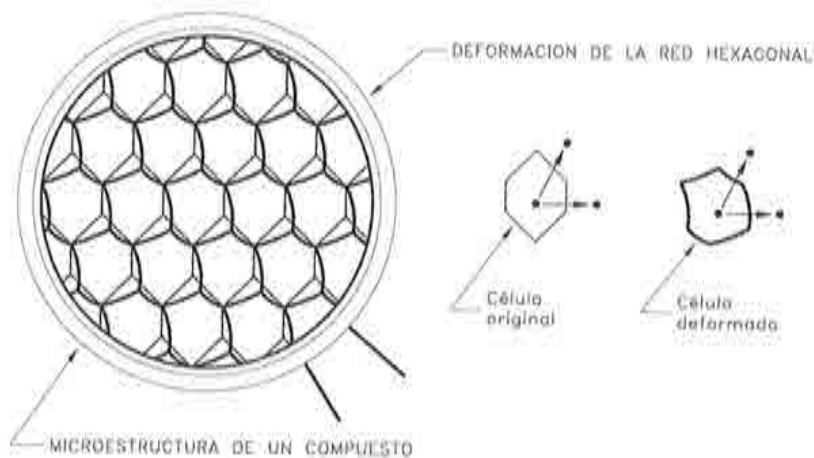


Figura 3.9: Campo de desplazamiento periódico, que presenta un desplazamiento relativo de tres de los vértices periódicos.

pequeña, esta perturbación del dominio no se aprecia a nivel macroscópico. Sin embargo, si se disminuye o aumenta la distancia relativa entre los vértices periódicos, se requiere necesariamente que los otros vértices sufran la misma transformación para que el medio mantenga la periodicidad local y el efecto se amplifica desde la escala microscópica a la macroscópica.

Se remarca, la deformación en la escala macroscópica está relacionada

80CAPÍTULO 3. TEORÍA DE HOMOGENEIZACIÓN: FORMULACIÓN

con la transformación que sufren los vectores de periodicidad o lo que es lo mismo, con el desplazamiento relativo entre puntos periódicos. Dicha relación se obtiene en el siguiente apartado.

3.4 TENSOR DE DEFORMACIONES HOMOGENEIZADO

Considérese un cuerpo Ω de material compuesto cuyas partículas, a nivel macroscópico, se encuentran etiquetadas a un sistema de *coordenadas de referencia* \mathbf{X} . Bajo dicho sistema de coordenadas se admite que el material es homogéneo. Sin embargo, bajo un punto de vista microscópico, el material se encuentra formado por una distribución periódica de materiales componentes. Supóngase que se amplía un lugar cualquiera P , que bajo el punto de vista macroscópico es prácticamente un punto de coordenadas X_i , de tal forma que es posible apreciar los materiales componentes y por consiguiente los campos de las variables que se producen en la microescala. Sea una celda de dominio Y (ver figura 3.10) la ampliación de dicho dominio, el cual se encuentran bajo a un sistema de *coordenadas de referencia*⁴ \mathbf{Y} . Este dominio

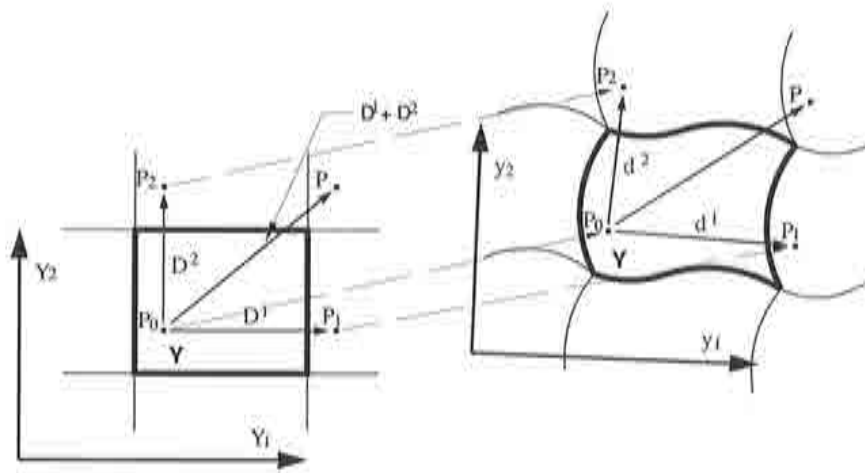


Figura 3.10: Vectores de periodicidad D^i en la configuración de referencia y d^i en la configuración actualizada.

por definición está asociado a unos vectores de periodicidad D^i (donde, para un espacio bidimensional i es 1 ó 2, es decir: D^1 ó D^2). En esta figura, los puntos P_0 , P_1 , P_2 , representan los puntos periódicos de una célula en las coordenadas de referencia. Por consiguiente, la distancia entre dichos puntos

⁴En este apartado se va a distinguir las *coordenadas de referencia* \mathbf{Y} de las *coordenadas actualizadas* \mathbf{y} , pero no se debe confundir con el dominio Y de la célula.

definen los vectores de periodicidad, esto es

$$D^i = Y_{P_i} - Y_{P_0} \quad ; \quad i = 1, 2; \quad (3.2)$$

Considérese además, que el medio Ω sufre un desplazamiento $u(x, y)$, dicho desplazamiento genera una nueva posición de las partículas a nivel macroscópico, esta es $x = X + u$. En cambio, a nivel microscópico la célula queda representada en las *coordenadas actualizadas* y , tal como lo presenta la Figura 3.10. En donde, el campo de desplazamientos u traslada la posición de los puntos P_0, P_1, P_2 , de las coordenadas de referencia a la posición p_0, p_1, p_2 en las coordenadas actualizadas. De acuerdo a la hipótesis de periodicidad local, el medio aunque se deforme mantiene la periodicidad local. En consecuencia, la célula está asociada a una nueva base de vectores de periodicidad d^i , definido por la posición de los puntos periódicos en el espacio actualizado,

$$d^i = y_{p_i} - y_{p_0} = D^i + u_{p_i} - u_{p_0} \quad ; \quad i = 1, 2 \quad (3.3)$$

donde, d se denomina *vector actualizado de periodicidad* y $u_{p_i} - u_{p_0}$ es el desplazamiento relativo entre puntos periódicos.

La transformación del espacio de las células está asociada al cambio de los vectores de periodicidad. La derivada parcial de estos vectores es

$$\frac{\partial d^i}{\partial D^j} = \frac{\partial(y_{p_i} - y_{p_0})}{\partial(Y_{P_i} - Y_{P_0})} \quad (3.4)$$

Ahora bien, bajo el punto de vista macroscópico los vectores de periodicidad representan unos vectores infinitesimales ($|D| \rightarrow 0$). En consecuencia, bajo la escala global el cambio de estos vectores puede ser entendido como

$$\frac{\partial d^i}{\partial D^j} = \lim_{D \rightarrow 0} \left[\frac{\partial(y_{p_i} - y_{p_0})}{\partial(Y_{P_i} - Y_{P_0})} \right] \simeq \frac{\partial x^i}{\partial X^j} = F^{ij} \quad (3.5)$$

en donde, el superíndice x representa que la variable se considera bajo el punto de vista macroscópico. Entonces, F^{ij} es el tensor *gradiente de deformación homogeneizado*. Este simple cambio de escala permite determinar el campo de deformaciones macroscópicas a través de los conceptos desarrollados en la Mecánica de Medios Continuos, véase por ejemplo la siguiente referencia (Malvern, 1969).

Entonces,

$$d = F^x \cdot D \quad (3.6)$$

El cuadrado de la longitud del vector actualizado de periodicidad es⁵

$$\begin{aligned} |d|^2 &= d^T \cdot d \\ &= D^T \cdot (F^x)^T \cdot F^x \cdot D \end{aligned} \quad (3.7)$$

y la diferencia del cuadrado de la magnitud es

$$\begin{aligned} |d|^2 - |D|^2 &= [D^T \cdot (F^x)^T] \cdot [F^x \cdot D] - D^T \cdot D \\ &= D^T \cdot [(F^x)^T \cdot F^x - I] \cdot D \\ &= 2D^T \cdot E \cdot D \end{aligned} \quad (3.8)$$

de donde, resulta la medida de deformación de Green Lagrange (E) para el compuesto. En pequeñas deformaciones no hay diferencia apreciable entre las distintas medidas de deformación, es decir $E \simeq \varepsilon$. Entonces, es posible escribir

$$\begin{aligned} \varepsilon^x &= \frac{1}{2} [(F^x)^T \cdot F^x - I] \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial d^T}{\partial D} \cdot \frac{\partial d}{\partial D} - I \right] \end{aligned} \quad (3.9)$$

Por consiguiente, se define como *tensor de deformación homogeneizado*⁶ (ε^x) la deformación medida entre puntos periódicos. Esta medida de deformación mide el cambio global del espacio de la célula bajo un campo de desplazamientos periódico y es independiente de las ondulaciones que se generan en los contornos de las células. Naturalmente, este tensor de deformación homogeneizado, al medir la deformación que se produce entre puntos del contorno del dominio de la célula, corresponde además al valor promedio de deformación⁷ $\langle \varepsilon(\mathbf{y}) \rangle_Y$ en dicho dominio,

$$\begin{aligned} \varepsilon^x &= \langle \varepsilon \rangle_Y \\ &= \frac{1}{V_Y} \int_Y \varepsilon \, dV \\ &= \frac{1}{V_Y} \int_Y \frac{1}{2} [\nabla_y \mathbf{u} + (\nabla_y \mathbf{u})^T] \, dV \end{aligned} \quad (3.10)$$

en donde, ε es el tensor de deformaciones en la escala microscópica, $\nabla_y \mathbf{u}$ es gradiente de los desplazamientos de una partícula con respecto a la escala \mathbf{y}

⁵El superíndice T representa el tensor transpuesto.

⁶En la propuesta de esta monografía se utiliza la palabra *homogeneizado* cuando se refiere a una variable de carácter macroscópico.

⁷Para simplificar la notación se ha preferido prescindir del superíndice y en las variables microscópicas, por ejemplo el *tensor de deformación* a nivel microscópico se representa simplemente por ε .

y V_Y representa el volumen global del dominio Y .

Este resultado coincide con la *teoría de promedios* (ver apartado 2.2) y con la *teoría de la expansión asintótica*⁸ (ver apartado 2.3). Sin embargo, en esta formulación no se descompone el campo de desplazamientos, evitando de esta manera la introducción del tensor denominado de localización (Suquet, 1987), de concentración (Mandel, 1972), o de influencia (Hill, 1967) de deformaciones o tensiones, como también se evita la introducción de funciones periódicas (Duvaut, 1976) (Sanchez-Palencia, 1980) (Lene & Duvaut, 1981). Esta innovadora forma de medir la deformación de la célula a través de la transformación de los vectores de periodicidad, permite (como se presenta posteriormente) imponer el requisito de periodicidad de desplazamientos en las restricciones de borde de la célula.

A continuación se presenta un cuadro que resume las expresiones cinemáticas en cada una de las dos escalas:

<p><i>ESCALA MICROSCÓPICA.</i>— Tensor de deformación (deformaciones infinitesimales): $\varepsilon = \frac{1}{2} [\nabla_y \mathbf{u} + (\nabla_y \mathbf{u})^T]$</p> <p><i>ESCALA MACROSCÓPICA.</i>— Tensor de deformación homogeneizado: $\varepsilon^x = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \mathbf{d}^T}{\partial \mathbf{D}} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial \mathbf{D}} - \mathbf{I} \right] = \frac{1}{V_Y} \int_Y \varepsilon \, dV$ donde, $\mathbf{F}^x = \lim_{D \rightarrow 0} \left(\frac{\partial \mathbf{d}^i}{\partial \mathbf{D}^i} \right) = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}}$ y $\mathbf{D}^i = \mathbf{Y}_{P_i} - \mathbf{Y}_{P_0}$; $\mathbf{d}^i = \mathbf{y}_{p_i} - \mathbf{y}_{p_0} = \mathbf{D}^i + \mathbf{u}_{P_i} - \mathbf{u}_{P_0}$ con $i = 1, 2$</p>
--

⁸En la *Teoría de la expansión asintótica* el tensor de deformación macroscópico ε^x suele representarse como: ε^0 .

3.5 ECUACIÓN DE EQUILIBRIO Y TENSOR DE TENSIONES HOMOGENEIZADO

Nuevamente, se supone que Ω es el dominio de un cuerpo de material compuesto con distribución periódica de sus componentes, al cual se le subdivide en células de dominio Y . Por definición, estos dominios son iguales y su volumen V_Y es muy pequeño ($V_Y \rightarrow 0$) bajo el punto de vista macroscópico. Además, puesto que las caras de las células son superficies materiales, cada uno de estos dominios representa un *volumen material* en el cual se cumple el postulado básico de la Mecánica de Medios Continuos conocido como *balance del momento* (Malvern, 1969)

$$\int_{S_Y} \sigma_{ij} n_j dS + \int_{V_Y} \rho b_i dV = \frac{d}{dt} \int_{V_Y} \rho v_i dV \quad (3.11)$$

donde σ es el tensor de tensiones⁹ (a nivel microscópico), \mathbf{n} es un vector de dirección unitario, ρ es la masa, \mathbf{b} es la fuerza asociada a la masa, \mathbf{v} es la velocidad y S_Y la superficie del contorno de la célula. En particular, el objeto de este trabajo está enfocado a problemas de la mecánica de sólidos en equilibrio estático, en consecuencia se considera que la aceleración ($d\mathbf{v}/dt$) es igual a cero. Entonces, la ecuación que asegura el equilibrio en la microestructura se expresa

$$\int_{S_Y} \sigma_{ij} n_j dS + \int_{V_Y} \rho b_i dV = 0 \quad (3.12)$$

y aplicando el *teorema de la divergencia* (Malvern, 1969), se tiene

$$\int_{V_Y} \sigma_{ij,j} dV + \int_{V_Y} \rho b_i dV = 0 \quad (3.13)$$

No obstante, al considerar esta ecuación bajo el punto de vista de la escala macroscópica, resulta en el caso idealizado que el volumen de la célula es muy pequeño y tiende a cero. Por consiguiente, llevamos esta expresión a su límite

$$\lim_{V_Y \rightarrow 0} \left(\int_{V_Y} \sigma_{ij,j} dV + \int_{V_Y} \rho b_i dV \right) = 0$$

⁹Como se mencionó, se ha preferido prescindir del superíndice y en las variables microscópicas.

las integrales de la ecuación 3.13 dependen del volumen de la célula ($V_Y \rightarrow 0$). Por consiguiente, es obvio que el segundo término que representa el valor de las fuerzas de volumen en la célula es de un orden de magnitud pequeño y tienden a cero; en consecuencia, lo mismo sucede con la divergencia del tensor de tensiones sobre el dominio de la célula

$$\int_{V_Y} \sigma_{ij;j} dV \simeq 0 \quad ; \quad \int_{V_Y} \rho b_i dV \simeq 0. \quad (3.14)$$

Las expresiones anteriores representan dos conceptos que frecuentemente se han utilizado en la *teoría de homogeneización*. La primera integral indica el concepto de equilibrio en la microestructura, esto es: la integral de las fuerzas sobre el contorno del dominio de la célula se anula. En cambio, la segunda integral presenta que a nivel de la microestructura no se requiere considerar el efecto de las fuerzas de masa, puesto que al ser la célula relativamente muy pequeña, la integral sobre las fuerzas másicas es de un orden de magnitud despreciable.

Por otra parte, la fuerza asociada a un elemento de superficie orientada $dS = \mathbf{n}dS$ (siendo \mathbf{n} un vector unitario perpendicular a dS) es igual a $\mathbf{t}(\mathbf{n})dS$, donde $\mathbf{t}(\mathbf{n})$ es el vector de tracción en la superficie dada. Dicho vector depende no sólo de la posición, sino también de la orientación del elemento de superficie direccionada por \mathbf{n} , y se encuentra definido de la siguiente manera

$$\mathbf{t}(\mathbf{n}) = \lim_{dS \rightarrow 0} \frac{\mathbf{f}dS}{dS} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$$

Considérese dos elementos de superficie orientados periódicos que pertenecen al contorno de una célula $dS^+ = \mathbf{n}_1 dS$ y $dS^- = \mathbf{n}_2 dS$, tal como se presenta en la Figura 3.11. Por definición de superficies periódicas, los vectores de orientación \mathbf{n}_1 y \mathbf{n}_2 exteriores al dominio de la célula son iguales pero de sentido contrario. Si se desprecia los efectos de las fuerzas de masa e inercia (fuerzas relativamente muy pequeñas), el *principio de acción y reacción* asegura que la fuerza de superficie $\mathbf{f} = \mathbf{t}(\mathbf{n})dS$ en los dos elementos de superficie periódicos mencionados son de igual magnitud y dirección opuesta. Este principio viene expresado en la literatura sobre homogeneización cuando se afirma que el campo de tensiones en el contorno de la célula es *antiperiódico*, véase por ejemplo (Bensoussan *et al.*, 1978) (Sanchez-Palencia, 1980) (Suquet, 1982) (Lene, 1986) (Anthoine, 1995) (Michel *et al.*, 1999) etc. En otras palabras, (si se toma un elemento dS tan pequeño como se quiera) *la suma de fuerzas exteriores al dominio de la célula en puntos periódicos es igual a 0*.

3.5. ECUACIÓN DE EQUILIBRIO Y TENSOR DE TENSIONES HOMOGENEIZADO 87

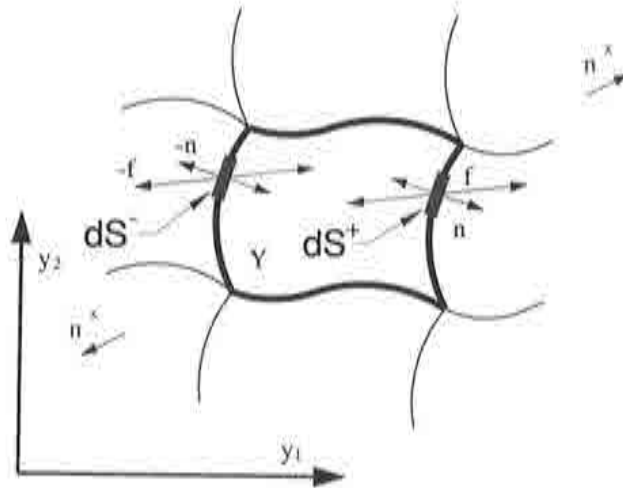


Figura 3.11: Las fuerzas que actúan en el contorno son iguales en magnitud y dirección contraria.

Ahora bien, si se define un tensor de segundo orden σ_{ij}^x como el promedio de las reacciones en el contorno de la célula:

$$\sigma_{ik}^x = \frac{\int_{S_Y} y_k \sigma_{ij} n_j dS}{\int_{S_Y} y_k n_j dS} \quad (3.15)$$

el teorema de la divergencia (también se puede utilizar *el teorema de la tensión media* (Malvern, 1969)), presenta

$$\int_{S_Y} y_k \sigma_{ij} n_j dS = \int_{V_Y} \sigma_{ij,j} dV + \int_{V_Y} y_{k,j} \sigma_{ij} dV \quad (3.16)$$

despreciando el efecto de las fuerzas de masa $\sigma_{ij,j} = 0$ (ver también la ecuación 3.14), se tiene

$$\int_{S_Y} y_k \sigma_{ij} n_j dS = \int_{V_Y} y_{k,j} \sigma_{ij} dV \quad (3.17)$$

y se obtiene la clásica ecuación de la *teoría de promedios*, como el valor medio de tensiones dentro del volumen de la célula. Pero esta vez no se obtiene de

manera heurística, dado que

$$\begin{aligned}\sigma_{ik}^x &= \frac{\int_{V_Y} y_{kij} \sigma_{ij} dV}{\int_{V_Y} y_{kij} dV} \\ &= \frac{\int_{V_Y} \delta_{kij} \sigma_{ij} dV}{\int_{V_Y} \delta_{kij} dV} \\ &= \frac{1}{V_Y} \int_{V_Y} \sigma_{ik} dV.\end{aligned}\quad (3.18)$$

Para cualquier vector unitario \mathbf{n}^x , el cual se puede entender como un vector unitario bajo la escala macroscópica, se define un *vector de tracción homogeneizado* \mathbf{t}^x como la fuerza promedio en el contorno de la célula S_Y determinada por la dirección (\mathbf{n}^x),

$$\begin{aligned}t_i^x &= \frac{\int_{S_Y} y_k \sigma_{ij} n_j dS}{\int_{S_Y} y_k n_j dS} n_k^x \\ &= \frac{1}{V_Y} \int_{V_Y} \sigma_{ik} dV n_k^x\end{aligned}\quad (3.19)$$

el valor del lado derecho de la ecuación, es una función que depende de la dirección de \mathbf{n}^x , y puesto que

$$t_i^x = \sigma_{ik}^x n_k^x \quad (3.20)$$

el tensor σ^x cumple para efectos macroscópicos iguales requisitos que el tensor de tensiones σ en los materiales homogéneos. En consecuencia, al tensor σ^x se denomina en adelante *tensor homogeneizado de tensiones*.

Por otra parte, bajo el punto de vista global, al considerar el cuerpo Ω formado por el material compuesto, la ecuación de equilibrio estático establece

$$\int_V \sigma_{ij,j} dV + \int_V \rho b_i dV = 0 \quad (3.21)$$

en donde, naturalmente se han considerado los efectos de las fuerzas de volumen (o másicas), puesto que en la macroescala su magnitud puede ser apreciable. Admitase que el medio con microestructura periódica puede representarse como un material homogéneo formado por una infinidad de partículas exactamente iguales, las cuales se han denominado células $Y \rightarrow 0$.

3.5. ECUACIÓN DE EQUILIBRIO Y TENSOR DE TENSIONES HOMOGENEIZADO 89

Entonces, es posible expresar la ecuación de equilibrio global como la integral del equilibrio sobre cada una de estas células

$$\int_V \left(\frac{1}{V_Y} \int_{V_Y} \sigma_{ij,j} dV \right) dV + \int_V \left(\frac{1}{V_Y} \int_{V_Y} \rho b_i dV \right) dV = 0 \quad (3.22)$$

y reemplazando las integrales sobre el volumen de la célula por las variables homogeneizadas, se tiene

$$\int_V \sigma_{ij,j}^x dV + \int_V \rho^x b_i^x dV = 0 \quad (3.23)$$

en donde, el efecto de las fuerzas másicas corresponde al promedio de sus correspondientes valores en la celda unidad

$$\rho^x b_i^x = \frac{1}{V_Y} \int_{V_Y} \rho b_i dV \quad (3.24)$$

La ecuación 3.23 es válida para cualquier región Ω del material compuesto, por lo tanto es válida también si se elige un dominio pequeño cualquiera, cuyo límite es el dominio de la célula ($\Omega \rightarrow Y, Y \rightarrow 0$). En consecuencia se obtiene la forma *local homogeneizada de la cantidad de movimiento*

$$\sigma_{ij,j}^x + \rho^x b_i^x = 0 \quad (3.25)$$

La simetría del tensor de tensiones homogeneizado puede obtenerse de dos maneras. La primera que se presenta a continuación sigue un procedimiento análogo a la deducción de la simetría del tensor de tensiones en materiales homogéneos (Lublinter, 1990). Esto es, reemplazando la ecuación 3.25 en el balance del momento angular en la macroescala, en donde ϵ_{ijk} representa el *vector permutación*¹⁰, se tiene

$$\int_S \epsilon_{ijk} x_j \sigma_{kl}^x n_l dS + \int_V \epsilon_{ijk} x_j \rho^x b_k^x dV = 0 \quad (3.26)$$

Por el *teorema de Gauss*

$$\begin{aligned} \int_S x_j \sigma_{kl}^x n_l dS &= \int_V (\delta_{ij} \sigma_{kl}^x + x_j \sigma_{kl,i}^x) dV \\ &= \int_V (\sigma_{kl}^x + x_j \sigma_{kl,i}^x) dV \end{aligned} \quad (3.27)$$

¹⁰No confundir el *vector de permutación* ϵ con el parámetro ϵ que se utiliza en los desarrollos asintóticos.

De esta forma

$$\int_V \epsilon_{ijk} (\sigma_{kl}^x + x_j \sigma_{kl,l}^x + x_j \rho^x b_k^x) dV = 0 \quad (3.28)$$

$$\int_V \epsilon_{ijk} [\sigma_{kj}^x + x_j (\sigma_{kl,l}^x + \rho^x b_k^x)] dV = 0$$

y utilizando la ecuación 3.25, se reduce a

$$\int_V \epsilon_{ijk} \sigma_{kj}^x dV = 0. \quad (3.29)$$

Siendo esta ecuación válida para cualquier región del compuesto Ω , y reduciendo este dominio al límite $\Omega \rightarrow Y \rightarrow 0$, se tiene

$$\epsilon_{ijk} \sigma_{kj}^x = 0 \quad (3.30)$$

esto implica que el tensor de tensiones homogeneizado es simétrico

$$\sigma_{ij}^x = \sigma_{ji}^x \quad (3.31)$$

Pero también, la simetría del tensor de tensiones puede obtenerse directamente desde la simetrías de la célula. Considérese un vector unitario cualquiera \mathbf{n}^x bajo la escala macroscópica y partiendo de la simetría del tensor de tensiones se puede escribir

$$t_i^x = \sigma_{ik}^x n_k^x = -\sigma_{ik}^x (-n_k^x) \quad (3.32)$$

entonces se puede establecer la siguiente igualdad

$$\frac{\int_{S_Y} y_k \sigma_{ij} n_j dS}{\int_{S_Y} y_k n_j dS} n_k^x = -\frac{\int_{S_Y} y_k \sigma_{ij} n_j dS}{\int_{S_Y} y_k n_j dS} (-n_k^x)$$

y simplificando

$$\int_{S_Y} \sigma_{ij} n_j dS n_k^x = -\int_{S_Y} \sigma_{ij} n_j dS (-n_k^x)$$

es posible dividir la superficie (S_Y) del contorno de la célula, en dos superficies opuestas, tal que se denomina S^+ a la superficie de contorno de la célula formada por la suma de los elementos de superficie que cumple con la siguiente condición $dS^+ = \mathbf{n} dS \cdot \mathbf{n}^x > 0$. En cambio, S^- es la superficie del contorno de la célula formada por los elementos de superficie $dS^- = \mathbf{n} dS \cdot \mathbf{n}^x < 0$.

3.5. ECUACIÓN DE EQUILIBRIO Y TENSOR DE TENSIONES HOMOGENEIZADO 91

Puesto que dS^+ y dS^- son elementos de superficie periódicos, las fuerzas globales de superficie que actúan en S^+ y S^- son de igual magnitud pero de sentido contrario,

$$\int_{S^+} \sigma_{ij} n_j dS^+ = - \int_{S^-} \sigma_{ij} n_j dS^- \quad (3.33)$$

lo cual concuerda con la hipótesis de simetría del tensor de tensiones.

En el siguiente cuadro se presenta los principales resultados de este apartado:

<p><i>ESCALA MICROSCÓPICA :</i></p> <p>En el dominio de la célula, se tiene:</p> $\int_{V_Y} \sigma_{ij,j} dV \simeq 0 \quad ; \quad \int_{V_Y} \rho b_i dV \simeq 0$ <p>Las fuerzas exteriores al dominio Y en puntos periódicos cumplen:</p> $t_i dS_P = -t_i dS_{P+D}$ <p><i>ESCALA MACROSCÓPICA :</i></p> <p>Expresión local del equilibrio estático:</p> $\sigma_{ij,j}^x + \rho^x b_i^x = 0$ <p>donde, σ^x es el tensor de tensiones homogeneizado, esto es:</p> $\sigma_{ij}^x = \frac{1}{V_Y} \int_{V_Y} \sigma_{ij} dV \quad ; \quad \sigma_{ij}^x = \sigma_{ji}^x \quad t_i^x(n^x) = \sigma_{ij}^x n_j^x$ <p>y $\rho^x b_i^x$ es la fuerza de masa homogeneizada:</p> $\rho^x b_i^x = \frac{1}{V_Y} \int_{V_Y} \rho b_i dV$

3.6 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA EN LA ESCALA MICROSCÓPICA

En este apartado se establece el problema a nivel micromecánico del material compuesto. Se admite que el material es un medio periódico y por ende es susceptible a la división en unidades estructurales. El comportamiento del compuesto se obtiene a través de la célula como unidad estructural. Para lo cual se considera el problema cuasi-estático y en pequeñas deformaciones. Se establecen las variables del problema y se formula las ecuaciones de gobierno. Además, se determinan las condiciones de contorno de la célula, tales que reproducen la hipótesis de periodicidad local. Por simplicidad, se considera en este trabajo que los materiales componentes tienen adherencia perfecta, sin embargo el método no excluye la posibilidad del despegue de los materiales componentes a través de la inclusión de una adecuada *interface*.

3.6.1 Descripción geométrica

Considérese un dominio Ω de material compuesto periódico susceptible a la división en unidades estructurales (células), cuyo dominio es Y . Tal que el dominio global Ω puede ser reproducido por la repetición ordenada de los pequeños dominios Y . Cada uno de estos dominios está constituido por la distribución ordenada de los diferentes materiales componentes. Entonces, las partículas de una célula se etiquetan de acuerdo a su posición a un espacio de referencia microscópico \mathbf{y} . Al contorno del dominio se le denomina ∂Y y está formado por superficies materiales pares, tales que forman caras periódicas. Se recuerda que cada punto del contorno de la célula tiene un punto periódico en el lado opuesto de este dominio, excepto los vértices que tienen más de un punto periódico y además que los vectores de periodicidad están definidos por la posición relativa entre puntos periódicos, esto es

$$D^i = Y_{P_i} - Y_{P_0}$$

Estos dominios incluido su contorno pueden desplazarse en el espacio (de acuerdo al movimiento de las partículas). El campo de desplazamientos \mathbf{u} definen la nueva posición de todas las partículas del dominio Y . Se establece como medida de deformación en la escala microscópica al tensor de deformaciones (en pequeñas deformaciones) $\boldsymbol{\varepsilon}$, que se puede expresar como

el gradiente simétrico de los desplazamientos

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon} &= \frac{1}{2}(\nabla_y \mathbf{u} + (\nabla_y \mathbf{u})^T) \\ \varepsilon_{ij}(y_i) &= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j}{\partial y_i}\right).\end{aligned}$$

3.6.2 Ecuaciones de gobierno

La ecuación diferencial que gobierna el problema micromecánico de los sólidos en equilibrio estático es

$$\nabla_y \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b} = 0 \quad (3.34)$$

donde, $\boldsymbol{\sigma}$ es el tensor de tensiones, ρ la densidad de masa y \mathbf{b} las fuerzas asociadas a la masa. Sin embargo, tal como se ha comentado anteriormente, puesto que se supone que la célula es muy pequeña, las fuerzas másicas son de un orden de magnitud mucho menor que las fuerzas generadas por la interacción de los materiales componentes. En consecuencia, la ecuación que gobierna el problema a nivel micromecánico se reduce a

$$\nabla_y \boldsymbol{\sigma} = 0 \quad \text{micro-equilibrio.} \quad (3.35)$$

Supóngase que el campo de tensiones $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{y})$ es una función conocida a través de la deformación del material componente $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{y})$. Dentro del contexto de elasticidad lineal, la ecuación que relaciona estas variables se conoce como la *ley de Hooke* (Malvern, 1969)

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.36)$$

en donde \mathbf{C} es el tensor constitutivo elástico, cuyos coeficientes son constantes y naturalmente dependen del material componente. Por lo tanto, depende de la posición y_i dentro del dominio de la célula. Pero, si los materiales componentes presentan comportamiento no lineal, se requiere modificar la ecuación 3.36. En este caso, la tensión depende de lo que se conoce como una *ecuación constitutiva* (Malvern, 1969). Existe diferentes ecuaciones constitutivas estándar para el comportamiento idealizado de los materiales, como por ejemplo: elásticos, plásticos, viscosos, degradables, etc. En cualquier caso se admite para cada material la existencia de un *potencial de energía* (Φ) o una función de *energía libre específica* (Ψ), que es una función de estado y depende de las *variables libres* (en este caso $\boldsymbol{\varepsilon}$) y unas *variables internas* ($\boldsymbol{\alpha} = [\alpha_k]$ con $k = 1, \dots, n$). De tal forma que, la ecuación constitutiva a través de dichas variables determina el valor de la variable dependiente (en

este caso σ). Para materiales inelásticos la ecuación anterior se reemplaza por la forma incremental

$$\dot{\sigma} = \tilde{C} : \dot{\varepsilon} \quad (3.37)$$

donde el tensor constitutivo \tilde{C} representa un tensor variable que depende del estado del material. Admitase la ecuación 3.37 como una expresión de carácter general.

Ecuación de equilibrio en la microestructura:
$\nabla_{\mathbf{y}} \sigma = 0$
Ecuación constitutiva en cada punto \mathbf{y} de la microestructura (determinación del Tensor de tensiones):
$\sigma = \sigma(\Psi, \varepsilon, \alpha) \quad ; \quad \dot{\sigma} = \tilde{C} : \dot{\varepsilon}$
Función de energía libre:
$\Psi = \Psi(\varepsilon, \alpha)$
Variable libre:
$\varepsilon = \frac{1}{2}(\nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u} + (\nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u})^T)$
Variables internas:
$\alpha = [\alpha_k] \quad \text{con } k = 1, \dots, n$

3.6.3 Condiciones de contorno de la célula

Para establecer completamente el problema se debe introducir las condiciones de contorno en el dominio Y de la célula. En el problema estándar de materiales homogéneos, usualmente se admite para un dominio Ω la existencia de un contorno $\partial\Omega | \partial\Omega_u \cap \partial\Omega_t = \emptyset$ y $\partial\Omega_u \cup \partial\Omega_t = \partial\Omega$, en donde $\partial\Omega_u$ es la parte del contorno en la que se conoce los desplazamientos (condición de Dirichlet), $\partial\Omega_t$ es la parte del contorno en donde se conoce las fuerzas (condición de Newman), siendo $\mathbf{t} = \sigma \cdot \mathbf{n}$ el vector de tracción. Sin embargo, para la celda unidad se requieren unas condiciones especiales, tales que introducen la periodicidad local del campo de desplazamientos y fuerzas a nivel de la microestructura.

Al considerar que el compuesto sufre una deformación macroscópica, la hipótesis de periodicidad local implica que el dominio está asociado a una base de vectores periódicos en el espacio de referencia, y otra base de vectores periódicos en el espacio actualizado. El cambio o transformación de dicha base de vectores representa necesariamente un desplazamiento relativo entre puntos periódicos, entonces

$$\mathbf{d}^i - \mathbf{D}^i = \mathbf{u}_{p+D^i} - \mathbf{u}_p$$

3.6. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA EN LA ESCALA MICROSCÓPICA 95

en donde, \mathbf{u}_p representa el desplazamiento de un punto cualquiera de coordenadas \mathbf{y}_p y \mathbf{u}_{p+D} representa el desplazamiento del correspondiente punto periódico de coordenadas $\mathbf{y}_p + \mathbf{D}$. Sin embargo, bajo el punto de vista global (en donde $|\mathbf{D}| \rightarrow 0$) este desplazamiento relativo se puede interpretar como

$$\mathbf{d} - \mathbf{D} = \lim_{|\mathbf{D}| \rightarrow 0} (\mathbf{u}_{p+D} - \mathbf{u}_p) = \nabla \mathbf{u}^x \cdot \mathbf{D} \quad (3.38)$$

donde $\nabla \mathbf{u}^x$ es el gradiente de desplazamientos en la escala macroscópica.

El gradiente de desplazamientos se puede expresar como la suma de un tensor simétrico y otro antisimétrico

$$\nabla \mathbf{u} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) + \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} - (\nabla \mathbf{u})^T) = \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\omega}$$

donde el tensor simétrico $\boldsymbol{\varepsilon}$ representa un estiramiento y por ende se denomina *tensor de deformación Lagrangeano lineal*, mientras el otro tensor $\boldsymbol{\omega}$ representa un giro de cuerpo rígido, de ahí que se denomina *tensor de rotación Lagrangeano lineal* (Malvern, 1969). Por lo tanto, se puede expresar la ecuación 3.38 de la siguiente forma

$$\mathbf{u}_{p+D} - \mathbf{u}_p = \boldsymbol{\varepsilon}^x \cdot \mathbf{D} + \boldsymbol{\omega}^x \cdot \mathbf{D}, \quad (3.39)$$

donde el término $\boldsymbol{\omega}^x \cdot \mathbf{D}$ representa únicamente una rotación (de cuerpo rígido) del dominio de la célula. Puesto que este término no afecta la medida de deformación del dominio, puede ser obviado

$$\mathbf{u}_{p+D} - \mathbf{u}_p \simeq \boldsymbol{\varepsilon}^x \cdot \mathbf{D} \quad (3.40)$$

dicha condición de desplazamientos relativos entre puntos periódicos garantiza la periodicidad local de la microestructura.

Por otra parte, prescindiendo de las fuerzas másicas ($\nabla \boldsymbol{\sigma} = 0$), las fuerzas exteriores al dominio de la célula asociadas a dos elementos de superficie (en puntos) periódicos son iguales en magnitud pero de sentido contrario¹¹.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \, dS_{p+D} &= \boldsymbol{\sigma} \cdot (-\mathbf{n}) \, dS_p \\ \mathbf{t}_{p+D} \, dS &= -\mathbf{t}_p \, dS \\ \mathbf{f}_{p+D} &= -\mathbf{f}_p \end{aligned} \quad (3.41)$$

esta condición garantiza la periodicidad del campo de fuerzas y debe ser satisfecha cuando la célula alcanza el equilibrio bajo el mínimo consumo de energía.

¹¹Esto se conoce como un campo de fuerzas antiperiódicas

3.6.4 Formulación fuerte del problema

Bajo las consideraciones de esta apartado, el problema microestructural local de los materiales compuestos se reduce a solucionar el siguiente problema de valores de contorno en el dominio Y :¹²

$$\begin{array}{ll} \nabla_y \sigma = 0 & \text{ecuación de equilibrio (3.42)} \\ \dot{\sigma} = \tilde{C} : \dot{\varepsilon} & \text{ecuación constitutiva "genérica" en } Y \\ u_{p+D} - u_p = \varepsilon^a \cdot D & \text{periodicidad de desplazamientos en } \partial Y \\ t_{p+D} = -t_p & \text{periodicidad de fuerzas en } \partial Y \end{array}$$

En donde los campos microscópicos de tensiones σ y deformaciones ε son las incógnitas del problema, \tilde{C} es el tensor constitutivo que corresponde al (respectivo) material componente en cada punto y del interior del dominio, ε^a es el tensor de deformaciones homogeneizado, D representa a los vectores de periodicidad que relacionan los puntos del contorno periódico de la célula y t el vector de tracción. Obsérvese, que las condiciones de contorno imponen un campo periódico de desplazamientos (no determinado) cuya medida de deformación global ε^a se supone que es un valor conocido. Al mismo tiempo se restringe la solución a un campo de fuerzas antiperiódicas en el contorno del dominio (en este caso, se supone los vectores unitarios de direccionamiento de superficie (n) en dirección saliente al dominio). Dicha condición de fuerzas "antiperiódicas" puede ser entendida también como una *condición de periodicidad de fuerzas*, solo que en este caso se hace referencia a la misma dirección para los vectores de direccionamiento en los elementos de superficie periódicos. Observe que, en el problema de valores de contorno a nivel microscópico, tanto el desplazamiento como la fuerza en cada punto del dominio (incluido el contorno) es la solución del problema cuando la célula alcanza el equilibrio.

3.6.5 Equivalencia con la formulación débil del problema

Las ecuaciones del problema 3.42 representan la formulación diferencial o formulación fuerte, cuya solución exacta es extremadamente laboriosa o en muchos casos imposible, es por ello que se han desarrollado métodos numéricos que solucionan el problema de forma aproximada. Por ejemplo, dentro de los métodos numéricos es posible resolver una ecuación diferencial directamente

¹²La *formulación fuerte* también se denomina como *formulación diferencial*.

3.6. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA EN LA ESCALA MICROSCÓPICA 97

con el conocido *método de las diferencias finitas*. También se puede utilizar el *Método de los Elementos Finitos* (utilizado en este trabajo), lo cual requiere una *formulación débil* equivalente¹³ (Hughes, 1987). La ecuación diferencial de equilibrio 3.35 (en donde no se consideran las fuerzas másicas) debe ser nula en todos los puntos del dominio Y y además se deben satisfacer las condiciones de contorno impuestas a través de las ecuaciones 3.40 y 3.41. Aplicando el método de los residuos ponderados¹⁴, se obtiene

$$\int_Y \mathbf{w} \cdot \nabla \sigma \, dY + \int_{\partial Y} \mathbf{w} \cdot (\bar{\mathbf{t}} - \sigma \cdot \mathbf{n}) \, d\partial Y = 0 \quad (3.43)$$

donde \mathbf{w} es un conjunto de funciones arbitrarias de prueba asociadas al campo de los desplazamientos y que satisface las condiciones de contorno de Dirichlet en ∂Y , $\bar{\mathbf{t}}$ (vector de tracción) representa las fuerzas impuestas en el contorno. Aplicando el *teorema de Gauss* (Malvern, 1969) se obtiene la forma débil de la ecuación de movimiento

$$- \int_Y \nabla \mathbf{w} : \sigma \, dY + \int_{\partial Y} \mathbf{w} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, d\partial Y = 0 \quad (3.44)$$

la existencia de la unicidad de la solución de la forma débil es discutida en (Duvaut & Lions, 1972).

En la literatura de mecánica de sólidos, la expresión anterior se la conoce como el *Principio de los Trabajos Virtuales* (PTV) (Malvern, 1969). Supóngase que se elige como vector de ponderación \mathbf{w} un desplazamiento virtual $\mathbf{w} = \delta \mathbf{u}$ factible (método de Galerkin), es decir que se escoge un campo de desplazamientos hipotético arbitrario, no asociado a ningún sistema de cargas exteriores actuales (independientes de ellas), y que además satisface las condiciones geométricas de contorno en ∂Y ; entonces, luego de algunas operaciones, se puede escribir la forma débil de la ecuación de movimiento como

$$\int_Y \delta \varepsilon : \sigma \, dY = \int_{\partial Y} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, d\partial Y \quad (3.45)$$

$$\mathbf{u}_{p+D} - \mathbf{u}_p = \boldsymbol{\varepsilon}^p \cdot \mathbf{D} \quad \text{en } \partial Y, \quad \mathbf{t}_{p+D} = -\mathbf{t}_p \quad \text{en } \partial Y$$

en donde, $\delta \varepsilon$ es el campo de deformaciones virtuales obtenido a partir del campo de desplazamientos virtuales. La ecuación anterior constituye una

¹³La *formulación débil* se la conoce también como *formulación integral*.

¹⁴El método de los residuos ponderados se basa en una técnica que opera con la ecuación integral equivalente, en vez de la ecuación diferencial del problema.

98 *CAPÍTULO 3. TEORÍA DE HOMOGENEIZACIÓN: FORMULACIÓN*

condición de equilibrio de la microestructura (en donde no se considera el efecto de las fuerzas de masa), ya que los desplazamientos virtuales y deformaciones virtuales son arbitrarios.

3.6.6 Solución a través del Método de los Elementos Finitos

En las últimas cuatro décadas el Método de los Elementos Finitos (MEF) se ha convertido en el procedimiento numérico más empleado para simular el comportamiento de estructuras en ingeniería. Una discusión detallada sobre este método puede encontrarse en (Bathe, 1982) (Hughes, 1987) (Oñate, 1992) (Zienkiewicz & Taylor, 1994a). El concepto fundamental del Método de los Elementos Finitos aplicado al problema 3.45 consiste en la discretización del dominio Y en una secuencia de elementos $Y_{(e)}$ (no sobre puestos), los cuales están formados cada uno por un único material componente, de tal forma que

$$Y = \bigcup_{e=1}^{n_{elem}} Y_{(e)} \quad (3.46)$$

donde, $Y_{(e)}$ representa el dominio de los elementos finitos, cada uno de estos dominios tiene un número establecido de nodos, en donde se va a determinar la incógnita del problema (\mathbf{u}).

Entonces, mediante la interpolación espacial convencional para el campo de los desplazamientos, se tiene

$$\mathbf{u}_{(e)} = \sum_{i=1}^n N_{(e)}^{u_i} \tilde{\mathbf{u}}_{(e)}^i = \mathbf{N}_{(e)}^u \tilde{\mathbf{u}}_{(e)} \quad (3.47)$$

donde $\mathbf{N}_{(e)}^u = [N_{(e)}^{u_1}, \dots, N_{(e)}^{u_n}]$ son las funciones de interpolación de los desplazamientos del elemento (e) (desde $i = 1, \dots, n_{node}$ y $e = 1, \dots, n_{elem}$) y $\tilde{\mathbf{u}}_{(e)}$ son los desplazamientos nodales.

Escribiendo la deformación del elemento, en pequeñas deformaciones, en función de los desplazamientos, resulta

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}_{(e)} &= \frac{1}{2} \left((\nabla \mathbf{N}_{(e)}^u \tilde{\mathbf{u}}_{(e)}) + (\nabla \mathbf{N}_{(e)}^u \tilde{\mathbf{u}}_{(e)})^T \right) \\ &= \frac{1}{2} \left((\nabla \mathbf{N}_{(e)}^u) + (\nabla \mathbf{N}_{(e)}^u)^T \right) \tilde{\mathbf{u}}_{(e)} \\ &= \mathbf{B}_{(e)} \tilde{\mathbf{u}}_{(e)} \end{aligned} \quad (3.48)$$

donde $\mathbf{B}_{(e)}$ se conoce como la matriz de derivadas de las funciones de forma. Aplicando el *método de Galerkin*, también conocido como *método de los residuos ponderados*, que consiste en aplicar como funciones de peso las mismas que se utilizan para aproximar el campo de incógnitas, lo cual permite obtener matrices simétricas (Hughes, 1987) (Zienkiewicz & Taylor, 1994a). De

esta manera, la forma débil de las ecuaciones de movimiento (ver ecuación 3.44) aplicada al elemento (e) es

$$\int_{Y_{(e)}} \mathbf{B}_{(e)}^T \boldsymbol{\sigma} dY = \int_{\partial Y_{(e)}} \mathbf{N}^u \bar{\mathbf{t}}_{(e)} d\partial Y \quad (3.49)$$

$$\left[\int_{Y_{(e)}} \mathbf{B}_{(e)}^T \tilde{\mathbf{C}} \mathbf{B}_{(e)} dY \right] \bar{\mathbf{u}}_{(e)} = \int_{\partial Y_{(e)}} \mathbf{N}^u \bar{\mathbf{t}}_{(e)} d\partial Y$$

El primer miembro de la ecuación 3.49 representa las *fuerzas internas elementales*. El segundo miembro corresponde a las *fuerzas externas elementales*, entonces

$$\mathbf{f}_{(e)}^{int} = \int_{Y_{(e)}} \mathbf{B}_{(e)}^T \boldsymbol{\sigma} dY = \mathbf{k}_{(e)} \bar{\mathbf{u}}_{(e)} \quad \text{fuerzas internas elementales} \quad (3.50)$$

$$\mathbf{f}_{(e)}^{ext} = \int_{\partial Y_{(e)}} \mathbf{N}^u \bar{\mathbf{t}}_{(e)} d\partial Y \quad \text{fuerzas externas elementales} \quad (3.51)$$

Los valores totales de las fuerzas internas y externas resultan de la sumatoria ensamblada de las contribuciones elementales, estos es

$$\mathbf{F}^{int} = \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \mathbf{f}_{(e)}^{int} \quad (3.52)$$

$$= \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \mathbf{k}_{(e)} \bar{\mathbf{u}}_{(e)} = \mathbf{K} \bar{\mathbf{u}},$$

$$\mathbf{F}^{ext} = \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \mathbf{f}_{(e)}^{ext} \quad (3.53)$$

donde \mathbb{A} es el operador de ensamblaje estándar del Método de los Elementos Finitos (Hughes, 1987) (Simo & Hughes, 1998), $\mathbf{k}_{(e)}$ es la *matriz de rigidez elemental*, \mathbf{K} es la *matriz de rigidez global* de la estructura, en este caso de la célula. Finalmente, se debe cumplir con el equilibrio de fuerzas, es decir

$$\mathbf{F}^{int} = \mathbf{F}^{ext} \quad (3.54)$$

En el siguiente cuadro se resume las expresiones obtenidas:

<p>Ecuación global de equilibrio en la microestructura:</p> $\mathbf{F}^{int} = \mathbf{F}^{ext}$ $\mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \mathbf{f}_{(e)}^{int} = \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \mathbf{f}_{(e)}^{ext}$ <p>donde, las fuerzas internas elementales son</p> $\mathbf{f}_{(e)}^{int} = \int_{Y_{(e)}} \mathbf{B}_{(e)}^T \boldsymbol{\sigma} dY = \mathbf{k}_{(e)} \bar{\mathbf{u}}_{(e)}$ <p>y las fuerzas externas elementales es igual a</p> $\mathbf{f}_{(e)}^{ext} = \int_{\partial Y_{(e)}} \mathbf{N}^u \bar{\mathbf{t}}_{(e)} d\partial Y$ <p>donde la matriz $\mathbf{B}_{(e)}$ y las funciones de forma $\mathbf{N}_{(e)}^u$ son:</p> $\mathbf{B}_{(e)} = \frac{1}{2} ((\nabla \mathbf{N}_{(e)}^u) + (\nabla \mathbf{N}_{(e)}^u)^T) \bar{\mathbf{u}}_{(e)} \quad ; \quad \mathbf{N}_{(e)}^u = [N_{(e)}^{u_1}, \dots, N_{(e)}^{u_n}]$
--

Elementos isoparamétricos (integración numérica)

Para facilitar el cálculo de las variables, se transforma el espacio de los elementos a un espacio isoparamétrico (elementos isoparamétricos), en donde el vector de fuerzas internas dado por 3.50 es evaluado por cuadratura numérica, de acuerdo a (Hughes, 1987)

$$f_{(e)}^{int} = \sum_{l=1}^{n_{int}} B_{(e)}^T \sigma|_{y=y_{(e)}^l} w^l h_{(e)} \quad (3.55)$$

donde $y_{(e)}^l \in Y_{(e)}$ representa los puntos de integración o cuadratura, w^l corresponde a los pesos y n_{int} es el número de puntos de integración para el elemento $Y_{(e)}$. Esto quiere decir que las tensiones sólo se requieren en unos puntos discretos dentro de el elemento $Y_{(e)}$, que usualmente son los puntos de cuadratura del elemento.

3.6.7 Implementación de las restricciones de periodicidad

Como se presentó en el Estado del Arte, las restricciones de periodicidad pueden ser introducidas al problema elástico lineal mediante unas funciones periódicas χ (Duvaut, 1976) (Lene & Duvaut, 1981) (Lene & Leguillon, 1982) (Lene, 1986) (Guedes & Kikuchi, 1990). En cambio, la imposición de las condiciones de contorno al problema no lineal es un tema no tan evidente, véase por ejemplo las siguientes referencias (Swan, 1994) (Anthoine & Pegon, 1996) (Michel *et al.*, 1999), en donde se proponen diferentes métodos, controlando las deformaciones homogeneizadas ϵ^* o las tensiones σ^* . Los métodos que presenta estas tres últimas referencias están relacionados con la *teoría de promedios* y también con la propuesta de esta Monografía. Pero, existen algunas diferencias conceptuales con la *teoría de homogeneización* que aquí se propone. Por ejemplo, todos estos métodos descomponen el campo de desplazamientos en uno uniforme y otro periódico. En cambio, en el presente trabajo no se recomienda esta descomposición, más bien se ha introducido una expresión cinemática coherente con la periodicidad del medio, el cual relaciona la deformación global de la célula con el cambio de los vectores de periodicidad.

Por otra parte, muchos trabajos utilizan sólo parte del dominio de la célula, por las simetrías que en muchas ocasiones estos dominios presentan (Jansson, 1992) (Anthoine, 1995) (Anthoine & Pegon, 1996), con lo cual se disminuye sustancialmente el cálculo computacional. Esto es posible porque dentro de la células puede generarse campos periódicos o antiperiódicos, lo que hace factible que se utilice únicamente una parte. Sin embargo, este procedimiento no se va a utilizar, ya que no siempre las células tienen ejes de simetría. Pero sobre todo, mantener completa la célula permite introducir de forma natural las condiciones de periodicidad, mediante la relación existente entre aquellos nodos del contorno de la célula que corresponden a puntos periódicos (véase las ecuaciones 3.40 y 3.41). Por consiguiente, al discretizar la célula se debe tener la precaución de que los nodos generados en el contorno del dominio estén ubicados en puntos periódicos.

El problema 3.42 es un problema bien formulado de valores de contorno, cuya solución representa el equilibrio de la microestructura. Dicho equilibrio se reduce a través de los trabajos virtuales al balance de fuerzas del interior del dominio con respecto a las fuerzas que actúan en su contorno, esto es

$$F^{int}(\sigma) = F^{ext}(t)$$

3.6. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA EN LA ESCALA MICROSCÓPICA 103

lo cual puede ser determinado de forma discreta mediante el Método de los Elementos Finitos, en donde la ecuación anterior representa un sistema de ecuaciones que se puede expresar de la siguiente forma

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{F} \quad (3.56)$$

donde, \mathbf{K} es la matriz de rigidez global de la estructura, \mathbf{u} es el vector nodal de desplazamientos y \mathbf{F} el vector de fuerzas en el contorno del dominio de la célula. Este sistema de ecuaciones debe incluir las restricciones de periodicidad de desplazamientos y fuerzas en su contorno, sin embargo las peculiaridades de estas condiciones pueden crear dificultades a la hora de su implementación. En el presente caso, se busca una formulación general que permita imponer las condiciones de contorno a cualquier clase de célula.

Por ejemplo, en la Figura 3.12 se presenta en la parte izquierda la discretización de una celda hexagonal y en la parte derecha se indica el contorno de la célula dividida en tres pares de caras periódicas, las cuales se encuentran relacionadas por los vectores \mathbf{D}^1 , \mathbf{D}^2 y $\mathbf{D}^2 - \mathbf{D}^1$. Para la solución numérica del problema de la célula, en cada uno de los nodos del contorno resultantes de la discretización, se requiere introducir la condición de periodicidad de desplazamientos y fuerzas. Dichas condiciones, que son las presentadas en

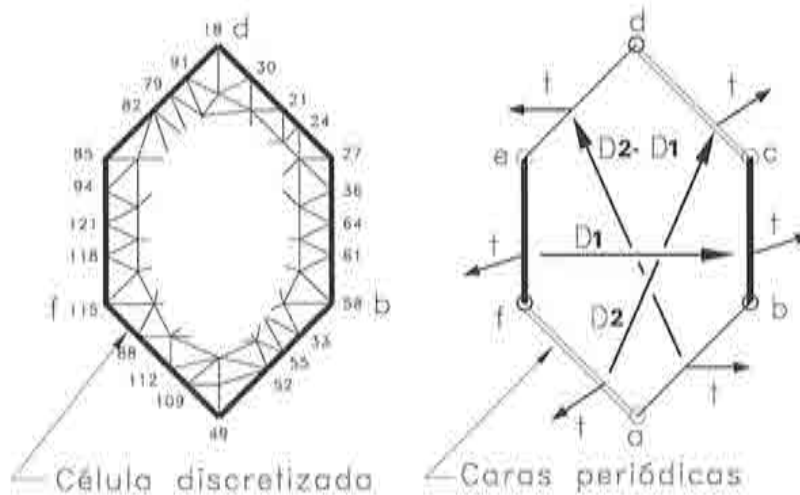


Figura 3.12: Célula hexagonal discretizada y la relación de periodicidad de sus caras.

las ecuaciones 3.40 y 3.41, pueden ser introducidas en el sistema de ecuaciones 3.56. La solución del sistema resultante se puede alcanzar a través

de: el método de penalización (o método iterativo), el método de eliminación de filas y columnas, o el método de los multiplicadores de Lagrange (λ). La conveniencia de alguno de los métodos depende del problema. Por ejemplo, los métodos iterativos son convenientes en sistemas de ecuaciones grandes; el método de eliminación de filas y columnas genera un sistema de ecuaciones más pequeño que el original, ocasionado naturalmente por la eliminación de las incógnitas restringidas, pero este proceso puede resultar bastante laborioso (Zienkiewicz & Taylor, 1994a). Finalmente, un método apropiado para poner restricciones es el método de los multiplicadores de Lagrange. Sin embargo, este último método presenta algunos inconvenientes, estos son: aumenta el número de ecuaciones y el ancho de banda de la matriz de rigidez, pero sobre todo, este método produce términos nulos en la diagonal de la matriz de rigidez que pueden crear dificultades de cálculo.

En la implementación de las condiciones de contorno presentado por Anthoine (Anthoine & Pegon, 1996) a través de los multiplicadores de Lagrange, se evita este último inconveniente (ceros en la diagonal de la matrix \mathbf{K}). Pero además, esta forma de imponer las condiciones de borde se adecúa completamente a los conceptos vertidos en esta Monografía. En este caso, los multiplicadores de Lagrange se dividen en dos vectores: λ_1 y λ_2 , que representan las fuerzas en los respectivos nodos periódicos del contorno de la célula, mientras se relaciona simultáneamente estas fuerzas con el desplazamiento relativo entre dichos nodos.

La solución estacionaria del funcional aumentado por los multiplicadores de Lagrange es:

$$\begin{aligned} \Pi = & \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{F} + \lambda_1^T \cdot (\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{u} - \Delta D) \\ & + \lambda_2^T \cdot (\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{u} - \Delta D) + \frac{1}{2} (\lambda_1 - \lambda_2)^T \cdot (\lambda_1 - \lambda_2) \end{aligned} \quad (3.57)$$

Esto lleva al siguiente sistema lineal bien condicionado

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{k}_p^T & \mathbf{k}_p^T \\ \mathbf{k}_p & \mathbf{I} & -\mathbf{I} \\ \mathbf{k}_p & -\mathbf{I} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F} \\ \Delta D \\ \Delta D \end{bmatrix} \quad (3.58)$$

en donde:

\mathbf{K} es la matrix de rigidez de la célula.

3.6. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA EN LA ESCALA MICROSCÓPICA 105

k_p es una matriz que relaciona los grados de libertad de los nodos del contorno. Cada fila de esta matriz contiene el valor -1 en la columna del grado de libertad restringido, el valor 1 en la columna del grado de libertad de su correspondiente nodo periódico y el resto de valores de la fila está constituido por ceros.

I es la matriz identidad.

u es el vector de desplazamientos.

λ_1, λ_2 son los multiplicadores de Lagrange que representan las correspondientes fuerzas del contorno de la célula ($\lambda_1 = \lambda_2$).

F es el vector de fuerzas exteriores.

ΔD es el vector de desplazamientos relativos entre nodos del contorno ($u_{p+D} - u_p$).

Este sistema de ecuaciones representado gráficamente se presenta en la Figura 3.13. Cabe observar que este método, utilizado por Anthoine (Anthoine,

$$\begin{array}{|c|} \hline \mathbf{K} \\ \hline \mathbf{k}_p \\ \hline \mathbf{k}_p \\ \hline \end{array}
 \begin{array}{|c|} \hline \mathbf{k}_p^T \\ \hline \mathbf{k}_p^T \\ \hline \end{array}
 \times
 \begin{array}{|c|} \hline \mathbf{u} \\ \hline \lambda_1 \\ \hline \lambda_2 \\ \hline \end{array}
 =
 \begin{array}{|c|} \hline \mathbf{F} \\ \hline \Delta D \\ \hline \Delta D \\ \hline \end{array}$$

Figura 3.13: Esquema gráfico del sistema de ecuaciones luego de imponer las condiciones de contorno mediante los multiplicadores de Lagrange.

1995; Anthoine & Pegon, 1996) en celdas con vectores base ortogonales, es un método general si se considera los conceptos desarrollados en este trabajo de investigación, por lo que se puede aplicar indistintamente en cualquier célula.

Por consiguiente el código de elementos finitos requiere conocer la información respectiva a las relaciones de periodicidad del contorno, es decir los vértices periódicos y los nodos que relacionan los puntos periódicos de las caras. Por ejemplo, supóngase que se tiene una célula como la presentada en la Figura 3.12, el archivo de datos que introduce la discretización de la estructura, podría contener la siguiente información adicional:

RELACION DE PERIODICIDAD

3	11	!	vértices 3, pares de nodos 11
115		!	Vértice periodico
18		!	Vértice periodico
58		!	Vértice periodico
118	61	!	Par de nodos periodicos
121	64	!	Par de nodos periodicos
94	36	!	Par de nodos periodicos
85	27	!	Par de nodos periodicos
82	52	!	Par de nodos periodicos
79	55	!	Par de nodos periodicos
91	33	!	Par de nodos periodicos
88	30	!	Par de nodos periodicos
112	21	!	Par de nodos periodicos
109	24	!	Par de nodos periodicos
49	27	!	Par de nodos periodicos

en este caso, la célula es hexagonal y tiene 6 vértices a, b, c, d, e, f , véase el lado derecho de la Figura 3.12. Pero, de acuerdo al subapartado 3.2.5, los vértices de una célula hexagonal se dividen en dos grupos de vértices periódicos, así que se debe fijar únicamente uno de estos. Es decir tres vértices periódicos, por ejemplo: f, b, d representados en la parte izquierda de la Figura 3.12 por los nodos 115, 58, 18 (si fuera una célula cuadrilátera se fija los cuatro vértices). Entonces, puesto que el código conoce las coordenadas de los nodos, fácilmente determina los vectores de periodicidad \mathbf{D} . La posición o espacio de la célula se fija a través de los vértices de periodicidad. Esto es, supóngase que se fija en su posición inicial a un vértice cualquiera, por ejemplo el 115; la posición de los nodos 58 y 18 en los diferentes incrementos de carga viene establecido por el desplazamiento relativo $\varepsilon^x \cdot \mathbf{D}$ con respecto al nodo 115. La posición del resto de nodos del contorno no se conoce, pero si se sabe que el desplazamiento relativo entre cada par de nodos periódicos (por ejemplo: el nodo 118 con el nodo 61, el 121 con el 64, etc.) especificados a través de la matriz \mathbf{k}_p , cumplen con la condición $\varepsilon^x \cdot \mathbf{D}$ impuesta dentro del vector $\Delta \mathbf{D}$. En estos nodos las fuerzas exteriores al dominio tienen

3.6. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA EN LA ESCALA MICROSCÓPICA 107

igual magnitud (desconocida) pero sentido contrario, dichas fuerzas están representadas en los multiplicadores de Lagrange λ_1 y λ_2 .

3.6.8 Solución del problema no lineal

El problema de la célula es no lineal cuando se produce en uno o más de los materiales componentes un comportamiento del tipo inelástico (plasticidad, degradación, etc.). Por consiguiente, para obtener la solución se requiere aplicar un procedimiento incremental iterativo. Considérese un tiempo cualquiera $t = t_n$, en donde se admite que el dominio se encuentra en equilibrio. En consecuencia, el campo de tensiones σ_n es tal que, para un campo de desplazamientos asociado u_n , se cumple

$$R = F^{int}(\sigma_n) - F^{ext}(t_n) = 0 \quad (3.59)$$

donde R se conoce como *residua*. Ahora, supóngase que se incrementa las solicitaciones en un instante t_{n+1} , esto define un vector de cargas de fuerzas externas F_{n+1}^{ext} . Entonces, el problema en la célula se establece de la siguiente forma:

Encontrar un Δu admisible,

donde el campo de desplazamiento actualizado es $u_{n+1} = u_n + \Delta u$, las variables internas actualizadas son $[\alpha]_{n+1}$ y un campo de tensiones σ_{n+1} (en los puntos de integración $y_{(e)}^i \in Y_{(e)}$), tal que:

$$F_{n+1}^{int} - F_{n+1}^{ext} = 0 \quad (\text{equilibrio})$$

donde el campo de tensiones σ_{n+1} es función de la ecuación constitutiva.

La solución de esta clase de problemas se consigue de forma iterativa a través del Método de los Elementos Finitos (Bathe, 1982) (Crisfield, 1991) (Zienkiewicz & Taylor, 1994a). Esto es, admítase para un instante cualquiera k , donde k es el contador de iteraciones, que el campo de desplazamientos (aproximado mediante el incremento de desplazamiento nodal) es

$$u_{n+1}^{(k)} = u_n + \Delta u^{(k)}, \quad (3.60)$$

se pueden utilizar diferentes esquemas para determinar el incremento de desplazamientos $\Delta u^{(k)}$, aquí se realiza considerando la linealización de las fuerzas internas $F^{int}(\sigma_{n+1}^{(k)})$ en torno al estado actual, definido por $u_{n+1}^{(k)}$ (Simo & Hughes, 1998). Teniendo en cuenta la linealidad del operador de ensamblaje

3.6. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA EN LA ESCALA MICROSCÓPICA 109

\mathbb{A} y mediante el uso de la regla de la cadena, se tiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{n+1}^{int(k)}}{\partial \mathbf{u}_{n+1}^{(k)}} \Delta \mathbf{u}_{n+1}^{(k+1)} &= \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \frac{\partial f_{(e)n+1}^{int(k)}}{\partial \mathbf{u}_{(e)n+1}^{(k)}} \Delta \mathbf{u}_{(e)n+1}^{(k+1)} & (3.61) \\ &= \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \int_{\gamma_{(e)}} \mathbf{B}_{(e)}^T \left[\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{(k)}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{(k)}} \right] \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{(k)}}{\partial \mathbf{u}_{(e)n+1}^{(k)}} \Delta \mathbf{u}_{(e)n+1}^{(k+1)} dy \\ &= \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \left[\int_{\gamma_{(e)}} \mathbf{B}_{(e)}^T \left[\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{(k)}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{(k)}} \right] \mathbf{B}_{(e)} dy \right] \Delta \mathbf{u}_{(e)n+1}^{(k+1)} \end{aligned}$$

e introduciendo una matriz $k_{(e)n+1}^{(k)}$, denominada *matriz de rigidez elemental*, definida como

$$k_{(e)n+1}^{(k)} = \int_{\gamma_{(e)}} \mathbf{B}_{(e)}^T \left[\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{(k)}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{(k)}} \right] \mathbf{B}_{(e)} dy \quad (3.62)$$

y realizando el ensamblaje de las matrices de rigidez elemental, se tiene

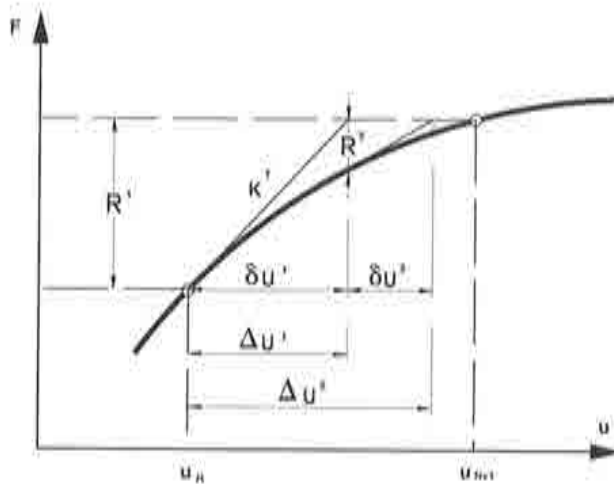


Figura 3.14: Convergencia mediante el método de Newton-Raphson.

$$\frac{\partial F_{n+1}^{int(k)}}{\partial \mathbf{u}_{n+1}^{(k)}} \Delta \mathbf{u}_{n+1}^{(k+1)} = \mathbf{K}_{n+1}^{(k)} \Delta \mathbf{u}_{n+1}^{(k+1)} \quad (3.63)$$

donde

$$\mathbf{K}_{n+1}^{(k)} = \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} k_{(e)n+1}^{(k)} \quad (3.64)$$

la matriz $\mathbf{K}_{n+1}^{(k)}$ se la conoce como *matriz de rigidez global* en el tiempo t_{n+1} de la iteración k .

De esta forma, se puede estimar $\Delta \mathbf{u}_{n+1}^{(k+1)}$ reemplazando la ecuación de equilibrio por la siguiente aproximación lineal de la expresión

$$\left[\mathbf{F}_{n+1}^{int} - \mathbf{F}_{n+1}^{ext} \right] + \frac{\partial \mathbf{F}_{n+1}^{int(k)}}{\partial \mathbf{u}_{n+1}^{(k)}} \Delta \mathbf{u}_{n+1}^{(k+1)} = 0, \quad (3.65)$$

de donde se obtiene el sistema de ecuaciones que permiten determinar el incremento de los desplazamientos

$$\Delta \mathbf{u}_{n+1}^{(k+1)} = \left[\mathbf{K}_{n+1}^{(k)} \right]^{-1} \left[\mathbf{F}_{n+1}^{int} - \mathbf{F}_{n+1}^{ext} \right] \quad (3.66)$$

utilizando esta fórmula dentro de un esquema iterativo resulta un procedimiento análogo al clásico Newton-Raphson, véase Figura 3.14.

3.7 MEDIOS QUE PRESENTAN AGUJEROS O POROS

La teoría de homogeneización formulada para materiales compuestos puede ser extendida a medios con presencia de agujeros o poros (Suquet, 1982) (Oleinik *et al.*, 1992) (Antheine, 1995) (Michel *et al.*, 1999). Pero, puesto que en la región de los agujeros no está definido los campos de tensiones ni deformaciones a nivel microscópico, las ecuaciones relacionadas al promedio de estos campos no son directamente aplicables.

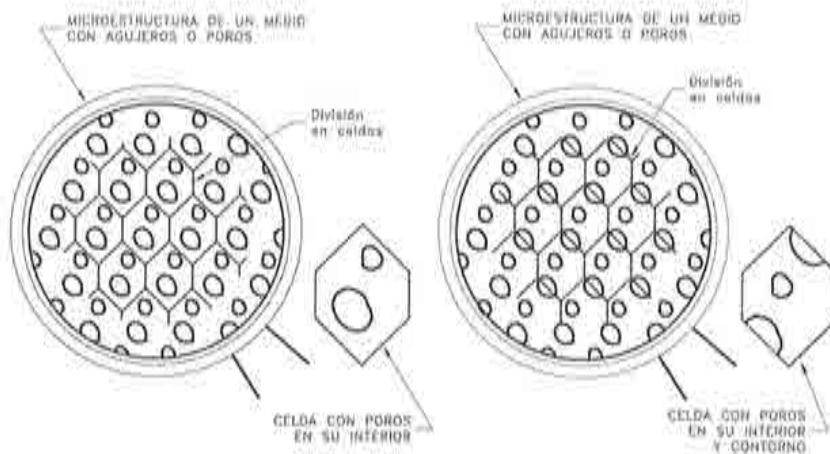


Figura 3.15: Material con poros dividido en células.

De acuerdo con Suquet (Suquet, 1982; Suquet, 1987), es posible obtener el valor promedio de deformación en el dominio de la célula, si se considera que el agujero se encuentra dentro del dominio representativo sin coincidir con su contorno, expresando además la deformación a través del desplazamiento del contorno de la célula, esto es

$$\langle \epsilon_{ij} \rangle = \frac{1}{V_Y} \int_{\partial Y} \frac{1}{2} (u_i n_j + u_j n_i) dS \quad (3.67)$$

donde V_Y es el volumen del dominio de la célula (Y) y dS es el elemento de superficie del contorno de la célula (∂Y). Si el agujero forma parte del contorno la ecuación anterior no es válida, para este caso se ha propuesto expresarla de la siguiente forma (Antheine & Pegon, 1996) (Michel *et al.*,

1999)

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle = \frac{1}{V_Y} \int_{Y^s} \varepsilon_{ij} dV + \frac{1}{V_Y} \int_{\partial Y^a} \frac{1}{2} (u_i n_j + u_j n_i) dS \quad (3.68)$$

donde, Y^s es la región del sólido y Y^a es la región del agujero ($V_Y = V_Y^s + V_Y^a$).

Sin embargo, en la formulación propuesta en esta Monografía, el hecho que exista agujeros dentro del dominio o incluso coincidiendo con el contorno de la célula, no altera la medida de deformación presentada a través de los vectores de periodicidad

$$\varepsilon_{ij}^x = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial d_k}{\partial D^i} \frac{\partial d_k}{\partial D^j} - \delta_{ij} \right] \quad (3.69)$$

por consiguiente, no se requiere realizar las modificaciones anteriores.

En el caso del tensor de tensiones homogeneizado σ^x , éste puede ser determinado de forma similar a través del promedio, integrando el campo de tensiones dentro del dominio de la célula. Obviamente en la parte del poro o agujero no hay tensiones, por lo que la integral se debe realizar únicamente sobre la parte sólida del dominio, pero su promedio debe ser obtenido considerando el dominio total (Suquet, 1982) (Anthoine, 1995) (Michel *et al.*, 1999), es decir

$$\sigma_{ij}^x = \frac{1}{V_Y} \int_{Y^s} \sigma_{ij} dV. \quad (3.70)$$

Si el compuesto se representa únicamente en dos dimensiones, como es el caso de este trabajo, el dominio de la célula Y representa una superficie S_Y , en vez de un volumen V_Y . La superficie total S_Y puede ser obtenida mediante la magnitud del producto vectorial de los vectores de periodicidad, es decir

$$\sigma_{ij}^x = \frac{1}{S_Y} \int_{Y^s} \sigma_{ij} dS = \frac{1}{|D_1 \otimes D_2|} \int_{Y^s} \sigma_{ij} dS \quad (3.71)$$

donde dS es el elemento de superficie del dominio Y .

En el siguiente cuadro se remarca las principales ecuaciones de este apartado:

TENSOR HOMOGENEIZADO DE DEFORMACIONES:

$$\varepsilon_{ij}^0 = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial d_i}{\partial D^j} \frac{\partial d_j}{\partial D^i} - \delta_{ij} \right]$$

TENSOR HOMOGENEIZADO DE TENSIONES:

$$\sigma_{ij}^0 = \frac{1}{V_Y} \int_{Y^*} \sigma_{ij} dV$$

Problemas bidimensionales:

$$\sigma_{ij}^0 = \frac{1}{|D_1 \otimes D_2|} \int_{Y^*} \sigma_{ij} dS$$

donde Y^* es la porción sólida del dominio Y .

Capítulo 4

SOLUCIÓN DEL PROBLEMA EN DOS ESCALAS

En el capítulo anterior se ha presentado algunos conceptos que resultan de la periodicidad de un medio y su división en unidades estructurales. A continuación, se ha generado, a partir de la hipótesis de periodicidad local, el concepto de deformación y tensión homogeneizada. Asimismo, se ha formulado el problema de valores de contorno en la microestructura bajo las condiciones de borde adecuadas, impuestas mediante los multiplicadores de Lagrange. En adelante, se aborda el problema de la homogeneización en las

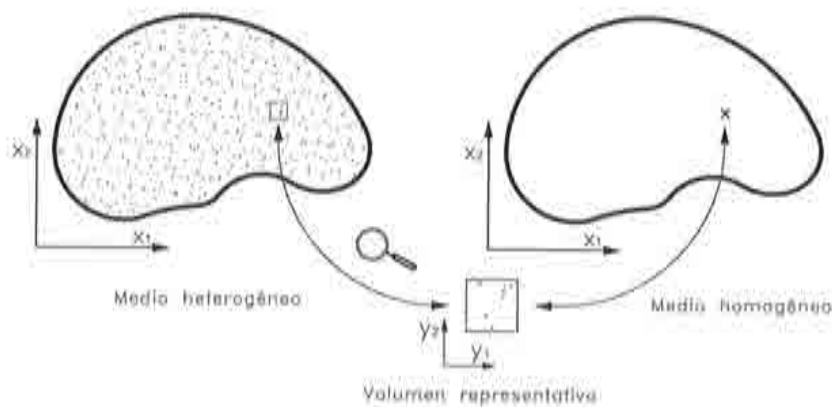


Figura 4.1: Teoría de homogeneización, utilización de dos escalas

dos escalas. Es decir, a partir del comportamiento obtenido a través de la microestructura, se busca solucionar el problema de valores de contorno en la escala macroscópica, admitiendo que el compuesto es un material homogéneo, tal como se presenta en la Figura 4.1.

4.1 IDEALIZACIÓN DEL PROBLEMA

En este apartado se busca aclarar algunos conceptos teóricos. Como se ha expuesto, la teoría de homogeneización para medios periódicos tiene una formulación rigurosa gracias a ciertas suposiciones que se cumplen únicamente en condiciones ideales, estas son:

1. El material compuesto tiene una distribución periódica de los materiales componentes, lo cual permite la división virtual en dominios iguales Y llamados células.
2. La célula que contiene la estructura interna del compuesto es muy pequeña con respecto a la estructura global ($Y \ll \Omega$).

estas dos suposiciones están contenidas en la *hipótesis de periodicidad local* (ver el apartado 3.3), la cual expresa que el campo de tensiones y deformaciones en el dominio de la célula es el mismo para las células vecinas. Este concepto permite dividir el problema en dos escalas, admitiendo que mientras las variables microscópicas forman campos fuerte fluctuantes, las correspondientes variables de estado macroscópicas cambian muy lentamente. En consecuencia, dicha hipótesis es el fundamento en la mayoría de métodos de la teoría de homogeneización, como por ejemplo: en la teoría de promedios, en la teoría que utiliza los desarrollos asintóticos, y obviamente también en la propuesta de este trabajo.

Sin embargo, en el estado del arte (véase el subapartado 2.5.3) se recoge algunos artículos que cuestionan la hipótesis de periodicidad local (Fish & Wagiman, 1993) (Fish & Markolefas, 1993) (Fish *et al.*, 1994b) (Fish *et al.*, 1994a) (Fish & Belsky, 1995a) (Fish & Belsky, 1995b) cuando existen altos gradientes a nivel macroscópicos o en presencia de efectos locales, como efectos de borde de la macro estructura, fracturas, etc. Estos trabajos en términos generales proponen: determinar la solución del problema elástico a nivel de la macroestructura mediante la teoría de homogeneización. Es decir aceptando como válida la periodicidad de los campos a nivel microscópico. A continuación, puesto que se considera que ésta no es válida donde existen altos gradientes, se introduce un término perturbador en el campo de desplazamientos, el cual no es más que el segundo término de la descomposición que propone los desarrollos asintóticos y mediante técnicas de relajación se busca convergencia a través de un procedimiento iterativo. En algunos de estos trabajos en cambio, sobreponen en estos lugares mallas finas de elementos finitos (técnicas multi-grid) donde se introduce estos términos de perturbación. Estas técnicas la combinan con algoritmos de minimización de error

de la solución para el Método de los Elementos Finitos. Cabe agregar que, toda esta formulación no solo aumentan la complejidad del problema, sino además no está claro que conduzcan a un mejor resultado.

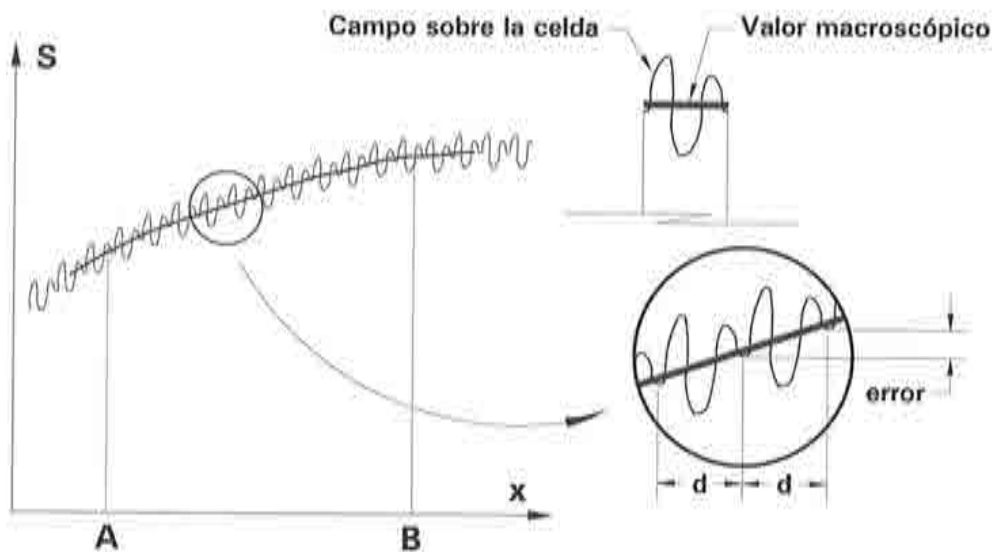


Figura 4.2: Representación simplificada de una función cuasi-periódica

Ciertamente, un gradiente de los campos macroscópicos implica una variación de los campos de una célula con respecto a las células vecinas, lo cual aparentemente contradice la hipótesis de periodicidad. Sin embargo, se debe entender que esta hipótesis es sólo una idealización del problema para aceptar un cambio lento de las variables macroscópicas. Por ejemplo, supóngase que existe un gradiente alto entre dos puntos de la macroestructura A y B , véase la Figura 4.2, tal que se produce una variación considerable en la tensión (o deformación) de dichos puntos (σ_A^x y σ_B^x) bajo el punto de vista macroscópico. Ahora bien, la teoría de homogeneización idealiza el problema puesto que considera que las dimensiones de la célula bajo la escala global tienden a cero. Por consiguiente, entre estos puntos A y B se supone una infinidad de células, tal que el cambio de tensión de una célula ubicada en el punto A a la vecina es muy pequeña y así sucesivamente hasta llegar a la célula en el punto B . El problema real difiere de la idealización, puesto que por la dimensión finita de la célula pueden existir solamente algunas células entre A y B , tal como lo presenta la Figura 4.2. Por ejemplo, en la parte derecha de la misma figura (4.2) se indica una ampliación, en donde

se aprecia una representación de la variación de los campos microscópicos. Dicha variación se encuentra indicada como *error* a lo largo de un "período" d , el cual representa la longitud de una celda. Ahora bien, admítase que la dimensión de la celda disminuye y que la amplitud o variación del campo de la función no cambia, puesto que se mantienen las mismas propiedades de los componentes de la celda. Entonces, es fácil ver que el *error* disminuye proporcionalmente con la disminución de la dimensión d y en el límite tiende a representarse como un campo periódico (véase el esquema ubicado en la parte superior de la ampliación) sobre un dominio d muy pequeño ($d \rightarrow 0$). Con lo cual nuevamente se llega a la hipótesis de periodicidad local. En el caso que se desea reproducir exactamente el campo de tensiones en la microestructura se podría introducir una corrección (*efecto de talla*) que tomaría en cuenta la variación de los campos por la dimensión finita de la célula, la cual se agregaría al campo periódico, de tal manera que se reflejaría el cambio o variación dentro de la propia célula. Empero, esta corrección no altera el valor global de las variables dentro de la célula, únicamente las ajusta para que la variación de una célula a la siguiente sea de forma continua. Se remarca, este efecto de escala surge porque no se cumple completamente con las suposiciones de la teoría de la homogeneización. Naturalmente, en el caso que la célula es relativamente muy pequeña dicho efecto no es apreciable y por ende, no se toma en cuenta en este trabajo.

Por otra parte, se ha cuestionado también el uso de la hipótesis de periodicidad en aquellas zonas que se encuentran cerca de los contornos de la macroestructura. Este tema lo abordó Sanchez-Palencia (Sanchez-Palencia, 1987) en base de los desarrollos asintóticos. Para analizar el *efecto de borde* este autor introduce un término adicional \mathbf{u}^{1c} del orden de las deformaciones microscópicas, de tal forma que el campo de desplazamientos se expresa como $\mathbf{u}^\epsilon = \mathbf{u}^0 + \epsilon \mathbf{u}^1 + \epsilon \mathbf{u}^{1c}$. Luego del análisis se indica que a nivel macroscópico el efecto de este término adicional ($\epsilon \mathbf{u}^{1c}$) no es apreciable, puesto que el gradiente de este término adicional ($\epsilon \mathbf{u}^{1c}$) se desvanece muy rápidamente, de hecho experimentos numéricos presentan que el efecto de este término es considerable únicamente en la celda que se encuentra en el borde (esto es, se amortigua prácticamente en 1 período) (Dumontet, 1986). En otras palabras, las condiciones periódicas no son las reales en la celda que se encuentra justo en el borde. No obstante, se debe aclarar que incluso en este caso es una aproximación y si bien no es la más precisa, si lo es para todas aquellas cuantiosas células que están en el interior del dominio macroscópico. Por consiguiente, si se admite que la célula tiene dimensiones muy pequeñas con respecto a la macroestructura, el error cometido por esta aproximación (condiciones de periodicidad) en el contorno del dominio macroscópico es a

nivel global despreciable.

4.2 FORMULACIÓN DEL PROBLEMA ELÁSTICO EN DOS ESCALAS

A través de la teoría de homogeneización se aborda el problema de los materiales compuestos dentro de un contexto multiescala, en el cual el compuesto se considera como un material homogéneo bajo el punto de vista macroscópico. De esta manera, es posible plantear el problema como la forma estándar en la Mecánica de Medios Continuos, utilizando como variables macroscópicas unos valores globales o efectivos de los campos microscópicos. Para ello, la teoría de promedios formulada de forma heurística considera que ciertas variables (como tensiones y deformaciones) corresponden al promedio de las respectivas variables microscópicas (Hill, 1963) (Hashin, 1970) (Mandel, 1972). La teoría de los desarrollos asintóticos indica que los valores de estas variables tienen magnitudes diferentes en cada una de las escalas (Sanchez-Palencia, 1980) (Bensoussan *et al.*, 1978) (Duvaut, 1976). Dentro de este contexto, la propuesta de este trabajo, formulada para medios periódicos, agrega que el tensor de deformación homogeneizado del compuesto corresponde a la medida de deformación del dominio de una célula, y además se presenta la deducción formal del tensor de tensiones y las ecuaciones de equilibrio en cada una de las escalas, sin recurrir al uso de los desarrollos asintóticos.

El problema elástico del material compuesto a nivel macroscópico puede solucionarse como un problema estándar de valores de contorno si se dispone de las propiedades elásticas del compuesto. Para ello, algunos métodos determinan un tensor auxiliar denominado: *tensor de influencia* (Hill, 1963), *tensor de concentración* (Mandel, 1972), *tensor de localización* (Suquet, 1982), otras formulaciones basadas en los desarrollos asintóticos utilizan las funciones periódicas (Sanchez-Palencia, 1980) (Duvaut, 1976) (Lene & Leguillon, 1982). La formulación e implementación del problema elástico en dos escalas a través de la teoría de la expansión asintótica se presenta en el siguiente trabajo (Guedes & Kikuchi, 1990). Otras formas de buscar las constantes elásticas en materiales periódicos puede encontrarse en (Meguid & Kalamkarov, 1994) (Luciano & Barbero, 1994). En la presente propuesta se formula también el problema elástico del compuesto, operando de forma similar a los métodos mencionados que desacoplan las dos escalas, pero se propone una nueva alternativa para determinar el *tensor constitutivo del compuesto* que prescinde de estos tensores auxiliares y funciones periódicas.

4.2.1 Datos geométricos y expresiones cinemáticas del problema

Se considera un problema de valores de contorno, cuyo dominio Ω está formado por un material compuesto. La estructura interna de este material es una fina estructura periódica, tal que con respecto a una escala macroscópica \mathbf{x} el material se considera homogéneo. El dominio del material está acotado por el contorno $\partial\Omega$, en donde $\partial\Omega_u$ es la parte del contorno en la que se conoce los desplazamientos (condición de Dirichlet) y $\partial\Omega_t$ es la parte del contorno en donde se conoce las fuerzas (condición de Newman) y se cumple:

$$\begin{aligned}\partial\Omega_u \cap \partial\Omega_t &= \emptyset \\ \partial\Omega_u \cup \partial\Omega_t &= \partial\Omega.\end{aligned}$$

La cinemática del problema está relacionada con un campo de desplazamientos \mathbf{u}^x en la escala macroscópica, la cual expresa el desplazamiento de cada partícula del dominio Ω . Además, se define como medida de deformación al gradiente simétrico de desplazamientos (pequeñas deformaciones), es decir

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon}^x &= \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u}^x + (\nabla \mathbf{u}^x)^T \right) \\ \varepsilon_{ij}^x &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i^x}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^x}{\partial x_i} \right).\end{aligned}\tag{4.1}$$

Por otra parte, la estructura interna del compuesto es susceptible de ser dividida en unidades estructurales muy pequeñas denominadas células, cuyo dominio es un espacio abierto y acotado Y (de volumen V_Y), tal que se puede restablecer el dominio completo del cuerpo Ω por la repetición ordenada de células (véase apartado 3.2). Las partículas de los materiales que conforma la célula se etiquetan a nivel microestructural en un espacio de referencia \mathbf{y} . Las condiciones de borde de la celda se consigue prescribiendo en todo su contorno ∂Y , que en el caso tridimensional corresponde a una superficie S_Y , el campo de desplazamientos y fuerzas a campos periódicos (ver subapartado 3.6.3), mientras simultáneamente se conecta al estado local macroscópico mediante el tensor de deformaciones homogeneizado. Es decir, el campo de desplazamientos es un campo periódico controlado de la siguiente forma

$$\mathbf{u}_{\mathbf{y}_{p+D}} - \mathbf{u}_{\mathbf{y}_p} = \boldsymbol{\varepsilon}^x \cdot \mathbf{D} \quad \text{en } \partial Y \tag{4.2}$$

donde, $\mathbf{u}_{\mathbf{y}_{p+D}}$ y $\mathbf{u}_{\mathbf{y}_p}$ corresponde a los desplazamientos de los puntos periódicos \mathbf{y}_{p+D} y \mathbf{y}_p respectivamente y \mathbf{D} es el vector de periodicidad. La periodicidad

del campo de fuerzas resulta de la condición que el vector de tracción \mathbf{t} asociado a los elementos de superficie periódicos tiene igual magnitud pero direcciones opuestas

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_{p+D} dS &= -\mathbf{t}_p dS && \text{en } \partial Y \\ \mathbf{f}_{p+D} &= -\mathbf{f}_p && \text{en } \partial Y \end{aligned} \quad (4.3)$$

donde $\mathbf{f} = \mathbf{t}(\mathbf{n}) dS$, siendo \mathbf{n} el vector unitario exterior al dominio de la célula Y y perpendicular al elemento de superficie dS .

A nivel microscópico, el campo de desplazamientos $\mathbf{u}(\mathbf{y})$ define la posición de las partículas de la célula y su promedio reproduce el valor de desplazamiento a nivel macroscópico. Se establece como medida de deformación microscópica $\boldsymbol{\varepsilon}$, al gradiente simétrico de los desplazamientos

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} &= \frac{1}{2} \left(\nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u} + (\nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u})^T \right) \\ \varepsilon_{ij} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j}{\partial y_i} \right). \end{aligned} \quad (4.4)$$

La relación cinemática que asocia las dos escalas se obtuvo en el apartado 3.4, en el cual se presenta que el tensor de deformaciones homogeneizado puede expresarse de la siguiente forma

$$\boldsymbol{\varepsilon}^x = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \mathbf{d}^T}{\partial \mathbf{D}} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial \mathbf{D}} - \mathbf{I} \right] = \frac{1}{V_Y} \int_{V_Y} \boldsymbol{\varepsilon} dV$$

donde \mathbf{D} y \mathbf{d} son los vectores de periodicidad del compuesto en la configuración de referencia y actualizada respectivamente, asociados a la coordenada \mathbf{x} .

4.2.2 Ecuaciones de gobierno

Las ecuaciones que gobiernan el problema de los materiales compuestos, dentro de cada una de las escalas, fueron obtenidas en el apartado 3.5. Aquí se exponen nuevamente, de forma resumida, con el propósito de plantear el problema elástico en dos escalas. La expresión local de equilibrio para el problema estático dentro de la macroescala es

$$\nabla \boldsymbol{\sigma}^x + \rho^x \mathbf{b}^x = 0 \quad \text{ecuación de equilibrio macroscópico} \quad (4.5)$$

4.2. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA ELÁSTICO EN DOS ESCALAS 123

donde $\nabla \sigma^x$ es la divergencia del tensor de tensiones homogeneizado y $\rho^x \mathbf{b}^x$ es el valor de las fuerzas de masa del compuesto, el cual naturalmente corresponde a un valor constante (pequeñas deformaciones), en consecuencia no depende de la escala \mathbf{x} . Este vector puede obtenerse mediante el promedio de las fuerzas de masa de los materiales constituyentes, es decir

$$\rho^x \mathbf{b}^x = \frac{1}{V_Y} \int_Y \rho \mathbf{b} \, dV \quad \text{fuerzas de masa} \quad (4.6)$$

en este caso ρ y \mathbf{b} representa la densidad y la fuerza asociada a la masa de los materiales componentes dentro del dominio de la célula y son funciones de las de coordenadas \mathbf{y} .

En el apartado 3.5 se presentó además que dentro de la escala microestructural no se requiere considerar el efecto de las fuerzas de masa. Por lo tanto, la ecuación de equilibrio micromecánico queda

$$\nabla_{\mathbf{y}} \sigma = 0 \quad \text{ecuación de equilibrio microscópico.} \quad (4.7)$$

Por otra parte, admitiendo el comportamiento elástico de los materiales componentes, para cada punto \mathbf{y} de la escala microscópica, se tiene

$$\sigma = \mathbf{C} : \varepsilon \quad (4.8)$$

donde $\mathbf{C}(\mathbf{y})$ es el tensor constitutivo elástico. Ahora bien, considerando que todos los constituyentes del compuesto son materiales elásticos y sin admitir la posibilidad de deslizamientos entre los materiales componentes, es natural la búsqueda de una ley elástica de comportamiento para el compuesto (Lene & Leguillon, 1982) (Lene, 1986) (Suquet, 1982) (Suquet, 1987) (Oleinik *et al.*, 1992), que relacione las variables globales como la clásica expresión para materiales homogéneos

$$\sigma^x = \mathbf{C}^x : \varepsilon^x \quad (4.9)$$

donde \mathbf{C}^x es el tensor formado por las constantes elásticas homogeneizadas de dicho compuesto, denominado *tensor constitutivo elástico homogeneizado*. Finalmente, se presentó además que el tensor de tensiones homogeneizado puede ser obtenido, como lo propone la teoría de promedios, mediante el promedio de fuerzas o reacciones en el contorno de la célula, o lo que es lo mismo, el promedio del campo de tensiones dentro de este dominio, esto es

$$\sigma^x = \frac{1}{V_Y} \int_Y \sigma \, dV. \quad (4.10)$$

4.2.3 Determinación del tensor constitutivo elástico homogeneizado mediante un método de perturbación

Generalmente se asocia los materiales compuestos bajo el concepto de anisotropía. Es decir, la rigidez del material depende de la dirección a la que se hace referencia. No obstante, se sabe que materiales con distribución aleatoria, como es el caso del hormigón, presentan dentro del rango elástico un comportamiento isótropo. Este comportamiento se puede justificar, en el rango elástico, al considerar que una distribución aleatoria ideal de los componentes garantiza igual distribución de heterogeneidades en todas las direcciones del material. Este indicio conduce al hecho que la rigurosa periodicidad de la microestructura genera ciertas simetrías en el tensor constitutivo elástico. Existen algunos trabajos sobre el tema (Lene & Duvaut, 1981) (Lene & Leguillon, 1982) (Lene, 1986) (Guedes & Kikuchi, 1990) en donde se presenta que el tensor constitutivo homogeneizado obtenido a partir de una celda unidad, que representa a un medio periódico, es ortótropo. Este hecho facilita notablemente el problema, puesto que el tensor constitutivo (C^x) es de cuarto orden y tiene 81 componentes, pero si el material homogeneizado (en estado elástico) es ortótropo, entonces hay que determinar únicamente 9 componentes independientes.

El método que se propone para determinar estas constantes elásticas está relacionado con el procedimiento seguido, tanto por la teoría de promedios como en la teorías de la expansión asintótica, presentados en el Estado del Arte. Se recuerda que, la ley constitutiva elástica homogeneizada establece que a partir de una deformación se determina la respuesta del material mediante el tensor constitutivo, véase ecuación 4.9. Pero también, a partir de una deformación homogeneizada ε^x se puede determinar el tensor de tensiones homogeneizado σ^x a través de la célula, véase ecuación 4.10. Entonces, se puede aplicar diferentes perturbaciones (deformaciones pequeñas) a la celda, tales que activen las diferentes constantes elásticas del compuesto. A continuación, se determina la tensión homogeneizada en la celda, para cada una de estas deformaciones. Luego es posible obtener las constantes elásticas del compuesto a través de la siguiente expresión

$$C^x = \sigma^x : (\varepsilon^x)^{-1} \quad (4.11)$$

obviamente, la ecuación anterior tiene infinitas soluciones, puesto que el tensor C^x es de cuarto orden, mientras que los tensores σ^x y ε^x son de segundo orden. Sin embargo, si se considera la condición de ortotropía y se establece un

4.2. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA ELÁSTICO EN DOS ESCALAS 125

sistema de ecuaciones con las diferentes perturbaciones (o estados de carga), el problema tiene solución única.

Por ejemplo, en problemas bidimensionales idealizados como un problema de tensión plana o deformación plana, el tensor constitutivo elástico se puede expresar de la siguiente forma

$$C^x = \begin{bmatrix} C_{xxxx} & C_{xxyy} & 0 \\ C_{yyxx} & C_{yyyy} & 0 \\ 0 & 0 & C_{xyxy} \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

supóngase que se aplica a una célula las siguientes tres deformaciones:

$$\begin{aligned} \varepsilon^x_1 &= (e_{xx}, 0, 0) \\ \varepsilon^x_2 &= (0, e_{yy}, 0) \\ \varepsilon^x_3 &= (0, 0, 2e_{xy}) \end{aligned}$$

para cada una de estas deformaciones, se determina el tensor de tensiones homogeneizado, esto es: $\sigma^x(\varepsilon^x_1)$, $\sigma^x(\varepsilon^x_2)$, $\sigma^x(\varepsilon^x_3)$. A continuación se obtienen los coeficientes del tensor constitutivo, que en este caso resulta:

$$\begin{aligned} C_{xxxx} &= \sigma^x_{xx}(\varepsilon^x_1)/e_{xx} \\ C_{xxyy} &= \sigma^x_{xx}(\varepsilon^x_2)/e_{yy} \\ C_{yyyy} &= \sigma^x_{yy}(\varepsilon^x_2)/e_{yy} \\ C_{yyxx} &= \sigma^x_{yy}(\varepsilon^x_1)/e_{xx} \\ C_{xyxy} &= \sigma^x_{xy}(\varepsilon^x_3)/2e_{xy} \end{aligned}$$

la demostración analítica de la hipótesis de simetría del tensor constitutivo del compuesto es algo no trivial. Dicha demostración ha sido presentada por diferentes autores de la teoría de la expansión asintótica, aunque éstas pueden no ser suficientemente rigurosas. No obstante, a través de esta implementación numérica o las funciones de periodicidad se cumple dicha hipótesis

$$C_{yyxx} = C_{xyxy}$$

por consiguiente, si se aplica otras deformaciones a la célula (dentro del rango elástico) y se determina el tensor de tensiones homogeneizado, dicho tensor coincide con la tensión homogeneizada predecida por el tensor constitutivo elástico homogeneizado (obtenido tal como se indica en este subapartado).

4.2.4 Formulación fuerte del problema elástico

El problema de los materiales compuestos periódicos, presentado en los subapartados 4.2.1 y 4.2.2, puede entenderse como un problema gobernado por las respectivas ecuaciones de equilibrio en cada una de las dos escalas. En este caso, el carácter elástico lineal del comportamiento de los materiales componentes permite desacoplar el problema y obtener a través de la escala microscópica los *coeficientes elásticos homogeneizados* del compuesto (subapartado 4.2.3). En el Estado del Arte se indica la formulación del problema a través de la teoría de promedios (Suquet, 1982; Suquet, 1987) y los desarrollos asintóticos (Lene, 1986) (Guedes & Kikuchi, 1990). En la formulación propuesta en esta Monografía, los conceptos principales se mantienen, pero cambia parcialmente la forma de obtener el tensor constitutivo elástico del compuesto. A nivel macroscópico el problema se plantea como un problema de valores de contorno de un medio homogéneo estándar, donde el tensor constitutivo (homogeneizado) tiene que ser previamente obtenido a partir de una célula del compuesto. La formulación se presenta en el siguiente cuadro:

PROBLEMA EN LA ESCALA MACROSCÓPICA \mathbf{x} (dominio Ω):	
$\nabla \sigma^x + \rho^x \mathbf{b}^x = 0$	<i>ecuación de equilibrio en Ω</i>
$\sigma^x = \mathbf{C}^x : \varepsilon^x$	<i>ecuación constitutiva en Ω</i>
$\mathbf{u}^x = \bar{\mathbf{u}}^x$	<i>desplazamiento en $\partial\Omega_u$</i>
$\sigma^x \cdot \mathbf{n}^x = \bar{\mathbf{t}}^x$	<i>fuerzas en $\partial\Omega_t$</i>
PROBLEMA EN LA ESCALA MICROSCÓPICA \mathbf{y} (dominio Y):	
Fuerzas de masa ($\rho^x \mathbf{b}^x$):	
$\rho^x \mathbf{b}^x = \frac{1}{V_Y} \int_Y \rho \mathbf{b} dV = \text{constante}$	
Tensor constitutivo elástico homogeneizado (\mathbf{C}^x), solucionar:	
$\nabla_y \sigma = 0$	<i>ecuación de equilibrio en Y</i>
$\sigma = \mathbf{C} : \varepsilon$	<i>ecuación constitutiva en Y</i>
$\mathbf{u}_{p+D} - \mathbf{u}_p = \varepsilon^x \cdot \mathbf{D}$	<i>desplazamientos en ∂Y</i>
$\mathbf{f}_{p+D} = -\mathbf{f}_p$	<i>fuerzas en ∂Y</i>
para las siguientes tres deformaciones (caso bidimensional):	
$\varepsilon_1^x = (\varepsilon_{xx}^x, \varepsilon_{yy}^x, 2\varepsilon_{xy}^x) = (e, 0.0, 0.0)$	
$\varepsilon_2^x = (\varepsilon_{xx}^x, \varepsilon_{yy}^x, 2\varepsilon_{xy}^x) = (0.0, e, 0.0)$	
$\varepsilon_3^x = (\varepsilon_{xx}^x, \varepsilon_{yy}^x, 2\varepsilon_{xy}^x) = (0.0, 0.0, e)$ (ejemplo: $e = 0.0001$)	
y obtener: $\sigma^x(\varepsilon_1^x)$, $\sigma^x(\varepsilon_2^x)$, $\sigma^x(\varepsilon_3^x)$ en donde $\sigma^x = \frac{1}{V_Y} \int_Y \sigma dV$	
$C_{xxxx} = \sigma_{xx}^x(\varepsilon_1^x)/e$	
$C_{yyyy} = \sigma_{yy}^x(\varepsilon_2^x)/e$	
$C_{xyxy} = \sigma_{xy}^x(\varepsilon_3^x)/e$	
$C_{xyyx} = C_{yyxx} = \sigma_{xx}^x(\varepsilon_2^x)/e = \sigma_{yy}^x(\varepsilon_1^x)/e$	

4.2. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA ELÁSTICO EN DOS ESCALAS 127

Finalmente, si se desea información acerca de los campos microscópicos, se puede obtener estos campos en cada uno de los puntos de integración de la macroestructura, o bien únicamente en los puntos de interés (Guedes & Kikuchi, 1990). Para ello, se debe solucionar el problema sobre la célula, imponiendo como condición de contorno la deformación homogeneizada obtenida en cada uno de dichos puntos.

4.2.5 Formulación débil del problema elástico

La solución exacta del problema formulado en el subapartado anterior (subapartado 4.2.4) puede ser extremadamente laborioso o en muchos casos imposible. Sin embargo, su solución se puede obtener de forma discreta a través del *Método de los Elementos Finitos*, para ello se requiere una *formulación integral* equivalente¹ que solucione el problema en cada una de las escalas. Considérese en primer lugar el problema a nivel macroscópico. Entonces, la ecuación diferencial 4.5, la cual establece el equilibrio local en la macroestructura, debe ser nula en todos los puntos del dominio Ω , pero además se debe satisfacer las condiciones de contorno impuestas. Aplicando el *método de los residuos ponderados*², se obtiene

$$\int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot (\nabla \sigma^x) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot (\rho^x \mathbf{b}^x) d\Omega + \int_{\partial\Omega} \mathbf{w} \cdot (\bar{\mathbf{t}}^x - \sigma^x \cdot \mathbf{n}) d\partial\Omega = 0$$

donde \mathbf{w} es un conjunto de funciones arbitrarias de prueba asociadas al campo de los desplazamientos, que satisface las condiciones de contorno de Dirichlet en $\partial\Omega_u$, mientras que $\bar{\mathbf{t}}^x$ representan las fuerzas (vector de tracción) impuestas en el contorno $\partial\Omega_t$. Aplicando el *teorema de Gauss* (Malvern, 1969) se obtiene la forma débil de la ecuación del equilibrio estático en la macroescala

$$-\int_{\Omega} \nabla \mathbf{w} : \sigma^x d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot (\rho^x \mathbf{b}^x) d\Omega + \int_{\partial\Omega} \mathbf{w} \cdot \bar{\mathbf{t}}^x d\partial\Omega = 0 \quad (4.13)$$

Se puede elegir como vector de ponderación \mathbf{w} un desplazamiento virtual $\mathbf{w} = \delta \mathbf{u}^x$ factible (*método de Galerkin* (Zienkiewicz & Taylor, 1994a) (Oñate, 1992)). Es decir, se escoge un campo de desplazamientos hipotético, arbitrario, no asociado a ningún sistema de cargas exteriores actuales (independientes de ellas) y además que satisface las condiciones geométricas del

¹La *formulación integral* equivalente se conoce como *formulación débil*.

²El *método de los residuos ponderados* se basa en una técnica que opera con la ecuación integral equivalente en lugar de la ecuación diferencial del problema (Zienkiewicz & Taylor, 1994a) (Oñate, 1992).

contorno en $\partial\Omega$. De esta forma, se puede escribir la forma débil de la ecuación de equilibrio en la macroescala como la expresión del Principio de los Trabajos Virtuales aplicado al compuesto

$$\int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\varepsilon}^x : \mathbf{C}^x : \boldsymbol{\varepsilon}^x \, d\Omega = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u}^x \cdot (\rho^x \mathbf{b}^x) \, d\Omega + \int_{\partial\Omega} \delta \mathbf{u}^x \cdot \bar{\mathbf{t}}^x \, d\partial\Omega \quad (4.14)$$

en donde, $\delta \boldsymbol{\varepsilon}^x$ es el campo de deformaciones virtuales obtenido a partir del campo de desplazamientos virtuales $\delta \mathbf{u}^x$ dentro de la escala \mathfrak{x} . El tensor de tensiones homogeneizado se obtiene a partir de las constantes elásticas del material $\boldsymbol{\sigma}^x = \mathbf{C}^x : \boldsymbol{\varepsilon}^x$ (ecuación 4.9) y $\rho^x \mathbf{b}^x$ representa las fuerzas asociadas a la masa que es un valor constante, véase ecuación 4.6.

Nótese que se ha desacoplado las escalas, ya que la ecuación 4.14 se describe en términos que involucran únicamente a la escala macroscópica. Sin embargo, para la solución de dicha ecuación falta determinar el tensor constitutivo elástico homogeneizado \mathbf{C}^x . Las constantes de dicho tensor puede obtenerse tal como se presentó en el subapartado 4.2.3. Esto es, admitiendo que el material compuesto es ortótropo, se establece un simple sistema de ecuaciones que resulta de la siguiente expresión

$$(\mathbf{C}^x)_{ort} = \boldsymbol{\sigma}_i^x : [\boldsymbol{\varepsilon}_i^x]^{-1}$$

donde, $\boldsymbol{\varepsilon}_i^x$ representa diferentes deformaciones que activan las distintas constantes del compuesto. Para el problema tridimensional bastan seis deformaciones adecuadas, en cambio para el problema bidimensional sólo se requieren tres.

Para cada una de estas deformaciones $\boldsymbol{\varepsilon}_i^x$ (que son valores conocidos) se debe solucionar el problema de valores de contorno en la célula. Esto se consigue mediante el planteamiento matemático presentado en el capítulo anterior, en el subapartado 3.6.5. Es decir, se debe hacer cumplir la ecuación diferencial 4.7, la cual establece el equilibrio local en cada punto \mathbf{y} de la microestructura, junto a las condiciones del contorno establecidas. Utilizando el método de residuos ponderados (véase, el subapartado 3.6.5) se llega a la siguiente expresión

$$-\int_V \nabla \mathbf{w} : \boldsymbol{\sigma} \, dV + \int_{\partial V} \mathbf{w} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, dS = 0 \quad (4.15)$$

y aplicando el Principio de los Trabajos Virtuales a nivel de la microestructura, se tiene

$$\int_V \delta \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\sigma} \, dV = \int_{\partial V} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, dS \quad (4.16)$$

4.2. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA ELÁSTICO EN DOS ESCALAS 129

donde, $\delta \epsilon$ es el campo de deformación virtual microscópico obtenido a partir del campo de desplazamientos virtuales, el cual es un campo admisible que cumple con la condición de desplazamientos en el contorno de la célula, esto es: $\mathbf{u}_{p+D} - \mathbf{u}_p = \epsilon^x \cdot \mathbf{D}$; mientras que el vector de tracción $\bar{\mathbf{t}}$ que se genera en el contorno de la célula mantiene la periodicidad del campo de fuerzas, esto es: $\mathbf{f}_{p+D} = -\mathbf{f}_p$ o lo que representa lo mismo $\mathbf{t}_{p+D} = -\mathbf{t}_p$.

Luego de haber solucionado el problema sobre la célula, se obtiene la tensión homogeneizada $\sigma^x(\epsilon^x_i)$, para cada una de las diferentes deformaciones impuestas, mediante el promedio de tensiones en la microestructura, véase la ecuación 4.10. A continuación, se determina fácilmente las constantes elásticas.

4.2.6 Solución del problema a través del Método de los Elementos Finitos

De acuerdo al subapartado 4.2.3 el tensor constitutivo elástico homogeneizado, en el problema bidimensional, es de la forma

$$\mathbf{C}^x = \begin{bmatrix} C_1 & C_2 & 0 \\ C_2 & C_3 & 0 \\ 0 & 0 & C_4 \end{bmatrix}$$

dichas constantes pueden ser determinadas mediante perturbaciones en la microestructura, tales que activen a cada una de ellas. Para un problema bidimensional, las siguientes tres deformaciones son suficientes:

$$\begin{aligned} \epsilon_1^x &= (\epsilon_{xx}^x, \epsilon_{yy}^x, 2\epsilon_{xy}^x)_1 = (e, 0.0, 0.0) \\ \epsilon_2^x &= (\epsilon_{xx}^x, \epsilon_{yy}^x, 2\epsilon_{xy}^x)_2 = (0.0, e, 0.0) \\ \epsilon_3^x &= (\epsilon_{xx}^x, \epsilon_{yy}^x, 2\epsilon_{xy}^x)_3 = (0.0, 0.0, e) \end{aligned}$$

donde e cumple la función de un parámetro que perturba el estado natural del equilibrio de la microestructura. En otras palabras, se impone tres pequeños estados de carga (por ejemplo: $e = 0.0001$). A continuación, se soluciona cada uno de los tres problemas de valores de contorno en la microestructura. Esto se consigue de la siguiente forma, supóngase que se ha discretizado la célula que representa al material compuesto, en una secuencia de elementos $Y_{(e)}$ (no sobrepuestos), los cuales están formados cada uno por un único material componente, de tal forma que

$$Y = \bigcup_{e=1}^{n_{elem}} Y_{(e)} \quad (4.17)$$

y utilizando el Método de los Elementos Finitos (véase, en el capítulo anterior, el subapartado 3.6.6) se obtiene el equilibrio en la microestructura mediante la siguiente expresión

$$\mathbb{A}_{e=1}^{n_{elem}} \left[\left(\int_{Y_{(e)}} \mathbf{B}_{(e)}^T \mathbf{C} \mathbf{B}_{(e)} dY_{(e)} \right) \tilde{\mathbf{u}}_{(e)} \right] = \mathbb{A}_{e=1}^{n_{elem}} \int_{\partial Y_{(e)}} \mathbf{N}^u \bar{\mathbf{t}}_{(e)} d\partial Y_{(e)} \quad (18)$$

$$\mathbf{K} \cdot \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{F}$$

en donde, \mathbb{A} es el operador de ensamblaje, \mathbf{N}^u son las funciones de interpolación de desplazamientos y \mathbf{B} es la matriz de derivadas de las funciones de forma (o de interpolación). En este caso, el tensor constitutivo \mathbf{C} corresponde al tensor elástico (constante).

La aplicación de las distintas perturbaciones son impuestas bajo las condiciones periódicas, para ello se puede utilizar los multiplicadores de Lagrange, tal como se presenta, en el capítulo anterior, en el subapartado 3.6.7, esto es

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{k}_p^T & \mathbf{k}_p^T \\ \mathbf{k}_p & \mathbf{I} & -\mathbf{I} \\ \mathbf{k}_p & -\mathbf{I} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{u}} \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F} \\ \Delta D \\ \Delta D \end{bmatrix}$$

la solución del sistema de ecuaciones permite determinar el campo de tensiones microscópicas en el dominio de la célula, con lo cual se obtiene el tensor de tensiones σ^x para cada una de las deformaciones aplicadas ($\sigma^x(\boldsymbol{\varepsilon}^x_1)$, $\sigma^x(\boldsymbol{\varepsilon}^x_2)$, $\sigma^x(\boldsymbol{\varepsilon}^x_3)$). Esto es, determinando el promedio de las tensión en la célula (ecuación 4.10) a través de la integración numérica

$$\sigma_{ij}^x = \frac{1}{V_Y} \int_Y \sigma_{ij} dV$$

$$\sigma_{ij}^x = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n_{elem}} \left(\sum_{i=1}^{n_{int}} w^l j_{(e)} \right)} \sum_{i=1}^{n_{elem}} \left(\sum_{i=1}^{n_{int}} \sigma_{ij}(y_{(e)}^l) w^l j_{(e)} \right) \quad (4.19)$$

donde $y_{(e)}^l \in Y_{(e)}$ representa un punto de integración, w^l es el correspondiente peso, $j_{(e)}$ es el determinante del jacobiano y n_{int} es el número de puntos de integración para el elemento $Y_{(e)}$, finalmente se determinan las constantes

$$\begin{aligned} C_1 &= \sigma_{xx}^x(\boldsymbol{\varepsilon}^x_1)/e \\ C_2 &= \sigma_{xx}^x(\boldsymbol{\varepsilon}^x_2)/e \quad \delta \quad C_2 = \sigma_{yy}^x(\boldsymbol{\varepsilon}^x_1)/e \\ C_3 &= \sigma_{yy}^x(\boldsymbol{\varepsilon}^x_2)/e \\ C_4 &= \sigma_{xy}^x(\boldsymbol{\varepsilon}^x_3)/e. \end{aligned}$$

Obtenido el *tensor constitutivo elástico homogeneizado* se aborda el problema en la macroestructura mediante la forma estándar del Método de los Elementos Finitos. Como se mencionó, una discusión detallada sobre este método puede encontrarse en (Bathe, 1982) (Hughes, 1987) (Oñate, 1992) (Zienkiewicz & Taylor, 1994a). En este caso, considérese que se discretiza el dominio macroscópico Ω en una secuencia de elementos $\Omega_{(e)}$ (no sobrepuesto), de manera que

$$\Omega = \bigcup_{e=1}^{n_{elem}} \Omega_{(e)} \quad (4.20)$$

a través de la interpolación espacial convencional para el campo de los desplazamientos se tiene

$$\mathbf{u}_{(e)}^x = \sum_{i=1}^n N_{(e)}^{u_i} \tilde{\mathbf{u}}_{(e)}^{x(i)} = \mathbf{N}_{(e)}^u \tilde{\mathbf{u}}_{(e)}^x \quad (4.21)$$

donde $\mathbf{N}_{(e)}^u = [N_{(e)}^{u_1}, \dots, N_{(e)}^{u_n}]$ son las funciones de interpolación de los desplazamientos del elemento (e) (desde $i = 1, \dots, n_{node}$ y $e = 1, \dots, n_{elem}$) y $\tilde{\mathbf{u}}_{(e)}^x$ son los desplazamientos nodales de la macroestructura.

Escribiendo la deformación elemental, en pequeñas deformaciones, en función de los desplazamientos, resulta

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}_{(e)}^x &= \frac{1}{2} \left((\nabla \mathbf{N}_{(e)}^u \tilde{\mathbf{u}}_{(e)}^x) + (\nabla \mathbf{N}_{(e)}^u \tilde{\mathbf{u}}_{(e)}^x)^T \right) \\ &= \frac{1}{2} \left((\nabla \mathbf{N}_{(e)}^u) + (\nabla \mathbf{N}_{(e)}^u)^T \right) \tilde{\mathbf{u}}_{(e)}^x \\ &= \mathbf{B}_{(e)} \tilde{\mathbf{u}}_{(e)}^x \end{aligned} \quad (4.22)$$

donde la matriz $\mathbf{B}_{(e)}$ se la conoce como *matriz de derivadas de las funciones de forma*. Aplicando el *método de los residuos ponderados*, que consiste en utilizar como funciones de peso las mismas que se utilizan para aproximar el campo de incógnitas, se obtiene matrices simétricas (Hughes, 1987) (Zienkiewicz & Taylor, 1994a). De esta manera, a través del Principio de los Trabajos Virtuales (véase ecuación 4.14), aplicado a un elemento (e) cualquiera de la macroestructura, se tiene

$$\int_{\Omega_{(e)}} \mathbf{B}_{(e)}^T \mathbf{C}^x \mathbf{B}_{(e)} \tilde{\mathbf{u}}_{(e)}^x d\Omega = \int_{\Omega_{(e)}} \mathbf{N}^u \rho^x \mathbf{b}^x d\Omega + \int_{\partial\Omega_{(e)}} \mathbf{N}^u \bar{\mathbf{t}}_{(e)}^x d\partial\Omega \quad (4.23)$$

donde, el primer miembro de la ecuación 4.23 representa las fuerzas internas elementales y el segundo miembro corresponde a las fuerzas externas aplicadas al elemento

$$\mathbf{f}_{(e)}^{int} = \left[\int_{\Omega_{(e)}} \mathbf{B}_{(e)}^T \mathbf{C}^x \mathbf{B}_{(e)} d\Omega \right] \tilde{\mathbf{u}}_{(e)}^x = \mathbf{k}_{(e)} \tilde{\mathbf{u}}_{(e)}^x \quad (4.24)$$

$$\mathbf{f}_{(e)}^{ext} = \int_{\Omega_{(e)}} \mathbf{N}^u \rho^x \mathbf{b}^x d\Omega + \int_{\partial\Omega_{(e)}} \mathbf{N}^u \tilde{\mathbf{t}}_{(e)}^x d\partial\Omega \quad (4.25)$$

Los valores totales de las fuerzas internas y externas en la macroestructura resultan del ensamble de las contribuciones elementales

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^{int} &= \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \mathbf{f}_{(e)}^{int} \\ &= \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \mathbf{k}_{(e)} \tilde{\mathbf{u}}_{(e)}^x = \mathbf{K} \tilde{\mathbf{u}}^x \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\mathbf{F}^{ext} = \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \mathbf{f}_{(e)}^{ext} \quad (4.27)$$

donde \mathbb{A} es el operador de ensamblaje estándar del Método de los Elementos Finitos (Hughes, 1987). Naturalmente, el sistema de ecuaciones debe cumplir el equilibrio

$$\mathbf{F}^{int} = \mathbf{F}^{ext} \quad (4.28)$$

Como se mencionó, para el cálculo de las variables se transforma el espacio de los elementos a un espacio isoparamétrico (Hughes, 1987) (Simo & Hughes, 1998). En este caso, el vector de fuerzas internas dado por 4.24 es evaluado por integración numérica o cuadratura, de acuerdo a

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{(e)}^{int} &= \sum_{l=1}^{n_{int}} \mathbf{B}_{(e)}^T \boldsymbol{\sigma}^x |_{x=x_{(e)}^l} w^l \hat{\mathbf{j}}_{(e)} \\ &= \sum_{l=1}^{n_{int}} \mathbf{B}_{(e)}^T \mathbf{C}^x \mathbf{B}_{(e)} \tilde{\mathbf{u}}_{(e)}^x |_{x=x_{(e)}^l} w^l \hat{\mathbf{j}}_{(e)} \end{aligned} \quad (4.29)$$

donde, el tensor constitutivo elástico homogeneizado \mathbf{C}^x se obtiene desde la microestructura (tal como se ha indicado anteriormente), $x_{(e)}^l \in \Omega_{(e)}$ representa cada uno de los puntos de integración de la macroestructura, w^l es el correspondiente peso y n_{int} es el número de puntos de integración para el elemento $\Omega_{(e)}$. En otras palabras, las tensiones sólo se requieren en unos puntos discretos $x_{(e)}^l$ dentro de un elemento $\Omega_{(e)}$.

4.2. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA ELÁSTICO EN DOS ESCALAS 133

Después de solucionar el problema de valores de contorno elástico en la escala macroscópica, se puede generar el posproceso en los puntos de interés, tal como lo propone (Lene, 1986) (Devries *et al.*, 1989) (Guedes & Kikuchi, 1990). Es decir, determinar los campos de tensiones y deformaciones a nivel microestructural de aquellos puntos de la macroestructura que se consideran relevantes. En el presente trabajo, se prefirió obtener los campos microscópicos en cada uno de los puntos de integración de los elementos de la macroestructura. Para lo cual, se aplica la deformación de cada una de estos puntos a una celda. En consecuencia, la solución del problema elástico de materiales compuesto mediante la *teoría de homogeneización* requiere de un código de elementos finitos capaz de solucionar primero un número determinado de problemas en la microestructura (3 en el caso bidimensional) con lo que se determina las constantes elásticas del compuesto, a continuación se soluciona el problema de la macroestructura. Finalmente se obtiene los campos de tensiones y deformaciones microscópicos en cada uno de los puntos de integración del dominio macroscópico o bien, simplemente en los puntos críticos de la macroestructura.

4.3 FORMULACIÓN DEL PROBLEMA NO LINEAL EN DOS ESCALAS

Dentro de un contexto más amplio, el comportamiento de los materiales componentes está caracterizado por un rango lineal y otro no lineal. Por consiguiente, es posible que en uno o más materiales componentes sobrepasen su umbral elástico por las sollicitaciones aplicadas a la estructura, generándose dentro de la microestructura fenómenos de plasticidad, degradación, deslizamiento de componentes o fractura. En cualquiera de estos casos, el material compuesto se comporta como un material no lineal, que depende de la historia local de los constituyentes. Este hecho fue presentado por Suquet (Suquet, 1982; Suquet, 1987), al introducir el comportamiento no lineal dentro de la *teoría de homogeneización*. Este autor concluye que "el comportamiento del compuesto depende de un infinito número de variables internas". Esto representa una gran dificultad por el enorme esfuerzo computacional que implica. En los trabajos de investigación desarrollados posteriormente se propone ciertas simplificaciones a partir del conocimiento de la naturaleza de los materiales componentes, véase por ejemplo (Lene, 1986) (Suquet, 1987) (Devries *et al.*, 1989). También se plantean ciertas ecuaciones constitutivas para determinados materiales compuestos (Aravas *et al.*, 1995). En cualquiera de los casos, estas propuestas son ecuaciones constitutivas aproximadas, aplicables a compuestos particulares y no pueden ser generalizadas.

Por otra parte, Jansson (Jansson, 1992) utiliza la *teoría de homogeneización* formulada a través de los métodos asintóticos y obtiene a través de una celda el comportamiento no lineal de matrices reforzadas con fibras, pero su trabajo únicamente se realiza a nivel de la escala microscópica. Trabajos recientes y en algunos casos paralelos al presente trabajo proponen métodos para solucionar de forma acoplada las dos escalas. El método propuesto por Fish y coautores (Fish *et al.*, 1997) (Fish & Shek, 1999) utiliza la *teoría de la expansión asintótica* para obtener las ecuaciones que gobiernan en cada una de las escalas. El comportamiento del compuesto se obtiene mediante una celda del material compuesto a través de la *teoría de transformación de campos* (véase Estado del Arte, subapartado 2.5.4). Una segunda propuesta la presentan Ghosh y coautores (Ghosh *et al.*, 1996) (Lee *et al.*, 1999), ésta utiliza también los desarrollos asintóticos, pero el comportamiento del compuesto se obtiene mediante el *Método de los Elementos Finitos Voronoi* (véase Estado del Arte, subapartado 2.5.5). En esta Monografía se propone una nueva alternativa, cuyos conceptos han sido presentados parcialmente en diferentes publicaciones (Zalamea *et al.*, 1998; Zalamea *et al.*, 1999a; Zala-

4.3. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA NO LINEAL EN DOS ESCALAS 135

mea *et al.*, 1999b; Zalamea *et al.*, 2000). Al final de este capítulo se presenta las principales diferencias de esta propuesta con las anteriores.

En esta propuesta se considera que, de acuerdo con la Mecánica de Medios Continuos, las magnitudes de variables como tensiones y deformaciones corresponden a las que se producen en cada uno de los materiales componentes del compuesto. No obstante, para plantear completamente el problema de los materiales compuestos, se requiere además unas magnitudes globales o efectivas que representan el comportamiento a nivel macroscópico. Ahora bien, la *teoría de homogeneización* permite descomponer el problema de los materiales compuestos en dos escalas de diferente orden de magnitud. A nivel de los materiales componentes se utiliza una escala denominada microscópica \mathbf{y} . En cambio, a nivel de la macroestructura formada por el material compuesto se utiliza una escala denominada macroscópica \mathbf{x} , en donde se opera con unos valores globales o efectivos de las variables, como si este medio heterogéneo fuera un medio homogéneo. Esta descomposición en dos escalas es una herramienta que permite solucionar el problema a través de la Mecánica de Medios Continuos. Sin embargo, no se debe perder de vista que las variables del problema siempre dependen de las dos escalas (\mathbf{x}, \mathbf{y}) y por consiguiente la solución global del problema no lineal tiene que realizarse de forma acoplada.

4.3.1 Datos geométricos y ecuaciones de gobierno

Los datos geométricos y las expresiones cinemáticas establecidos para el problema elástico del compuesto, en el subapartado 4.2.1, se mantienen válidas para el problema no lineal, razón por la cual el lector deberá referirse a dicho subapartado. Simplemente se menciona que el problema se descompone en dos escalas de diferente orden de magnitud, en el cual a nivel macroscópico se considera un cuerpo de dominio Ω (formado por el material compuesto de fina estructura periódica) que es considerado homogéneo y que se encuentra representado en un espacio de referencia macroscópico \mathbf{x} . En cambio, a nivel de la microestructura se considera un dominio Y , el cual caracteriza un dominio representativo del compuesto (periódico) denominado *célula*. Dicho dominio se encuentra representado en un espacio de referencia local o microscópico \mathbf{y} .

Por otra parte, en el subapartado 4.2.2 se presentan las ecuaciones de gobierno para el problema elástico. En este caso, las ecuaciones de equilibrio local, tanto en la escala macroscópica como microscópica, permanecen

válidas. Pero, se requiere reemplazar las leyes de comportamiento elástico de los materiales (ecuaciones 4.8 y 4.9) por leyes de comportamiento no lineal, tales que reproduzcan el comportamiento inelástico de cada uno de los materiales. A nivel de la microestructura, la ecuación 4.8 se reemplaza por la siguiente relación incremental

$$\dot{\sigma} = \tilde{C} : \dot{\epsilon} \quad (4.30)$$

en donde el tensor constitutivo \tilde{C} depende del estado del material componente. La ecuación anterior representa de forma general el comportamiento inelástico de los constituyentes. Dicho comportamiento se establece mediante las *ecuaciones constitutivas* estándar de la Mecánica de Medios Continuos (Malvern, 1969). Estas son funciones matemáticas que buscan reproducir el comportamiento fenomenológico observado en los materiales. Las ecuaciones constitutivas dependen de tres distintas clases de variables, que son: *variables libres* (usualmente: ϵ ó σ), *variables internas* ($\alpha = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n]$) junto a sus respectivas ecuaciones de evolución ($\dot{\alpha}$) y *variables dependientes* (usualmente: σ ó ϵ). La deducción de las ecuaciones constitutivas se realiza generalmente a partir de un *potencial de energía*, denominado Φ . Se han establecido diferentes ecuaciones matemáticas para representar el comportamiento fenomenológico ideal de muchos materiales homogéneos e isotrópos, así por ejemplo se dispone de ecuaciones constitutivas que reproducen el comportamiento de materiales elásticos, plásticos, viscosos, de degradación, etc. y combinaciones de éstas. En el apéndice se encuentra la formulación de las algunas de las ecuaciones constitutivas utilizadas en este trabajo. Para simplificar, en el siguiente cuadro se presenta esquemáticamente una ley de comportamiento general controlada por las deformaciones:

ECUACION CONSTITUTIVA DEL MATERIAL COMPONENTE:	
Potencial de energía del material:	$\Phi = \Phi(\epsilon, \alpha)$
Variable libre: Tensor de deformaciones	$\epsilon = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u^T}{\partial y} \right)$
Variables internas:	$\alpha = [\alpha_k] \text{ con } k = 1, \dots, n$
Variable dependiente: Tensor de tensiones	$\dot{\sigma} = \dot{\sigma}(\Phi, \dot{\epsilon}, \alpha)$

Como se mencionó, este esquema de una ecuación constitutiva es válido para los materiales componentes. A nivel macroscópico, se requiere establecer

4.3. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA NO LINEAL EN DOS ESCALAS 137

una ecuación constitutiva del compuesto también de forma incremental, esto es

$$\dot{\sigma}^x = \bar{C}^x : \dot{\epsilon}^x \quad (4.31)$$

dicha ley de comportamiento puede ser obtenida directamente mediante los conceptos presentados en el capítulo anterior, tal como se presenta en el siguiente apartado.

4.3.2 Ecuación constitutiva del compuesto

En el caso de los materiales compuestos la ecuación constitutiva depende, además del comportamiento de los materiales componentes, de la geometría de sus constituyentes. Es por ello que la deducción de una ecuación constitutiva de un medio heterogéneo es sumamente compleja. Un ejemplo interesante en donde se formula una ecuación constitutiva de manera explícita, para el comportamiento transversal de ciertas matrices reforzadas con fibras continuas en una dirección, lo presenta Aravas³ (Aravas *et al.*, 1995). Por otra parte, Suquet (Suquet, 1982; Suquet, 1987) busca formular las ecuaciones constitutivas para compuestos de comportamiento no lineal a partir de las variables microscópicas⁴. Parte de estos desarrollos se presentan en el Estado del Arte (ver apartado 2.4). En dicha formulación el investigador restringe la ecuación constitutiva de acuerdo a la naturaleza de los constituyentes. Es decir, compuestos cuyos constituyentes son elasto-plásticos, viscosos, etc. Se supone además la existencia de un *potencial macroscópico* y en función de dicho potencial se obtienen las expresiones para determinar las macrovariables. Las expresiones resultantes, dentro del rango no lineal, dependen del campo completo de las variables de estado a nivel de componentes. Obviamente, desacoplar los campos de las variables macroscópicas de las microscópicas simplificaría en gran medida el problema, ya que permitiría obtener ecuaciones matemáticas cuyas variables dependen únicamente de una escala. Pero, puesto que no es posible eliminar las variables microscópicas de la ecuación constitutiva macroscópica, se han propuesto diferentes simplificaciones. La más usual consiste en representar el campo de variables internas microscópicas mediante un valor promedio para cada uno de los componentes (Suquet, 1982) (Suquet, 1987) (Lene, 1986) (Devries *et al.*, 1989) (Fish

³En la formulación de la ecuación constitutiva, presentada por Aravas, se supone que el compuesto es transversalmente isótropo.

⁴Algunos trabajos sobre homogeneización reconocen a Suquet como el investigador que introduce esta teoría dentro del rango no lineal (Swan, 1994) (Aravas *et al.*, 1995).

et al., 1997). Sin embargo, dichas simplificaciones pueden afectar seriamente la precisión de los resultados.

El trabajo de Suquet al cual se hace referencia confronta el hecho que una ecuación constitutiva del compuesto depende de un "número infinito de variables internas" (Suquet, 1987) (o también, véase apartado 2.4). En otras palabras, para determinar las variables macroscópicas se requiere conocer el campo completo de las variables microscópicas dentro del volumen elemental representativo. Este inconveniente ha representado durante mucho tiempo una gran dificultad, puesto que implica un esfuerzo computacional muy grande, al punto que se ha considerado hasta el momento una tarea imposible de realizar. No obstante, el presente trabajo desarrolla precisamente este camino, apoyado en las capacidades actuales de los ordenadores. Para ello se propone modificar el concepto convencional de una ecuación constitutiva⁵ por una ecuación constitutiva de tipo numérica. Es decir, se parte del conocimiento de la geometría de la microestructura del compuesto y del comportamiento de los constituyentes (los cuales generalmente corresponden a materiales homogéneos e isotropos) y se busca obtener el comportamiento del compuesto mediante un algoritmo numérico. Esto es posible, mediante la reproducción de los campos de las variables de tensiones y deformaciones microestructurales, los cuales son funciones del comportamiento y forma de los materiales componentes. Por consiguiente, el campo completo de las variables internas dentro del dominio de la célula, almacenada de forma discreta en la memoria del ordenador, representan las variables internas de la ecuación constitutiva del compuesto. De esta forma, no se requiere operar directamente con las ecuaciones del comportamiento de los constituyentes, ni con su geometría, para formular una ecuación constitutiva, sino más bien, el comportamiento del compuesto resulta de la simulación de la interacción de los materiales componentes. El resultado del método es una ecuación constitutiva de carácter general.

Formulación de la *ecuación constitutiva*

La ecuación constitutiva para el compuesto se formula como un algoritmo incremental, en el cual se controla la deformación global ϵ^x del compuesto (variable libre) a través de su incremento ϵ^{2p} en un instante de tiempo Δt y se determina la respuesta del material mediante la obtención del tensor de

⁵Como ejemplo de una ecuación constitutiva, que mantiene el concepto convencional, para un material reforzado con fibras en una dirección véase (Aravas *et al.*, 1995).

4.3. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA NO LINEAL EN DOS ESCALAS 139

tensiones homogeneizado σ^x , es decir

$$\sigma^{x(t+\Delta t)} = \sigma^{x(t)} + \tilde{C}^{x(\Delta t)} : \dot{\varepsilon}^{x(\Delta t)} \quad (4.32)$$

donde, \tilde{C}^x representa el tensor constitutivo homogeneizado. La ecuación anterior puede ser expresada en términos de las variables microscópicas sobre el volumen representativo, esto es

$$\begin{aligned} \sigma^{x(t+\Delta t)} &= \frac{1}{V_Y} \int_{V_Y} \left(\sigma^{(t)}(\Phi, \varepsilon^{x(t)}, \alpha^{(t)}) + \dot{\sigma}^{(\Delta t)}(\Phi, \dot{\varepsilon}^{x(\Delta t)}, \dot{\alpha}^{(\Delta t)}) \right) dV \\ &= \frac{1}{V_Y} \int_{V_Y} \left(\sigma^{(t+\Delta t)}(\Phi, \varepsilon^{x(t+\Delta t)}, \alpha^{(t+\Delta t)}) \right) dV \end{aligned} \quad (4.33)$$

donde $\Phi(\mathbf{y})$ representa el potencial de energía y $\alpha(\mathbf{y})$ las variables internas, que dependen de su posición \mathbf{y} dentro del dominio de la célula.

La solución de esta ecuación representa la respuesta mecánica del compuesto, para lo cual se requiere establecer adecuadamente cada uno de los puntos que a continuación se detallan:

- Datos del problema:
 - Datos geométricos microestructurales (Y), estos son:
 - * Geometría del dominio de la célula Y : forma y ubicación de los materiales componentes dentro del dominio representativo.
 - * Relación de periodicidad en el contorno del dominio: Puntos periódicos, caras periódicas y vectores de periodicidad.
 - Comportamiento de los materiales componentes a través de las respectivas ecuaciones constitutivas $\sigma = \sigma(\Phi, \varepsilon, \alpha)$. De forma general, admítase que la expresión incremental representa las diferentes leyes de los materiales componentes, esto es

$$(\dot{\sigma} = \tilde{C} : \dot{\varepsilon})_i \quad i = 1, \dots, n_{\text{componentes}}$$

Las variables de la ecuación son:

- Variable libre: Admítase como variable libre del problema la deformación a nivel macroscópico ε^x .
- Variables internas: Las variables internas del problema corresponden a las variables internas $\alpha = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n]$, de las ecuaciones constitutivas de los materiales componentes, en cada punto del dominio de la célula ($\mathbf{y} \in Y$).

- Variable dependiente: Se considera como variable dependiente al tensor de tensiones homogeneizado σ^x , el cual se obtiene a través del campo de tensiones microscópicas σ , que a su vez depende de las variables establecidas en los puntos anteriores.

Finalmente, el *potencial macroscópico* Φ^x está definido implícitamente en función de la geometría de la microestructura y el potencial de energía de las ecuaciones constitutivas de los materiales componentes⁶, esto es: $\Phi^x = \Phi^x(Y, \Phi(\mathbf{y}, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\alpha}))$.

A continuación se resume en el siguiente cuadro las expresiones obtenidas:

ECUACION CONSTITUTIVA DEL COMPUESTO:	
$\dot{\sigma}^x = \tilde{C}^x : \dot{\varepsilon}^x$	
Datos geométricos:	
- Dominio de la célula Y	
- Relación de periodicidad ∂Y	
Ecuación constitutiva para cada constituyente:	
$(\sigma = \sigma(\Phi, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\alpha}))_i \quad i = 1, \dots, n_{\text{componentes}}$	
Variable libre: Tensor de deformaciones homogeneizado	
$\boldsymbol{\varepsilon}^x = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u}^x + (\nabla \mathbf{u}^x)^T)$	
Variables internas:	
$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{y}) \quad \mathbf{y} \in Y$, donde $\boldsymbol{\alpha} = [\alpha_k]$ con $k = 1, \dots, n_{\text{var-int}}$	
Variables dependientes: $(\sigma, \boldsymbol{\varepsilon}) \in Y$ es la solución del problema:	
$\nabla \sigma = 0$	<i>ecuación de equilibrio</i> Y
$\dot{\sigma} = \tilde{C} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$	<i>ecuación constitutiva en</i> Y
$\mathbf{u}_{p+D} - \mathbf{u}_p = \boldsymbol{\varepsilon}^x \cdot \mathbf{D}$	<i>period. de desplazamientos en</i> ∂Y
$\mathbf{f}_{p+D} = -\mathbf{f}_p$	<i>periodicidad de fuerzas en</i> ∂Y
Variable dependiente, tensor de tensiones homogeneizado:	
$\sigma^x = \sigma^x(Y, \Phi, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{V} \int_Y \sigma \, dY.$	

Solución incremental

Supóngase que se busca obtener el comportamiento cuasi-estático de un determinado material compuesto, en donde se conoce los “datos geométricos de la microestructura” (Y), supóngase además que el dominio se ha discretizado en elementos finitos, y se conoce las variables del problema en un tiempo t dado, es decir: los tensores homogeneizados de tensiones $\sigma^{x(t)}$ y deformaciones $\boldsymbol{\varepsilon}^{x(t)}$, y las variables internas $\boldsymbol{\alpha}^{(t)}$ en todo el dominio de la célula. En

⁶Se considera únicamente el caso de adherencia perfecta.

4.3. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA NO LINEAL EN DOS ESCALAS 141

consecuencia, puesto que el compuesto se supone en equilibrio, el residuo $R^{(t)}$ es aproximadamente igual a cero

$$R^{(t)} = |F_{int}^{(t)} - F_{ext}^{(t)}| \simeq 0$$

de acuerdo a la ecuación 4.32 el incremento de la respuesta del compuesto para el tiempo $t + \Delta t$, depende del incremento de deformación homogeneizado $\dot{\epsilon}^x(\Delta t)$

$$\dot{\sigma}^x(\Delta t) = \tilde{C}^x : \dot{\epsilon}^x(\Delta t) = \sigma^{x(t+\Delta t)} - \sigma^{x(t)} \quad (4.34)$$

y puesto que $\epsilon^{x(t+\Delta t)} = \epsilon^{x(t)} + \dot{\epsilon}^x(\Delta t)$ es un valor conocido, se puede obtener el tensor de tensiones homogeneizado $\sigma^{x(t+\Delta t)}$ solucionando el problema en el dominio de la célula:

$$\begin{aligned} \nabla_Y \sigma^{(t+\Delta t)} &= 0 && \text{micro-equilibrio en } Y \\ \dot{\sigma}^{(\Delta t)} &= \tilde{C}^{(t+\Delta t)} : \dot{\epsilon}^{(\Delta t)} && \text{ecuación constitutiva en } Y \\ \mathbf{u}_{p+D}^{(t+\Delta t)} - \mathbf{u}_p^{(t+\Delta t)} &= \epsilon^{x(t+\Delta t)} \cdot \mathbf{D} && \text{periodicidad de desplazam. en } \partial Y \\ t_{p+D}^{(t+\Delta t)} &= -t_p^{(t+\Delta t)} && \text{periodicidad de fuerzas en } \partial Y \end{aligned}$$

la imposición de las condiciones de contorno se realiza tal como se ha indicado en el apartado 3.6.7. El campo de deformación homogeneizado impuesto implica tanto una variación de las fuerzas internas $\Delta F_{int}^{\Delta t}$ como de las fuerzas externas $\Delta F_{ext}^{\Delta t}$, su solución se determina de forma numérica mediante el Método de los Elementos Finitos (subapartado 3.6.6). Naturalmente, cuando se sobrepasa el rango lineal de los componentes se requiere de una estrategia de convergencia como el Newton-Raphson, véase subapartado 3.6.8. Supóngase que k es el contador de iteraciones, la convergencia se alcanza cuando nuevamente se cumple el equilibrio de fuerzas en el dominio de la célula, es decir

$$R_{(k)}^{(t+\Delta t)} = |(F_{int})_{(k)}^{(t+\Delta t)} - (F_{ext})_{(k)}^{(t+\Delta t)}| \leq \text{Tolerancia} \quad (4.35)$$

a continuación se determina el tensor de tensiones homogeneizado σ^x , que es igual al promedio del campo de tensiones

$$\sigma^{x(t+\Delta t)} = \frac{1}{V_Y} \int_{V_Y} \sigma^{(t+\Delta t)} dV$$

si se desea, se puede comprobar que el promedio del campo de deformaciones es igual al campo de deformaciones global impuesto, es decir

$$\epsilon^{x(t+\Delta t)} = \frac{1}{V_Y} \int_{V_Y} \epsilon^{(t+\Delta t)} dV$$

Finalmente, se procede al almacenamiento del nuevo estado de las variables internas, esto es: $\alpha^{(t+\Delta t)} = [\alpha_1^{(t+\Delta t)}, \alpha_2^{(t+\Delta t)}, \dots, \alpha_n^{(t+\Delta t)}]$ de cada punto \mathbf{y} que pertenece al dominio de la célula ($\mathbf{y} \in Y$). En estas condiciones, se puede aplicar un nuevo incremento de carga (ϵ^x).

Puesto que la ley de comportamiento en la escala macroscópica es consecuencia del comportamiento y forma de los materiales componentes $\sigma^x = \sigma^x(Y, \sigma(\Phi, \epsilon^x, \alpha))$, el comportamiento global del medio heterogéneo mantiene las características fenomenológicas de los constituyentes. En otras palabras, si el comportamiento de los componentes corresponden a un material elástico entonces la ley de homogeneización también será elástica; si parte de los componentes tienen ecuaciones constitutivas con degradación y el resto con plasticidad, entonces se obtiene un comportamiento macroscópico con degradación y plasticidad acoplada, etc. Así también, el cumplimiento de las ecuaciones de la termodinámica en las ecuaciones constitutivas de los componentes asegura el cumplimiento de dicha ley en el compuesto.

Esta ecuación constitutiva, basada en el equilibrio dentro del dominio de la célula, es sumamente conveniente, puesto que generalmente se conoce la estructura formada por los constituyentes y se dispone de ecuaciones constitutivas adecuadas para representar el comportamiento de los materiales componentes. De esta forma, es posible reproducir los fenómenos de plasticidad, degradación, fractura, etc. como también analizar cambios del comportamiento del compuesto a partir de la modificación de la forma de los componentes. Incluso, se podría simular deslizamientos entre componentes a través de adecuadas interfaces de contacto, o también estudiar los efectos por temperatura y humedad. Sin embargo, estas últimas opciones no van a ser implementadas en este trabajo, ya que forman parte de las líneas futuras de investigación. En resumen, la propuesta permite además de obtener el comportamiento del compuesto, abordar el diseño a través de la modificación de las propiedades de los materiales, proporciones, distribución o cambio de forma de los componentes. En contrapartida, el ordenador requiere realizar un gran número de operaciones y almacenar toda la información necesaria acerca de las variables internas en el dominio de la célula.

4.3.3 Formulación fuerte del problema no lineal en dos escalas

Nuevamente, considérese el problema de valores de contorno de un dominio Ω que está formado por un material compuesto de fina estructura periódica. Dicho dominio está acotado por un contorno $\partial\Omega$, en donde $\partial\Omega_u$ es la parte del contorno en la que se conoce los desplazamientos (condición de Dirichlet) y $\partial\Omega_t$ es la parte del contorno en donde se conoce las fuerzas (condición de Newman). Por otra parte, la estructura interna de este material es susceptible de ser dividada en unidades estructurales muy pequeñas denominadas células. El dominio de una célula es un espacio abierto y acotado Y , tal que se puede restablecer el dominio completo del material compuesto Ω por la repetición ordenada de células. Se admite que las condiciones de borde de la celda ("in situ") se consigue prescribiendo en todo su contorno Y el campo de desplazamientos y fuerzas a campos periódicos. Admítase además, la existencia de dos escalas de diferente orden de magnitud, tales que las partículas del cuerpo Ω se etiquetan por su posición a un espacio de referencia a nivel macroscópico \mathbf{x} , mientras que la posición de las partículas de la célula se etiquetan a nivel microestructural en un espacio de referencia \mathbf{y} .

De esta forma, la *teoría de homogeneización* descompone el problema de los materiales compuestos en dos escalas, macroscópica y microscópica, en donde se considera que sus respectivas variables son continuas y cambian suavemente. En consecuencia, bajo la escala macroscópica se establece el problema estándar de valores de contorno para materiales homogéneos, en el cual se busca un campo de desplazamientos $\mathbf{u}^x(\mathbf{x})$ y tensiones $\boldsymbol{\sigma}^x(\mathbf{x})$, tal que cumpla con las siguientes ecuaciones:

Problema macroscópico

$$\begin{aligned} \nabla \boldsymbol{\sigma}^x + \rho^x \mathbf{b}^x &= 0 && \text{ecuación de equilibrio en } \Omega \quad (4.36) \\ \boldsymbol{\sigma}^x &= \frac{1}{Y} \int_Y \boldsymbol{\sigma} \, dY && \text{ecuación constitutiva en } \Omega \\ \mathbf{u}^x &= \bar{\mathbf{u}}^x && \text{desplazamientos en } \partial\Omega_u \\ \boldsymbol{\sigma}^x \cdot \mathbf{n} &= \bar{\mathbf{t}}^x && \text{fuerzas en } \partial\Omega_t \end{aligned}$$

en donde Y representa un volumen en el caso tridimensional o una superficie en el caso bidimensional. El sistema de ecuaciones 4.36 es un problema de valores de contorno asociado a las dos escalas, ya que requiere del campo de tensiones microestructurales $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$.

Simultáneamente, se establece el problema sobre la microestructura. Éste considera un dominio Y formado por los constituyentes del compuesto, el cual se repite periódicamente. Entonces, bajo la escala microscópica se requiere obtener un campo de desplazamientos $\mathbf{u}(\mathbf{y})$ y tensiones $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{y})$ que cumplan con las siguientes ecuaciones:

Problema microscópico

$$\begin{array}{ll} \nabla_{\mathbf{y}} \boldsymbol{\sigma} = 0 & \text{ecuación de equilibrio en } Y \text{ (4.37)} \\ \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \tilde{\mathbf{C}} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} & \text{ecuación constitutiva en } Y \\ \mathbf{u}_{p+D} - \mathbf{u}_p = \boldsymbol{\epsilon}^x \cdot \mathbf{D} & \text{periodicidad de desplazam. en } \partial Y \\ \mathbf{f}_{p+D} = -\mathbf{f}_p & \text{periodicidad de fuerzas en } \partial Y \end{array}$$

este problema sobre la microestructura está asociado a la escala macroscópica a través del tensor de deformaciones $\boldsymbol{\epsilon}^x(\mathbf{x})$ y tiene que ser satisfecho en cada punto de la macroestructura. Estos dos sistemas de ecuaciones 4.36 y 4.37, representan el equilibrio del problema de valores de contorno en cada una de las escalas. Su solución, tiene que realizarse de forma acoplada. Esto implica un infinito número de problemas de valores de contorno, uno en la macroescala y el resto en la microescala. De aquí la dificultad de solucionar el problema no lineal de materiales compuesto mediante la teoría de homogeneización.

4.3.4 Acoplamiento macro-micro-estructural: Conceptos

Los problemas de valores de contorno formulados por los sistemas de ecuaciones 4.36 y 4.37, representan el equilibrio de fuerzas de forma acoplada en cada una de las dos escalas. Es decir, para cada punto \mathbf{x} del problema macroestructural 4.36 se debe cumplir el problema 4.37 en la microestructura. Como se mencionó, esto implica un infinito número de problemas que deben ser resueltos. La solución exacta de estos dos problemas de valores de contorno en las dos escalas es prácticamente imposible. Sin embargo, pese a las dificultades que involucra satisfacer este planteamiento matemático, se puede abordar el problema de forma discreta, a través del acoplamiento del problema en las dos escalas mediante el Método de los Elementos Finitos, que en adelante se denomina *Método de los Elementos Finitos en Dos Escalas* (MEFDE).

4.3. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA NO LINEAL EN DOS ESCALAS 145

La idea básica de dicho acoplamiento es que las variables de estado del problema macroscópico (y por ende el comportamiento del compuesto) es evaluado únicamente en los puntos de integración de los elementos finitos del dominio (macroscópico). Dicho comportamiento se obtiene a través de la célula, que hace de puente entre las variables de estado en las dos escalas. Es decir, cada punto de integración de los elementos finitos en la escala macroscópica se traduce como un problema de valores de contorno de la microestructura. La solución se determina cuando todos los problemas sobre la microestructura y además el problema sobre la macroestructura cumplen con las ecuaciones de equilibrio. Esto se realiza gracias a la linealización del problema que permiten los métodos iterativos (como por ejemplo el *Newton-Raphson*). Naturalmente, como el problema es no lineal, es decir depende de la historia de los materiales componentes, se requiere almacenar la evolución de las variables internas del dominio completo de cada una de estas células.

Cabe indicar que, aunque la información requerida por este método es grande, la *teoría de homogeneización* compacta una gran cantidad de información acerca de la microestructura del compuesto. Esta afirmación se basa en la suposición que las dimensiones de la célula son muy pequeñas con respecto a la estructura global, por lo tanto cada elemento finito macroscópico generalmente contiene un número mucho mayor de células que el número de puntos donde se evalúan los campos microestructurales, esto es los puntos de integración de dicho elemento. La información microestructural se restablece en la macroestructura gracias a la hipótesis de periodicidad local (véase el apartado 3.3 o también (Sanchez-Palencia, 1987) (Levi, 1987)). De esta forma, se aprovecha las simetrías que presenta la geometría de la estructura interna del compuesto y la simetría local de los campos que se generan para reducir significativamente el orden del número de variables que resultaría de un análisis riguroso mediante el Método de los Elementos Finitos (esto es, discretizar componente por componente todo el dominio macroscópico).

La eficiencia de esta compactación de información es un compromiso entre la diferencia del orden de magnitud entre las escalas (a mayor diferencia del orden de magnitud de las escalas, se espera mayor eficiencia) y la calidad de la discretización en las dos estructuras (a mayor calidad de discretización, se espera un menor error de aproximación del MEF y por consiguiente mayor eficiencia). Por ejemplo, en el caso de análisis de estructuras de matrices poliméricas reforzadas con fibras, las células pueden ser muy pequeñas, del orden de algunas micras. Así, al utilizar el método de doble escala propuesto, se discretiza la macroestructura en elementos finitos, para cada punto de integración de estos elementos se soluciona una célula, ésta contiene la infor-

mación de cientos o miles de células (reales), las cuales corresponden a las que se encuentran en la vecindad del lugar en referencia en la macroestructura. Naturalmente, en los lugares con mayores gradientes se debe disminuir el tamaño de los elementos para reducir los errores numéricos. Cabe remarcar que mientras la celda es más pequeña con respecto a la macroestructura se espera una mejor aproximación a las condiciones periódicas y por lo tanto una alta precisión del método.

4.3.5 Formulación débil del problema no lineal

Como se mencionó, la solución exacta del problema multiescala (véase los sistemas de ecuaciones 4.36 y 4.37) es prácticamente imposible. Sin embargo, se puede obtener una solución aproximada mediante los métodos numéricos. En este caso, se propone un acoplamiento a través del *Método de los Elementos Finitos*. Para ello se requiere una formulación integral equivalente que solucione el problema, de forma acoplada, en cada una de las escalas. Operando de forma análoga a la formulación débil del problema elástico (subapartado 4.2.5), se aplica el método de los residuos ponderados⁷ (Zienkiewicz & Taylor, 1994a) a la ecuación diferencial 4.5 que establece el equilibrio local en la macroestructura, junto a las condiciones de contorno impuestas, se obtiene

$$\int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot (\nabla \sigma^x) d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot (\rho^x \mathbf{b}^x) d\Omega + \int_{\partial\Omega} \mathbf{w} \cdot (\mathbf{t}^x - \sigma^x \cdot \mathbf{n}) d\partial\Omega = 0$$

donde \mathbf{w} es un conjunto de funciones arbitrarias de prueba asociadas al campo de los desplazamientos, que satisface las condiciones de contorno de Dirichlet en $\partial\Omega_u$ y las fuerzas a nivel macroscópico ($\mathbf{f}^x = \mathbf{t}^x(\mathbf{n}) dS$), impuestas en el contorno $\partial\Omega_t$, se representa a través del vector de tracción \mathbf{t}^x . Aplicando el teorema de Gauss (Malvern, 1969) se obtiene la forma débil de la ecuación del equilibrio estático en la macroescala

$$-\int_{\Omega} \nabla \mathbf{w} : \sigma^x d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot (\rho^x \mathbf{b}^x) d\Omega + \int_{\partial\Omega} \mathbf{w} \cdot \mathbf{t}^x d\partial\Omega = 0 \quad (4.38)$$

se puede elegir como vector de ponderación \mathbf{w} un desplazamiento virtual $\mathbf{w} = \delta \mathbf{u}^x$ factible y luego de algunas operaciones, se escribe la forma débil de la ecuación equilibrio en la macroescala como la expresión del Principio de los Trabajos Virtuales aplicado al compuesto, donde dicho material se considera homogéneo

$$\int_{\Omega} \delta \varepsilon^x : \sigma^x d\Omega = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u}^x \cdot (\rho^x \mathbf{b}^x) d\Omega + \int_{\partial\Omega} \delta \mathbf{u}^x \cdot \mathbf{t}^x d\partial\Omega \quad (4.39)$$

⁷El método de los residuos ponderados se basa en una técnica que opera con la ecuación integral equivalente, en vez de la ecuación diferencial del problema.

4.3. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA NO LINEAL EN DOS ESCALAS 147

naturalmente, $\delta \varepsilon^x$ es el campo de deformaciones virtuales obtenido a partir del campo de desplazamientos virtuales $\delta \mathbf{u}^x$ dentro de la escala \mathbf{x} ; $\rho^x \mathbf{b}^x$ representa las fuerzas asociadas a la masa (véase ecuación 4.6), que es un valor constante y $\boldsymbol{\sigma}^x$ es el tensor de tensiones homogeneizado obtenido a partir de las tensiones microscópicas (véase ecuación 4.10). Entonces

$$\int_{\Omega} \delta \varepsilon^x : \left(\frac{1}{Y} \int_Y \boldsymbol{\sigma} dY \right) d\Omega = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u}^x \cdot (\rho^x \mathbf{b}^x) d\Omega + \int_{\partial\Omega} \delta \mathbf{u}^x \cdot \bar{\mathbf{t}}^x d\partial\Omega \quad (4.40)$$

En este caso, el tensor $\boldsymbol{\sigma}^x(\mathbf{x})$ corresponde al valor global efectivo del campo microscópico $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$. Para determinar el campo de tensiones que se genera a nivel de la microestructura se requiere establecer y solucionar el problema en la célula (véase el problema 4.37). Visto de otra manera, esto es precisamente la ecuación constitutiva del compuesto desarrollada en el subapartado 4.3.2. Entonces, la ecuación diferencial 4.7 que establece el equilibrio local en cada punto de la microestructura, debe ser satisfecha en el dominio unidad bajo las condiciones del contorno periódicas. Aplicando el método de residuos ponderados (tal como se presentó en el apartado 3.6.5), se tiene

$$- \int_Y \nabla \mathbf{w} : \boldsymbol{\sigma} dY + \int_{\partial Y} \mathbf{w} \cdot \bar{\mathbf{t}} d\partial Y = 0 \quad (4.41)$$

Aplicando el Principio de los Trabajos Virtuales a nivel de la microestructura (véase apartado 3.6.5), se tiene

$$\int_Y \delta \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\sigma} dY = \int_{\partial Y} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} d\partial Y \quad (4.42)$$

donde, $\delta \boldsymbol{\varepsilon}$ es un campo virtual de la deformación microscópica obtenido a partir del campo virtual de los desplazamientos microscópicos, el cual es un campo admisible que cumple con la condición de desplazamientos en el contorno de la célula, esto es $\mathbf{u}_{p+D} - \mathbf{u}_p = \boldsymbol{\varepsilon}^x \cdot \mathbf{D}$, y $\bar{\mathbf{t}}$ corresponde al vector de tracción que se aplica al contorno de la célula, este debe mantener la periodicidad del campo de fuerzas, es decir $\mathbf{t}_{p+D} = -\mathbf{t}_p$.

Se remarca, para solucionar la ecuación 4.40 se requiere determinar en cada punto de la macroestructura el tensor de tensiones $\boldsymbol{\sigma}^x$, el cual se definió a través del campo microscópico de tensiones $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{y})$. Se puede obtener los campos microscópicos mediante la solución de la ecuación 4.42, que representa el equilibrio dentro de la célula a través del Principio de los Trabajos Virtuales. Esto es resolver infinitas veces el problema de valores de contorno 4.42 (uno por cada punto \mathbf{x}_i de la macroestructura). Sin embargo, puesto que el

problema a nivel de la macroestructura (véase la ecuación 4.40) se aborda de forma discreta, se requiere acoplar un número finito de problemas de la escala microscópica. Por otra parte, por la dificultad y coste numérico que este proceso implica, algunos autores como Fish y coautores (Fish *et al.*, 1997) afirman “no es posible obtener de forma precisa los campos a nivel microscópico, o al menos no con fines prácticos, por el enorme esfuerzo computacional que se requiere”, por ello proponen un método aproximado con el propósito de reducir el coste del problema. No obstante, en el presente trabajo de investigación no se comparte dicha opinión.

4.4 MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS EN DOS ESCALAS (MEFDE)

El problema de valores de contorno de un cuerpo formado por un material compuesto se divide, a través de la *teoría de homogeneización*, en dos problemas en distintas escalas. De la aplicación del Método de los Elementos Finitos para solucionar este problema de forma acoplada resulta lo que se denomina el Método de los Elementos Finitos en Dos Escalas (*MEFDE*).

Considérese que los materiales componentes tienen comportamiento no lineal⁸. En consecuencia, las tensiones obtenidas a partir del tensor elástico homogeneizado C^w puede no ser válida y por consiguiente tiene que ser verificada o corregida a partir de la ecuación constitutiva desarrollada para el compuesto (véase el subapartado 4.3.2). Esto conduce a determinar, para cada uno de los puntos de integración de la macroestructura, el equilibrio en el dominio de la célula. De aquí resultan dos problemas que tienen que ser abordados. El primero tiene relación con el planteamiento del problema a través del Método de los Elementos Finitos y en especial, la estrategia que se utiliza a nivel macroestructural para conseguir la convergencia del problema. El segundo se refiere a la implementación de este método, sobretodo a la forma de solucionar estos cuantiosos problemas a nivel microestructural. En este apartado se trata el primero de estos problemas, en el siguiente apartado se presenta la implementación del método.

4.4.1 Solución incremental a través del Método de los Elementos Finitos

Considérese un tiempo cualquiera $t = t_n$, en donde se supone que el dominio global se encuentran muy cerca o prácticamente en equilibrio. Entonces, a nivel macroscópico se tiene

$$\begin{aligned} R_n &= F^{int}(\sigma_n^x) - F^{ext}(t_n^x) \simeq 0 \\ &= K_n \cdot u_n^x - F_n \simeq 0 \end{aligned} \quad (4.43)$$

para un campo de tensiones homogeneizadas σ_n^x y un campo de desplazamientos u_n^x asociado. Ahora, supóngase además que se incrementa las sollicitaciones en un instante t_{n+1} , lo cual implica que el vector de carga de las

⁸También es posible considerar que puede generarse un deslizamiento entre materiales componentes.

fuerzas externas se modifica, es decir $\mathbf{F}_{n+1} = \mathbf{F}_n + \Delta\mathbf{F}_n$. Por consiguiente, el problema que se requiere resolver es el siguiente:

Encontrar un $\Delta\mathbf{u}_n^x$ admisible, donde el campo de desplazamientos actualizado es $\mathbf{u}_{n+1}^x = \mathbf{u}_n^x + \Delta\mathbf{u}_n^x$ y un campo de tensiones $\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^x$ (en los puntos de integración $\mathbf{x}_{(e)}^l \in \Omega_{(e)}$), tal que

$$\mathbf{F}^{int}(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^x) - \mathbf{F}^{ext}(\mathbf{t}_{n+1}^x) \simeq 0 \quad (\text{equilibrio}) ; \quad \text{en donde} \quad \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^x = \frac{1}{V_Y} \int_Y \boldsymbol{\sigma} \, dV,$$

Este campo de tensiones microscópico $\boldsymbol{\sigma}$ se obtiene determinando en la celda un $\Delta\tilde{\mathbf{u}}_n$ admisible, donde el campo de desplazamiento actualizado es $\tilde{\mathbf{u}}_{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}_n + \Delta\tilde{\mathbf{u}}_n$, las variables internas actualizadas son $[\boldsymbol{\alpha}]_{n+1}$, y un campo de tensiones $\boldsymbol{\sigma}_{n+1}$ (en los puntos de integración $\mathbf{y}_{(e)}^l \in Y_{(e)}$), tal que

$$\mathbf{F}^{int}(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}) - \mathbf{F}^{ext}(\mathbf{t}_{n+1}) \simeq 0 ; \quad \text{en donde} \quad \boldsymbol{\sigma}_{n+1} \text{ es función de las ecuaciones constitutivas.}$$

La solución de este problema acoplado en dos escalas puede ser resuelto a través del Método de los Elementos Finitos formulado en cada una de las escalas. Como se indicó anteriormente, una explicación detallada del Método de los Elementos Finitos puede encontrarse en (Zienkiewicz & Taylor, 1994a) (Oñate, 1992). Para tratar el problema en doble escala se requiere, en primer lugar, determinar el *tensor constitutivo elástico homogeneizado*. A continuación, resolver el problema elástico sobre la macroestructura, tal como se presentó en el subapartado 4.2.6. Posteriormente se requiere verificar y corregir las tensiones obtenidas en cada uno de los puntos de integración de la macroestructura. Esto se consigue a través de la *ecuación constitutiva del compuesto* presentada en el subapartado 4.3.2.

La no linealidad del problema se puede abordar mediante un procedimiento incremental gracias a la linealización que permiten los métodos iterativos. Esto es, para un instante cualquiera k , en donde k es el contador de iteraciones, el campo de desplazamientos (aproximado mediante el incremento de desplazamiento nodal) a nivel microscópico es

$$\mathbf{u}_{n+1}^{x(k)} = \mathbf{u}_n^{x(k)} + \Delta\mathbf{u}_n^{x(k)} \quad (4.44)$$

y considerando la linealización de las fuerzas internas $\mathbf{F}^{int}(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{x(k)})$ en torno al estado actual, definido por $\mathbf{u}_{n+1}^{x(k)}$ (Hughes, 1987) (Simo & Hughes, 1998).

Es decir, teniendo en cuenta la linealidad del operador de ensamblaje \mathbb{A} (utilizando la regla de la cadena), se tiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{F}^{int}(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{x(k)})}{\partial \mathbf{u}_{n+1}^{x(k)}} \Delta \mathbf{u}_{n+1}^{x(k+1)} &= \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \frac{\partial \mathbf{f}_{(e)}^{int}(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{x(k)})}{\partial \mathbf{u}_{(e)n+1}^{x(k)}} \Delta \mathbf{u}_{(e)n+1}^{x(k+1)} \quad (4.45) \\ &= \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \int_{\Omega_{(e)}} \mathbf{B}_{(e)}^T \left[\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{x(k)}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{x(k)}} \right] \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{x(k)}}{\partial \mathbf{u}_{(e)n+1}^{x(k)}} \Delta \mathbf{u}_{(e)n+1}^{x(k+1)} dx \\ &= \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \left[\int_{\Omega_{(e)}} \mathbf{B}_{(e)}^T \left[\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{x(k)}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{x(k)}} \right] \mathbf{B}_{(e)} dx \right] \Delta \mathbf{u}_{(e)n+1}^{x(k+1)} \end{aligned}$$

e introduciendo una matriz $\mathbf{k}_{(e)n+1}^{(k)}$, denominada *matriz de rigidez tangente elemental*, definida como

$$\mathbf{k}_{(e)n+1}^{(k)} = \int_{\Omega_{(e)}} \mathbf{B}_{(e)}^T \left[\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{x(k)}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{x(k)}} \right] \mathbf{B}_{(e)} dx \quad (4.46)$$

y realizando el ensamblaje de las matrices de rigidez elemental, se tiene

$$\frac{\partial \mathbf{F}^{int}(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{x(k)})}{\partial \mathbf{u}_{n+1}^{x(k)}} \Delta \mathbf{u}_{n+1}^{x(k+1)} = \mathbf{K}_{n+1}^{(k)} \Delta \mathbf{u}_{n+1}^{x(k+1)} \quad (4.47)$$

donde

$$\mathbf{K}_{n+1}^{(k)} = \mathbb{A}_{e=1}^{nelem} \mathbf{k}_{(e)n+1}^{(k)} \quad (4.48)$$

la matriz $\mathbf{K}_{n+1}^{(k)}$ se la conoce como *matriz de rigidez global* para el instante del tiempo t_{n+1} en la iteración k . Para estimar $\Delta \mathbf{u}_{n+1}^{x(k+1)}$ se reemplaza la ecuación de equilibrio por la siguiente aproximación lineal

$$\left[\mathbf{F}^{int}(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^x) - \mathbf{F}^{ext}(t_{n+1}^x) \right] + \frac{\partial \mathbf{F}^{int}(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{x(k)})}{\partial \mathbf{u}_{n+1}^{x(k)}} \Delta \mathbf{u}_{n+1}^{x(k+1)} = 0 \quad (4.49)$$

de esta forma se obtiene el sistema de ecuaciones que permiten determinar el incremento de los desplazamientos a nivel macroscópico

$$\Delta \mathbf{u}_{n+1}^{x(k+1)} = [\mathbf{K}_{n+1}^{(k)}]^{-1} [\mathbf{F}^{int}(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^x) - \mathbf{F}^{ext}(t_{n+1}^x)] \quad (4.50)$$

utilizando esta fórmula dentro de un esquema iterativo resulta un procedimiento equivalente al clásico *Newton-Raphson*. No obstante, para evaluar la

matriz tangente elemental se requiere el tensor constitutivo homogeneizado (véase ecuación 4.46). En este caso, éste depende de la estructura interna del compuesto y no es fácil su evaluación explícita,

$$\bar{\mathbf{C}}_{n+1}^{x(k)} = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{x(k)}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{x(k)}} = \frac{\partial \left(\frac{1}{V_Y} \int_Y \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{(k)} dV \right)}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{x(k)}} \quad (4.51)$$

puesto que el tensor $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ depende del estado de los materiales componentes y la geometría de la microestructura.

Una de las alternativas consideradas fue determinar este tensor mediante un procedimiento similar al empleado para la determinación del tensor constitutivo elástico. Esto es, mediante la aplicación de pequeñas perturbaciones a la celda, junto a la suposición de simetría del tensor constitutivo. De esta manera, se podría obtener en cada punto de integración un tensor constitutivo tangente, sin embargo dicho procedimiento es extremadamente laborioso, ya que implica solucionar varias células por cada uno de los puntos de integración de la macroestructura (en cada una de las iteraciones). Por otra parte, también se puede solucionar el problema de forma incremental utilizando únicamente el tensor elástico inicial homogeneizado \mathbf{C}^x en lugar del tensor constitutivo tangente homogeneizado $\bar{\mathbf{C}}^x$, tal como lo presenta la Figura 4.3 (*método de Newton modificado* (Zienkiewicz & Taylor, 1994b)). Pero esto conduce a un exceso de iteraciones a nivel de la macroescala y puesto que por cada una de estas iteraciones se requiere solucionar nuevamente cada uno de los problemas sobre la microescala el costo de la solución es muy elevado.

Bajo estas consideraciones se optó por un camino alternativo, cuyo resultado es bastante satisfactorio. La estrategia utilizada se fundamenta en el *método incremental secante de quasi-Newton* (Zienkiewicz & Taylor, 1994b), ver la Figura 4.4. Supóngase que el incremento de desplazamientos $\Delta \mathbf{u}_n$ está formado por las contribuciones $\delta \mathbf{u}_n$ de cada iteración

$$\Delta \mathbf{u}_n^{x(k)} = \sum_{i=1}^{i=k} \delta \mathbf{u}_n^{x(i)} \quad (4.52)$$

una vez realizada la primera iteración (véase la ecuación 4.50)

$$\delta \mathbf{u}_n^1 = -[\mathbf{K}_T^1]^{-1} \mathbf{R}_{n+1}^1 \quad (4.53)$$

donde \mathbf{K}_T^1 es la matriz de rigidez tangente (aunque también se puede utilizar la matriz de rigidez secante \mathbf{K}_s del incremento anterior e incluso la matriz

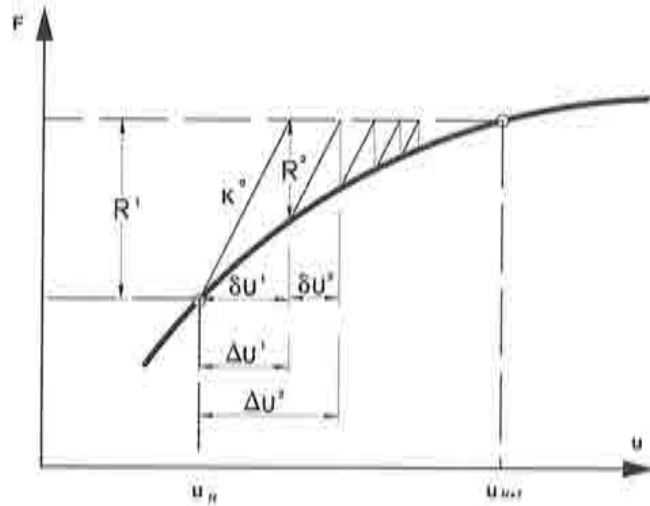


Figura 4.3: Convergencia mediante el *método de Newton modificado* que utiliza la matriz de rigidez inicial.

inicial \mathbf{K}^0), se puede encontrar una *matriz de rigidez secante*

$$\delta \mathbf{u}_n^1 = -[\mathbf{K}_s^2]^{-1}(\mathbf{R}_{n+1}^1 - \mathbf{R}_{n+1}^2) \quad (4.54)$$

esta *matriz de rigidez secante* se puede utilizar para calcular la siguiente contribución del desplazamiento, tal como lo indica la Figura 4.4

$$\delta \mathbf{u}_n^2 = -[\mathbf{K}_s^2]^{-1} \mathbf{R}_{n+1}^2 \quad (4.55)$$

entonces, de forma general se puede escribir para $k > 1$ la ecuación anterior, ahora sin subíndices,

$$\delta \mathbf{u}^k = -[\mathbf{K}_s^k]^{-1} \mathbf{R}^k \quad (4.56)$$

donde $-\mathbf{K}_s^k$ se determina de tal forma que

$$\delta \mathbf{u}_n^{k-1} = -[\mathbf{K}_s^k]^{-1}(\mathbf{R}^{k-1} - \mathbf{R}^k) \quad (4.57)$$

en la referencia (Zienkiewicz & Taylor, 1994b) se expresa que "para un sistema en donde \mathbf{K}_s^k es un escalar su determinación es trivial, pero en sistemas con más de un grado de libertad su determinación es más difícil y de hecho no es única. Muchas formas diferentes de la matriz \mathbf{K}_s^k pueden satisfacer la relación 4.57, y como era de esperar muchas alternativas se pueden utilizar en la práctica". En la literatura sobre el tema existen varias propuestas, la más

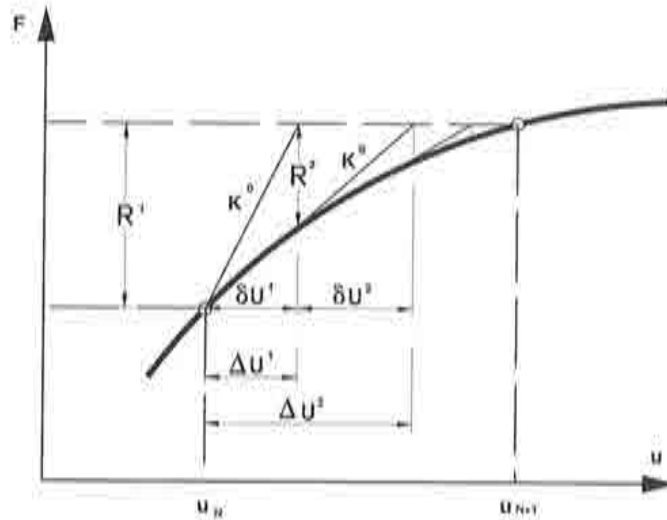


Figura 4.4: Convergencia a través del método incremental secante de cuasi-Newton.

popular de ellas se la conoce como *BFGS* (en honor a Broyden, Fletcher, Goldfarb y Shanno) (Dennis & More, 1977). No obstante, bajo esta misma estrategia (cuasi-Newton) se ha preferido realizar dos nuevas propuestas alternativas, las cuales se presentan en los siguientes subapartados (4.4.2 y 4.4.3).

Se remarca, la obtención del tensor constitutivo homogeneizado para cada punto de integración es extremadamente laborioso y su utilidad es muy restringida ya que en la siguiente iteración se requiere un nuevo cómputo. Esto condujo a buscar un tensor constitutivo secante (o aproximado) para el compuesto (cuya obtención debe ser relativamente rápida), tal que

$$\mathbf{C}_{(s)n+1}^{x(k)} \approx \tilde{\mathbf{C}}_{n+1}^{x(k)} = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{x(k)}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{x(k)}} \quad (4.58)$$

De esta forma, se opera con dicho tensor en la ecuación 4.46 y al ensamblar la matriz de rigidez global \mathbf{K} de la macroestructura (ecuación 4.48), se espera obtener una matriz secante $\mathbf{K}_{(s)}$ que origine una convergencia casi tan rápida como el método de Newton-Raphson.

Este proceso se realiza de la siguiente manera: Una vez obtenida la matriz de rigidez global se soluciona el sistema de ecuaciones a nivel macroscópico,

4.4. MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS EN DOS ESCALAS (MEFDE) 155

obteniéndose como resultado una nueva aproximación del campo de desplazamientos \mathbf{u}^r . Se puede entonces calcular la deformación homogeneizada $\boldsymbol{\varepsilon}^h$ en cada punto de integración de la macroestructura. A continuación, se determina la tensión admisible en cada uno de estos puntos mediante la ecuación constitutiva del compuesto a través de la célula, tal como se presentó en el subapartado 4.3.2. Con dichos valores se corrigen las tensiones y se procede a verificar la condición de convergencia a nivel macroscópico. Si dicha condición no se satisface, se repite el proceso adicionando en la malla de los elementos finitos las fuerzas residuales \mathbf{R} .

4.4.2 Determinación del tensor secante a través de un método analítico

Este método se basa en considerar el problema únicamente bajo el punto de vista macroscópico. En donde la ley constitutiva del compuestos es

$$\dot{\sigma}_{ij}^x = \tilde{C}_{ijkl}^x \dot{\epsilon}_{kl}^x$$

dicha ley se puede descomponer de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{ij}^{x(k)} &= (C_{ijkl}^x + \Delta C_{ijkl}^{(k)}) \dot{\epsilon}_{kl}^{x(k)} \\ \dot{\sigma}_{ij}^{x(k)} &= C_{ijkl}^x \dot{\epsilon}_{kl}^{x(k)} + \Delta C_{ijkl}^{(k)} \dot{\epsilon}_{kl}^{x(k)} \end{aligned} \quad (4.59)$$

siendo C^x el tensor constitutivo correspondiente a un material elástico. En consecuencia, el término $C^x \cdot \dot{\epsilon}^{x(k)}$ del lado derecho de la ecuación representa la tensión bajo comportamiento elástico del material $\dot{\sigma}^{x(k)}$. En cambio, el segundo término representa un retorno al campo de tensiones admisibles. Esto hace posible aprovechar los valores anteriores (de la iteración k) para mejorar la aproximación en la iteración actual, puesto que en cada punto de integración de la macro estructura se puede obtener una corrección $\Delta C(x)$ a través del incremento del tensor de deformación no convergido $\dot{\epsilon}^{x(k)}$ y del incremento del tensor de tensiones correspondiente $\dot{\sigma}^{x(k)}$ otorgado por la solución del dominio de la célula

$$\dot{\sigma}_{ij}^{x(k)} - \dot{\sigma}_{ij}^{x(k)} = \Delta C_{ijkl}^{(k)} \dot{\epsilon}_{kl}^{x(k)} \quad (4.60)$$

y despejando $\Delta C^{(k)}$ se obtiene

$$\begin{aligned} \Delta C_{ijkl}^{(k)} &= (\dot{\sigma}_{ij}^{x(k)} - \dot{\sigma}_{ij}^{x(k)}) (\dot{\epsilon}_{kl}^{x(k)})^{-1} \\ \Delta C_{ijkl}^{(k)} &= \Delta \dot{\sigma}_{ij}^{x(k)} (\dot{\epsilon}_{kl}^{x(k)})^{-1} \end{aligned} \quad (4.61)$$

ahora bien, la ecuación anterior tiene infinitas soluciones. No obstante, al ser el tensor $\Delta C^{(k)}$ únicamente una medida de la transformación del tensor constitutivo, se puede imponer algunas restricciones adicionales convenientes para disminuir el grado de indeterminación y obtener una solución única. Por ejemplo, se puede suponer que la corrección ΔC_{ijkl} es simétrica e incluso considerar que muchos de los términos son nulos, con lo cual fácilmente se obtiene una solución. Esto es posible, porque muchas formas diferentes de esta corrección del tensor constitutivo pueden ser utilizados en la práctica. El problema radica en encontrar las restricciones apropiadas. Este método que se propone tiene la ventaja de realizarse de forma directa y relativamente simple.

4.4.3 Determinación del tensor secante a través de una red neuronal

Como se ha mencionado, el tensor constitutivo homogeneizado \bar{C}^x depende del estado del compuesto, así dentro del rango lineal del material dicho tensor corresponde al tensor constitutivo elástico inicial C^0 y cuando se produce alguna clase de deformación inelástica (plasticidad, degradación, desplazamiento entre componentes, etc) dentro del dominio de la célula, ésta no linealidad del material se puede representar como una transformación del tensor constitutivo macroscópico

$$\bar{\sigma}_{ij}^x = \alpha_{ijpq} C_{pqkl}^0 \bar{\epsilon}_{kl}^x \quad (4.62)$$

donde, el tensor α es un tensor de transformación. Obviamente en el caso elástico lineal dicho tensor corresponde al tensor identidad, por el contrario si el comportamiento es no lineal el tensor debe ser determinado. Sin embargo, existe infinito número de posibles tensores de transformación, ya que el orden de éste y del tensor constitutivo es mayor que el orden del tensor de tensiones y el de deformaciones.

La función de la red neuronal es obtener un tensor de transformación α conveniente, tal que modifique adecuadamente al tensor constitutivo inicial, determinando un tensor constitutivo secante, esto es

$$C_{(s)}^x = \alpha : C^0 \quad (4.63)$$

de esta manera, al realizar esta operación en cada iteración para cada uno de los puntos de integración del dominio macroscópico, se espera dentro del algoritmo iterativo de cuasi-Newton acelerar sustancialmente el proceso de convergencia. Ahora bien, la red neuronal puede utilizar los valores de tensiones y deformaciones de las iteraciones anteriores como indicadores del cambio que ha sufrido el tensor inicial elástico y apartir de un algoritmo de aprendizaje, que minimiza el error obtenido, obtiene un tensor de transformación α . Dicho algoritmo de aprendizaje es un proceso iterativo de corrección a través del estímulo y respuesta (dicho proceso tiene que ser relativamente rápido).

Estructura de la red neuronal

Existe una gran variedad de redes neuronales artificiales, cada una de las cuales son creadas con fines muy diversos, estos modelos de redes dependen de algunos factores como: tipo de neurona, topología de la red y algoritmo de aprendizaje. Para revisar la teoría de las redes neuronales artificiales

el lector deberá referirse a textos especializados sobre el tema, por ejemplo (Martín del Brío, 1997). Sin embargo aquí se exponen rápidamente algunos de los conceptos básicos. Quizá, una de las mejores maneras de clasificar los diferentes tipos de redes neuronales es a través del tipo de aprendizaje, es decir: el aprendizaje supervisado, el no supervisado, el híbrido y el reforzado. Ahora bien, es necesario estudiar cuidadosamente si alguno de estos algoritmos se adecúa al problema. En este caso, se encontró que una red neuronal relativamente simple denominada *red neuronal lineal adaptativa de múltiples capas* (*multi layer adaptive linear neuron*) que corresponde a las redes de aprendizaje supervisadas, bajo condiciones especiales puede ser utilizada para acelerar la convergencia del problema macroscópico.

Una red está formada por pequeñas unidades de proceso conocidas como *neuronas* (ver Figura 4.5), las cuales están conectadas con otras neuronas a través de lo que se conoce como *sinapsis*, que no es más que establecer un valor (o peso) para cada conexión. De esta manera, el estímulo que recibe la neurona se expresa $e_i = \sum_j p_{ij}e_j - \theta_i$; donde, e_i es el estímulo de entrada en la neurona, p_{ij} corresponde a los pesos o valores de la sinapsis, e_j corresponde a los valores enviados por las neuronas precedentes y θ se denomina *umbral* (o *valor de activación*, en este caso $\theta = 0$). Dicho estímulo se procesa mediante una *función de activación* $F(e)$, cuya respuesta se transmite a través de la sinapsis a otras neuronas.

La arquitectura o topología del sistema artificial neuronal se genera por la conexión de las neuronas. Estas conexiones sinápticas son direccionales, es decir la información se propaga en un solo sentido. Las neuronas se agrupan formando *capas* de acuerdo a sus conexiones sinápticas. Se distinguen tres tipos de capas: de entrada, de salida y ocultas. La capa de entrada está formada por todas aquellas neuronas que reciben los datos (también denominados estímulos (e)) procedentes del exterior, la capa de salida es aquella cuyas neuronas proporcionan la respuesta de la red y las capas ocultas son todas aquellas grupos de neuronas que se encuentran entre la capa de entrada y la de salida. Cuando las conexiones entre neuronas se realiza entre las diferentes capas y únicamente en la dirección de entrada de la red hacia la salida dichas redes se llaman *unidireccionales*, por el contrario si además existen conexiones en dirección opuesta a la red (conexiones de realimentación) se denominan *redes recurrentes*, éstas además puede contener conexiones laterales entre neuronas de la misma capa e incluso conexiones de una neurona consigo misma.

La red utilizada en el presente trabajo es una red unidireccional con una

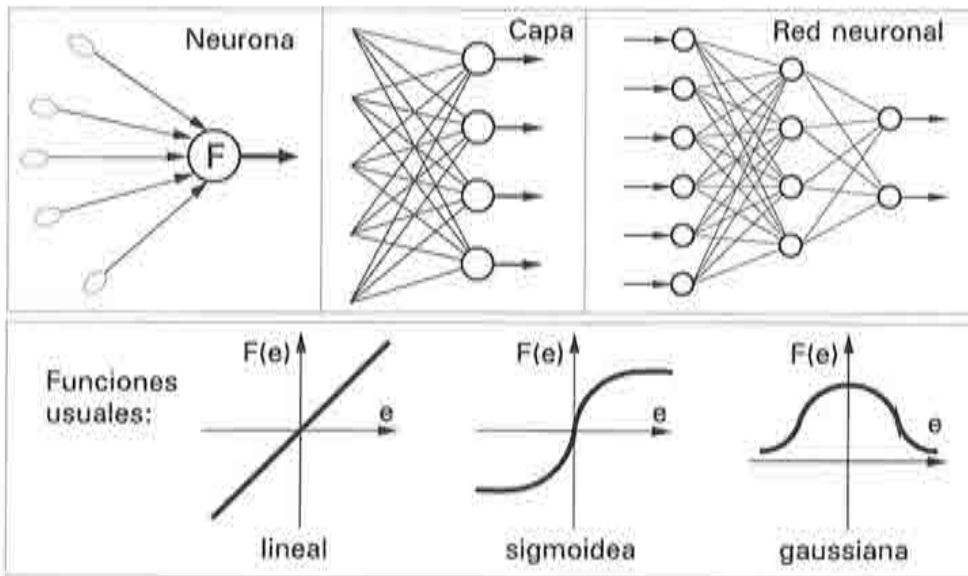


Figura 4.5: Partes que conforman una red neuronal y algunas de las principales funciones de activación.

capa de entrada, una oculta y otra de salida, cada una de las capas consta de tres neuronas, tal como se presenta en la Figura 4.6. Las conexiones entre la capa de entrada y la capa oculta forma una matriz de pesos p^1 , las conexiones entre la capa oculta y la capa de salida forma otra matriz de pesos p^2 . En todas las neuronas se utiliza únicamente la función de activación identidad ($F(e) = e$). El entrenamiento de la red se realiza a través del algoritmo conocido como *retropropagación del error* ("Back propagation"). Obsérvese, que en el caso de utilizar en la capa oculta una función de activación *sigmoidea*⁹ la red corresponde al clásico *perceptrón de varias capas* ("multi-layer perceptron"), reconocido como un aproximador universal de funciones (Funahashi, 1989) (Hornik *et al.*, 1989).

Formulación y funcionamiento

Usualmente una red neuronal supervisada es entrenada mediante un patrón de estímulo y respuesta, de tal forma que se corrige paulatinamente los valores de los pesos sinápticos hasta que genera las respuestas adecuadas, en ese momento finaliza el entrenamiento y la red se utiliza para las predicciones

⁹La función sigmoidea más habitual es $F(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ con $F(x) \in [0, 1]$.

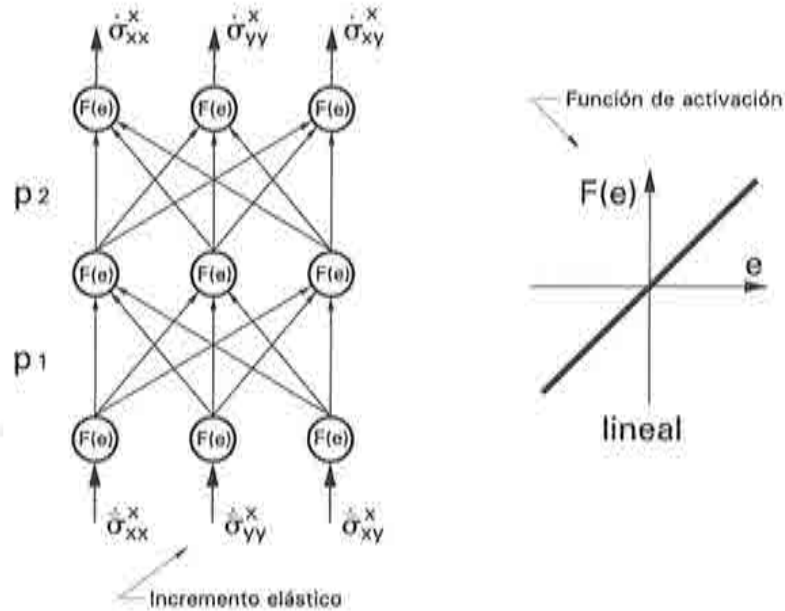


Figura 4.6: Estructura de la red neuronal utilizada.

posteriores. En esta aplicación se altera en parte este concepto. Es decir, la red neuronal se entrena bajo un patrón estímulo-respuesta para determinar un tensor secante local correspondiente a un sólo punto \mathbf{x} de la macroestructura, de tal forma que el proceso tiene que ser repetido para cada uno de los puntos de integración del macrodominio. Cabe considerar que la rapidez del entrenamiento depende principalmente del tamaño de la red neuronal, por lo tanto se requiere utilizar una red pequeña.

Considérese el problema bidimensional de tensión o deformación plana y para fines computacionales el tensor de tensiones se representa por un vector y el tensor constitutivo por una matriz. Considérese además que esta red neuronal artificial se concibe para predecir el incremento de tensión homogeneizada admisible $\dot{\sigma}^x$ en la célula¹⁰ a partir del incremento de tensión elástica $\dot{\sigma}^e(\xi^e)$

$$\dot{\sigma}^x = \alpha \cdot \dot{\sigma}^e. \quad (4.64)$$

Ahora bien, en la capa de entrada y en la capa de salida la activación de las neuronas es igual al estímulo recibido (función de activación identidad). Entonces, la respuesta de la red obtenida en la capa de salida es igual a la

¹⁰Se utiliza indistintamente célula o punto de integración en la escala macroscópica

sumatoria de los respectivos pesos sinápticos por la correspondiente salida de las neuronas de la capa oculta, se tiene

$$\dot{\sigma}_k^x = \sum_j p_{kj}^2 F(e)_j \quad (4.65)$$

y como en la capa oculta se utiliza también una función identidad, se puede reemplazar el valor de salida $F(e)_j$ por la entrada o estímulo que recibe

$$\dot{\sigma}_k^x = \sum_j p_{kj}^2 \left(\sum_i p_{ji}^1 \dot{\sigma}_i^x \right) \quad (4.66)$$

entonces, se ve claramente que la red neuronal es simplemente una transformación lineal, cuya información queda registrada integralmente en los pesos p^2 y p^1 . Escribiendo bajo notación indicial, se tiene

$$\dot{\sigma}_k^x = p_{kj}^2 p_{ji}^1 \dot{\sigma}_i^x \quad (4.67)$$

con lo cual se obtiene la transformación de los espacios de tensiones que corresponde a un determinado punto de integración de la estructura macroscópica en un incremento dado. El tensor secante se determina de la siguiente forma¹¹

$$C_{(s)}^x = p^1 \cdot p^2 \cdot C^x \quad (4.68)$$

El sistema neuronal artificial durante el proceso de entrenamiento ajusta las matrices de pesos p^1 y p^2 . Esta actividad la realiza mediante un algoritmo de entrenamiento de la red. Las matrices p^1 y p^2 son inicializadas cada una como la matriz identidad I , lo cual asegura que si la célula se encuentra en estado elástico no hay error en la salida y por ende no se modifican dichas matrices. El ajuste de las matrices de peso se realiza mediante un proceso iterativo, hasta que el error producido en la salida, que corresponde a la diferencia entre el valor deseado $\dot{\sigma}_j^x$ y el obtenido de la red $\dot{\sigma}_j^x$ sea menor que una cierta tolerancia. El algoritmo de entrenamiento es el clásico "back propagation" (Rumelhart & McClelland, 1986) (Hecht-Nielsen, 1990) en donde el ajuste de los pesos se determina a través de la minimización de la función del error $\mathcal{E}(p)$.

Para este entrenamiento se requiere de un patrón de datos, el cual es un conjunto formado biunívocamente por valores de entrada (o estímulo) junto a

¹¹En este caso, se considera que tanto las matrices de pesos (p^1 , p^2) como los tensores constitutivos (C^x , $C_{(s)}^x$) son matrices.

sus correspondientes valores de salida (o respuesta). Este patrón de datos se formó de la siguiente manera, se utiliza como entrada el incremento de tensión elástico ($\dot{\sigma}^x(\dot{\varepsilon}^x)$) de las iteraciones anteriores no convergidas y como patrón de salida el incremento de tensión correspondiente ($\dot{\sigma}^x$) determinado por la célula. Naturalmente, si existen varias iteraciones anteriores la respuesta de la red neuronal es un promedio; estos valores de las iteraciones anteriores cumplen la función de la memoria. Se optó por duplicar los valores de la última iteración, para que esta última tenga mayor peso, más los valores de 2 iteraciones anteriores, si las hay. De tal manera que, el patrón completo consta como máximo de cuatro estímulos con sus respectivas respuestas, y como mínimo de dos en la primera iteración. En la tercera iteración la red satura la memoria, en adelante se aumenta los resultados de la última iteración y elimina los primeros, de esta forma la memoria recuerda solamente las últimas iteraciones.

Entrenamiento

El algoritmo de entrenamiento supervisado opera de la siguiente manera: supóngase que se dispone de un patrón de entrenamiento, cuyos términos tiene una relación biunívoca entre n estímulos ($\dot{\sigma}^x$) y n respuestas ($\dot{\sigma}^x$). Durante el proceso de entrenamiento se aplica cada uno de los estímulos a la red, por lo que se obtiene en la salida de la red n respuestas ($\dot{\sigma}^x$). Entonces, si se define una función como el error cuadrático medio correspondiente a la salida actual de la red neuronal respecto a la deseada, se tiene

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(p^1, p^2) &= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{l=n} \left(\dot{\sigma}_i^{x(l)} - \dot{\sigma}_i^{x(l)} \right)^2 ; \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.69) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{l=n} \left(\dot{\sigma}_i^{x(l)} - p_{ij}^2 p_{jk}^1 \dot{\sigma}_k^{x(l)} \right)^2 ; \quad (i, k) = 1, 2, 3 \end{aligned}$$

donde el subíndice i corresponde a la neuronas de salida, el subíndice k corresponde a la neuronas de entrada y la sumatoria se realiza para todos los valores del patrón de entrenamiento ($n = 2, 3, \text{ ó } 4$). La minimización de la función se realiza mediante el gradiente, de la siguiente forma

$$p(t+1) = p(t) - \delta \nabla \mathcal{E}(p) \quad (4.70)$$

donde δ es un valor positivo menor a 1.0 que define la velocidad de entrenamiento. Un valor muy pequeño produce un entrenamiento lento, en cambio un valor relativamente grande ocasionaría que la red no converga. En la aplicación se utiliza un controlador automático de δ , el cual fija al inicio el

valor de $\delta = 0.02/n$, siendo n el número de estímulos o respuestas que tiene el patrón de entrenamiento. El valor δ se modifica en cada uno de los entrenamientos posteriores, aumentando o disminuyendo ligeramente de acuerdo a la comparación del error en el entrenamiento actual ($t + 1$) y el entrenamiento anterior (t). Puesto que hay un gradiente respecto de los pesos de la capa de salida y otro respecto de los pesos de la capa oculta, la corrección en cada una de las matrices de pesos para un entrenamiento $t + 1$ es

$$p_{ij}^2(t+1) = p_{ij}^2(t) - \delta \sum_{l=1}^{l=n} \left([(\dot{\sigma}_i^{x(t)} - \dot{\sigma}_i^{x(t)})] [p_{jk}^1 \dot{\sigma}_k^{x(t)}] \right) \quad (4.71)$$

$$p_{jk}^1(t+1) = p_{jk}^1(t) - \delta \sum_{l=1}^{l=n} \left([(\dot{\sigma}_i^{x(t)} - \dot{\sigma}_i^{x(t)}) p_{ij}^2] [\dot{\sigma}_k^{x(t)}] \right) \quad (4.72)$$

obsérvese que en cada una de las ecuaciones anteriores existen dos grupos de términos encerrados en corchetes, el primero representa el error producido en la salida de la capa de las neuronas y el segundo corresponde a los valores de entrada a la respectiva capa. Dicho proceso se repite hasta que el error sea menor a una tolerancia específica, ello no es siempre posible porque los datos de entrenamiento originados de las distintas iteraciones pueden corresponder a diferentes transformaciones lineales, en este caso la solución de la red se aproxima a un promedio, y sale del proceso al sobrepasar un número máximo de entrenamientos.

La actualización anterior conduce a obtener una matriz secante no simétrica, por este motivo se realizó una pequeña modificación que mejoró el resultado. En vez de modificar las matrices de pesos p^2 y p^1 mediante las matrices Δp^2 y Δp^1 , se utilizó una única matriz de corrección Δp simétrica, determinada de la siguiente manera

$$\Delta p_{ij} = 0.25 * (\Delta p_{ij}^2 + \Delta p_{ji}^2 + \Delta p_{ij}^1 + \Delta p_{ji}^1) \quad (4.73)$$

de tal forma que, las matrices de los pesos sinápticos son iguales y simétricas

$$p^2 = p^1 \quad (4.74)$$

de esta forma, la matriz de transformación $\alpha = p^2 \cdot p^1$ es también simétrica.

Cabe remarcar que, las redes neuronales están afectadas por lo que se denomina *fenómeno de dimensionalidad*, este fenómeno expresa que el tiempo necesario para entrenar una red depende de la dimensión de la misma. En el presente caso se trata de una red pequeña (tres capas, con tres neuronas

cada una) y con un reducido patrón de entrenamiento, por este motivo su entrenamiento es prácticamente inmediato. Por otra parte, una red neuronal artificial luego de ser entrenada se utiliza repetidas veces aplicando diferentes estímulos y obteniendo respuestas, pero en este caso no es así. Se entrena una red únicamente para obtener a través de los pesos una aproximación al tensor constitutivo secante del compuesto para un determinado punto de integración y en una determinada iteración. Para otro punto del compuesto el proceso se repite.

4.5. IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA

4.5 IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA: GENERACIÓN, ACOPLAMIENTO Y PARALELIZACIÓN DEL CÓDIGO

El método propuesto para la solución en doble escala del problema de materiales compuestos requiere de la solución acoplada de varios problemas de valores de contorno (mediante el Método de los Elementos Finitos), donde uno de ellos corresponde al problema de la macroestructura y los demás corresponden a las (numerosas) células. La solución conjunta de estos problemas implica una gran cantidad de cálculos computacionales y manejo de cuantiosa información, por consiguiente su implementación tiene que ser realizada de forma apropiada. A continuación se indica el procedimiento seguido en este trabajo, el cual consigue realizar de manera óptima cada una de las actividades, dando como resultado una potente herramienta para solucionar esta clase de problemas.

4.5.1 Generación del código

La generación del código, para implementar el método propuesto de la *teoría de homogeneización*, es sin duda una de las actividades más laboriosas de este trabajo de investigación. El programa resultante es capaz de solucionar cuantiosos problemas de elementos finitos a la vez. En este subapartado se exponen las principales ideas. En este caso se partió de un código de elementos finitos existente no optimizado, denominado *PLCD2*. Puesto que el problema de homogeneización alberga el problema en dos escalas y para facilitar las operaciones de manejo de información y paralelización, se encontró conveniente duplicar dicho código. De tal forma que, una parte del código se denomina en adelante *Programa Global*, el cual es el encargado de solucionar la macroestructura. Otra parte del código, que se le denomina *Programa Local*, es el que soluciona cada una de las células. Sin embargo, para facilitar la operaciones de mantenimiento del código (actualizaciones, etc), a nivel de subrutinas el código se encuentra dividido en tres bloques, el primero contiene todas las subrutinas exclusivas del Programa Global, el segundo contiene las subrutinas exclusivas del Programa Local y el tercer bloque contiene todas aquellas subrutinas que son comunes para los dos programas.

En el Programa Local se implementó el método de los multiplicadores de Lagrange para imponer las condiciones de contorno periódicas en las células,

véase subapartado 3.6.7. Dentro de este contexto, una de las principales tareas es la realización de subrutinas para ensamblaje y solución del sistema de ecuaciones en donde se incluyen las condiciones de periodicidad. Por otra parte, ya que este programa es quien determina el comportamiento del compuesto en cada punto de integración de la macroestructura y dicho comportamiento lo determina a través de la solución de tantas células como puntos de integración tiene esta macroestructura, se requiere construir una base de datos especial capaz de almacenar por separado la información resultante de cada una de las células. Naturalmente, se debe tener en cuenta que existe información común para todas ellas que no requiere ser duplicada, como lo es por ejemplo la geometría (deformaciones infinitesimales). Para operar con la información adecuada de cada una de las células se aumentó en muchas variables que utiliza el código una nueva dimensión que hace referencia al número de célula (*icelu*). Este aumento de dimensión en las variables implica una revisión y modificación exhaustiva de cada una de las subrutinas del código de elementos finitos del Programa Local. Todas las subrutinas modificadas se encuentran contenidas dentro del bloque con el código exclusivo de dicho Programa Local. De esta forma el programa trabaja secuencialmente con cada una de las células. Es decir, para una determinada célula el Programa Local extrae de la base de datos la información correspondiente a dicha célula, aplica las condiciones de contorno a las que se encuentra sometida, obtiene el equilibrio de fuerzas y finalmente actualiza las variables de este dominio, a continuación opera de igual manera con la siguiente célula. Puesto que este código tiene la capacidad de solucionar varias células es además el encargado de obtener el *tensor constitutivo elástico homogeneizado*. Por otro lado, el código del Programa Global se caracteriza por carecer del conjunto de subrutinas que conforman las ecuaciones constitutivas de los materiales, sin embargo dispone de otras subrutinas le permiten suministrar información del Programa Local, así como también recibir información del mismo.

Estas dos partes del código que aparentan ser dos programas independientes de elementos finitos, trabajan en secuencia y cada uno de ellos cumplen funciones específicas. El Programa Global que soluciona la macroestructura, desconoce las propiedades y el comportamiento del material. Sin embargo, obtiene dicha información a través del conjunto de subrutinas que se ha denominado Programa Local, e inversamente este último programa conoce únicamente la microestructura y opera sobre ella a través de la información que le suministra el Programa Global. Esta división del código en dos programas, permite manejar satisfactoriamente el problema en cada una de las escalas. De esta manera, es posible considerar las diferencias que existe en cada uno de los dos problemas (el macroscópico y el microscópico), desde la

4.5. IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA

lectura de los archivos de datos, hasta la impresión de los resultados para el posproceso.

4.5.2 Algoritmo y Secuencia de actividades

El algoritmo que describe el Método de Elementos Finitos en Dos Escalas (propuesto) se esquematiza en la Figura 4.7. Además se presenta de forma esquemática la secuencia de actividades que realiza dicho algoritmo:

1. Empieza el proceso el Programa Global, realiza tareas de inicialización, lee la información acerca de la macroestructura que contiene además la dirección del archivo de la microestructura.
2. Se procede al cálculo del *tensor constitutivo elástico homogeneizado* (C^*) a través del Programa Local. Para lo cual, realiza las siguientes actividades:
 - I Arranca el Programa Local, este inicializa las base de datos, cuya capacidad es de tantas células como puntos de integración tiene la macroestructura ($ncelu = MaxPGmacro$). A continuación, lee la información de la microestructura.
 - II Determina la matriz de rigidez de los elementos finitos de la célula.
 - III Se aplica el incremento de carga. En este caso, se procede a la solución en secuencia de tres células ($icelu = 1, 2, 3$), imponiendo una deformación macroscópica ϵ^* preestablecida, tal como se ha propuesto en el apartado 4.2.3. Para ello se procede de la siguiente forma:
 - IV Se determina las fuerzas nodales.
 - V Se ensambla y soluciona el sistema de ecuaciones de la microestructura, bajo condiciones periódicas.
 - VI Se verifica las tensiones a través de la ecuación constitutiva. En este caso, se considera que los componentes tienen comportamiento elástico (no cambian las tensiones). A continuación, se obtiene el tensor de tensiones homogeneizado. Entonces, si: $icelu < 3$ retorna al paso III.
 - VII Si $icelu = 3$ se determina las constantes del *tensor constitutivo elástico homogeneizado* (C^*). La información se envía al Programa Global.

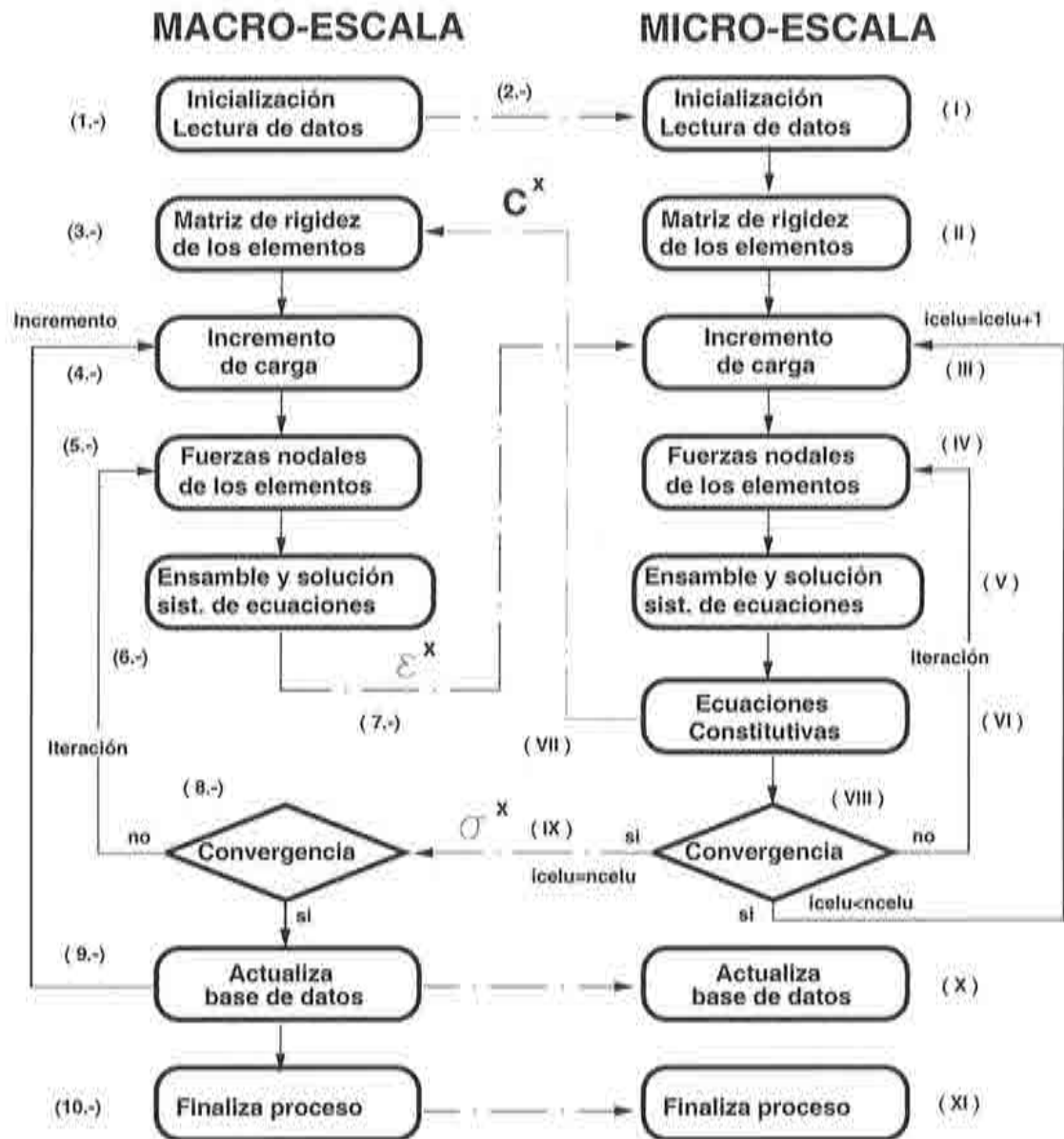


Figura 4.7: Algoritmo de elementos finitos en dos escalas. A la izquierda se encuentra el esquema de actividades en la macroescala y a la derecha el esquema de actividades en la microescala.

3. Se obtiene la matriz de rigidez de cada elemento finito ($k_{(e)}$) de la estructura macroscópica.

4.5. IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA

4. Se aplica el nuevo incremento de carga.
5. Se calcula las fuerzas nodales en cada elemento.
6. Se genera y resuelve el sistema de ecuaciones de la macroestructura.
7. Mediante la ecuación constitutiva del compuesto se verifica que las tensiones en cada punto del macrodominio sea admisible. Dicha función lo cumple el Programa Local, por consiguiente se envía la información de la deformación macroscópica ϵ^x de cada punto de integración. Entonces:
 - III El Programa Local soluciona secuencialmente cada una de las células (desde $icelu=1$ hasta $icelu=ncelu$). Para lo cual extrae de las base de datos la información del problema microscópico (célula) y aplica como incremento de carga el correspondiente incremento de deformación ϵ^{xp} .
 - IV Se determina las fuerzas nodales.
 - V Se ensambla y soluciona el sistema de ecuaciones de la microestructura bajo condiciones periódicas.
 - VI Mediante las respectivas ecuaciones constitutivas de los componentes se verifica que las tensiones microscópicas sean admisibles. Si no lo son, éstas son corregidas. A continuación se obtiene la tensión homogeneizada σ^x de la célula y el tensor secante $C_{(s)}^x$.
 - VIII Se verifica la condición de equilibrio en el dominio de la célula; es decir, para una iteración k cualquiera: $R^{l(k)} = F_{int}^{l(k)} - F_{ext}^{l(k)}$. Si el equilibrio no se cumple ($R^{l(k)} \geq Tolerancia$) se retorna al paso IV y la convergencia se realiza siguiendo una estrategia iterativa (método de Newton-Raphson). Cuando converge, se obtiene la tensión macroscópica σ^x , si $icelu < ncelu$ retorna al paso III.
 - IX Cuando se ha solucionado todas las células ($icelu = ncelu$), se transmite la información de las tensiones homogeneizadas al Programa Global.
8. El Programa Global ingresa los valores recibidos como las nuevas tensiones en los puntos de integración. A continuación verifica el equilibrio de las fuerzas en el dominio de la macroestructura ($R^g = F_{int}^g - F_{ext}^g$). Si, no hay equilibrio ($R^g > Tolerancia$) se retorna al paso 5 y se utiliza una técnica iterativa de convergencia (método de cuasi-Newton).
9. Cuando converge el problema macroestructural ($R^g < Tolerancia$), se actualizan las bases de datos del Programa Global. Si hay más incrementos retorna al paso 4.

X Simultáneamente se actualiza las bases de datos del Programa Local, es decir la información de todas las células.

10. Finaliza el Programa Global.

XI Finaliza el Programa Local.

Como se puede ver en la Figura 4.7, el código del Método de los Elementos Finitos en Dos Escalas esta formado por el acoplamiento de la solución del problema dentro de cada uno de los dos niveles. El esquema que está a la izquierda representa el código del MEF que soluciona el problema a nivel macroscópico y el esquema que está en la derecha corresponde al código del MEF que soluciona el problema a nivel microscópico. Se remarca, el código de la macroescala no dispone del bloque que representa las ecuaciones constitutivas, pues es el código de la microescala quien determina en primer lugar el tensor constitutivo elástico homogeneizado y a continuación cumple la función de ecuación constitutiva del compuesto.

Como se ha mencionado, la convergencia en las dos escalas exige que por cada iteración del problema en la escala macroscópica se deban solucionar cada una de las células. Dichos problemas son resueltos en secuencia por el Programa Local, lo cual implica además de un volumen grande de información, una elevada cantidad de procesamiento numérico. Obsérvese, que éstos problemas a nivel de la microestructura son independientes y por lo tanto pueden ser solucionados en paralelo. Cabe añadir que, al dividir el código en un Programa Global y otro Programa Local se había considerado ésta particularidad del método, en donde la paralelización de la solución de las células es una importante herramienta de la propuesta. Además, se aprovecha la gran potencia de los actuales sistemas informáticos, mediante la solución del problema en una red de varios ordenadores o con el uso de un ordenador de varios procesadores.

4.5. IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA

4.5.3 Introducción a la paralelización

Antes de presentar las principales directivas de la paralelización del código de elementos finitos en dos escalas, se expone rápidamente algunos conceptos de carácter general acerca de paralelización. En primer lugar, existen tres diferentes niveles de paralelización, la de *grano fino*, la de *grano medio* y la de *grano grueso*. La paralelización de grano fino se consigue a nivel de instrucciones del compilador, en este caso se realizan varias operaciones de punto flotante sobre un simple procesador (por ejemplo: una multiplicación y una suma), para lo cual se considera el orden de ejecución y la dependencia de datos en las operaciones del código. En cambio, la paralelización de grano medio se realiza a nivel de bucles. Esta clase de paralelización se realiza automáticamente por el compilador cuando los bucles son sencillos y no hay dependencias de datos; pero en general, se requiere de un *software* específico e indicar al compilador que bucles pueden ser paralelizados a través de las sentencias adecuadas en el código. Tanto la paralelización de grano fino, como la de grano medio utilizan memoria compartida. Finalmente, la paralelización de grano grueso se realiza a nivel de subrutinas y programas. En este caso, la memoria es distribuida y la interacción se consigue a través del paso de mensajes. Si bien, esta clase de paralelización presenta mayor grado de complejidad, su conceptualización permite abordar el problema dentro de una estructuración de actividades que pueden ser realizadas simultáneamente a través de varios procesadores. Además, el paralelismo con memoria distribuida presenta alta escalabilidad¹² y portabilidad¹³. Gracias a la paralelización de grano grueso se han realizado muchas mejoras sustanciales en las aplicaciones del Método de los Elementos Finitos, como por ejemplo: se ha elevado la eficiencia de la solución de sistemas lineales (Ortega, 1989), desarrollado algoritmos de solución denominados *elemento por elemento* para aplicar el Método de los Elementos Finitos (Barragy & Carey, 1988) (King & Sonnad, 1987), resueltos gran variedad de problemas mediante el *método de descomposición de dominios* (Marini & Quarteroni, 1989) (Glowinski *et al.*, 1991), etc.

Dentro de la paralelización de grano grueso existen dos software estándar que presentan gran flexibilidad, estos son: "Message Passing Interface" denominado *MPI* y "Parallel Virtual Machine" denominado *PVM*. Estos paquetes de programas permiten utilizar una red heterogénea de ordenadores, en serie o paralelo, como un simple recurso computacional u ordenador virtual, en el

¹²Se entiende por *escalabilidad* la característica de incrementar la paralelización de acuerdo al incremento de recursos.

¹³Se entiende por *portabilidad* la capacidad del funcionamiento del software bajo diferentes plataformas o sistemas operativos.

cual se puede inicializar varios procesos, sincronizarlos e intercambiar información. Se prefirió utilizar el PVM por su amplia difusión y fácil obtención del software a través de *internet*.

4.5.4 **Introducción al PVM (“Parallel Virtual Machine”)**

Este *software* permite adecuar el cálculo computacional sobre elementos separados de proceso acoplados en una red de trabajo. Es decir, puede estar implementado sobre una red que consiste en ordenadores con diferentes arquitecturas, incluyendo simples sistemas de CPU, máquinas vectoriales y multiprocesadores. Los elementos de cómputo son accedidos por el programa de aplicación a través de rutinas de interfase estándar. Estas rutinas permiten la inicialización y terminación de procesos dentro de la red de trabajo, así como también la comunicación y sincronización entre los mismos.

Los programas de aplicación que utilizan PVM están formados por programas componentes, cada uno de los cuales realizan determinadas tareas. Durante su ejecución se puede generar varias reproducciones de cada programa componente. El programa de aplicación ve al PVM como un recurso flexible de cómputo en paralelo que soporta un modelo denominado *paso de mensajes*. La interfase del PVM está preparada para operar en un ambiente heterogéneo. Para ello verifica si la configuración de todas las máquinas utilizan la misma representación de datos, en tal caso no es necesario realizar ninguna conversión en las comunicaciones. Pero, si la representación de datos de los ordenadores es diferente, todas las comunicaciones dentro de PVM se realizan a través de la representación estándar de datos externos *XDR*.

El paquete puede ser obtenido gratuitamente por *internet* y se requiere que esté instalado y configurado en el o los ordenadores de la red. Básicamente, el paquete del PVM está compuesto de dos partes, la primera es el proceso “daemon” llamado *pvm*, el cual reside en cada uno de los ordenadores de la red. La segunda parte del paquete es una librería de rutinas de interface del PVM denominada *libpvm.a*. Existe un paquete de librerías para programas en *C* y otro para programas en *Fortran*. Los programas de aplicación deben ser compilados con una de estas librerías. Se recomienda consultar “*A Users’ Guide and Tutorial for Network Parallel Computing*” (Geist *et al.*, 1994) que contiene amplia información acerca de las características y opciones del PVM, como también la descripción de las subrutinas disponibles, errores que pueden generarse y algunos ejemplos de aplicación.

4.5. IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA

4.5.5 Estructura de paralelización del *Método de los Elementos Finitos en Dos Escalas*

PVM permite realizar un programa de aplicación bajo diferentes patrones de control o estructuras. Por ejemplo: la estructura *SPMD* ("Single Program Multiple Data"), también conocido como "*regular crowd*", se caracteriza por tener todos los procesos idénticos. Otra estructura similar frecuentemente utilizada se la conoce como "*tree structure*" o *estructura en árbol*. Por lo general dichas estructuras exhiben un patrón regular de comunicación y sincronización. Un programa de aplicación estructurado de forma distinta es el conocido "*Master-Slave*", en donde un *programa maestro* controla a varios *programas esclavos* para realizar una o varias tareas. Finalmente, el *MPMD* ("Multiple Program Multiple Data") representa una estructura con programas o componentes cada uno diferentes de los otros. Utilizar una u otra estructura depende de la aplicación o problema que se requiere solucionar y su eficiencia se basa en los siguientes aspectos, que tienen que ser considerados:

1. Dependencia de datos.
2. Balance de carga.
3. Minimización de las comunicaciones.

Por las particularidades del método propuesto en las dos escalas, se propone solucionar el problema mediante la paralelización del código a nivel de problemas de elementos finitos, a través de una estructura "Master-Slave". En este caso, el *Programa Global* cumple la función de programa maestro y el *Programa local* hace la función de programa esclavo. Es decir, el Programa Global se encarga de: inicializar, distribuir tareas, sincronizar y finalizar a los Programas Locales.

El concepto de esta división de actividades se presenta en la Figura 4.8, en donde se representa al Programa Global mediante un monitor de ordenador en el que figura "GLOBAL", junto a cuatro Programas Locales representados por sendos terminales de ordenadores en donde figura respectivamente: "1 LOCAL", "2 LOCAL", "3 LOCAL" y "4 LOCAL". En el monitor del Programa Global se ha discretizado una (macro) estructura en elementos, en cada uno de los cuales se han indicado 4 puntos, a través de un pequeño círculo con un número dentro (1, 2, 3 ó 4), que representan los puntos de integración. Ahora bien, puesto que por cada punto de integración se soluciona una celda, las celdas correspondientes a los puntos de integración que

4.5. IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA

tienen el número "1" las soluciona el Programa Local "1 LOCAL", las celdas que corresponden a los puntos de integración "2" son resueltas por el proceso "2 LOCAL" y así sucesivamente. Los Programas Locales solucionan el problema en paralelo, mientras que con respecto al Programa Global trabajan prácticamente en secuencia. Esta estructura del código presenta muchas ven-

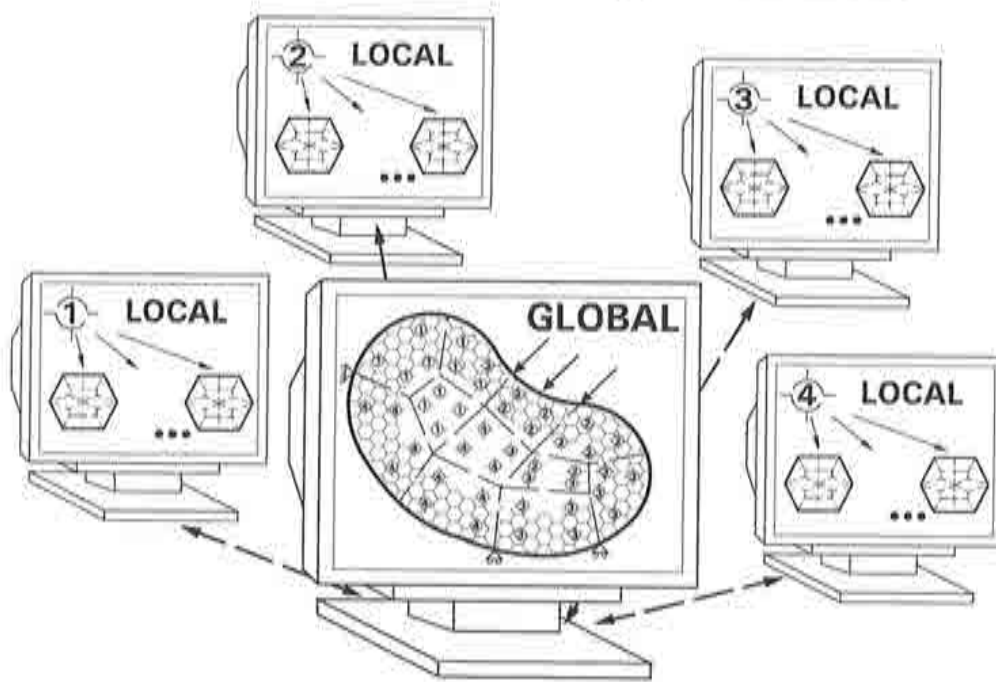


Figura 4.8: Este esquema simboliza el reparto de actividades en la solución del problema de materiales compuestos mediante MEFDE. El Programa Global soluciona el problema a nivel macroscópico. Para lo cual se ha discretizado la macroestructura en elementos finitos. Dicho programa obtiene el comportamiento del material en cada uno de los puntos de integración a través de los Programas Locales, cada uno de los cuales solucionan varias células.

tajas, en primer lugar porque a nivel de la microestructura cada célula con respecto a las demás representa un problema independiente y por tanto la dependencia de datos es mínima, así como también lo es las comunicaciones, puesto que cada Proceso Local guarda en su propia base de datos las variables de los problemas que soluciona. Además, el problema en dos escalas queda fraccionado en varias partes de menor tamaño y cada proceso (o programa) trabaja sobre una parte específica del problema. De esta forma, el Programa Global únicamente conoce la macroestructura y el o los Programas Locales

sólo conocen un número determinado de células. El número de procesos y dimensiones de los mismos se fijan durante la compilación del código. Esta tarea puede ser realizada en unos pocos minutos, antes de solucionar un determinado problema, así los procesos disponen únicamente de la cantidad de memoria que requieren. De tal manera que, el problema global del compuesto queda fraccionado en partes de menor tamaño, que pueden ser solucionados de forma distribuida en varios ordenadores, o en varios procesadores de un ordenador multiprocesador.

Se remarca, al paralelizar la solución de las celdas a través de los procesos esclavos, entre éstos no existe dependencia de datos. Además, en cada incremento o iteración del Programa Global, el Programa Local soluciona unas determinadas células y guarda en sus base de datos las variables internas de estos dominios, de esta forma la única comunicación que requiere realizar, cuando el Proceso Local cumple la función de ecuación constitutiva, es como datos de entrada el incremento de deformación de los dominios y como datos de salida las tensiones homogeneizadas. Finalmente, el balance de carga depende de la tarea encomendada al proceso y la capacidad de éste para realizar dicha labor. Para simplificar este punto, se supone en adelante que todos los procesos disponen de igualdad de recursos, esto sucede por ejemplo cuando se trabaja en un multiprocesador o en una red con ordenadores de las mismas características. En tal caso, se espera que exista un balance de carga distribuyendo en lo posible igual número de células para cada proceso. En el subapartado 4.5.6 se analiza este tema en el caso que el problema es lineal y no lineal.

Estructura "Master-Slave" (Programa Global - Programa Local)

A continuación se presenta el control y secuencia de los procesos del programa, se ha incluido una breve explicación de unas pocas subrutinas que dispone el software de PVM para que se entienda de mejor manera la filosofía del código. Supóngase que se inicia el Programa Global, el código de este proceso contiene entre sus primeras sentencias una subrutina que inscribe al proceso dentro de PVM, es decir mediante la siguiente subrutina en fortran

```
call pvmfmytid( mytid )
```

la cual retorna un número de identificación para el proceso dentro de la variable *mytid*. El Programa Global lee los datos del problema macroscópico e inmediatamente engendra un número de Programas Locales o *esclavos*. El número de estos Programas locales se fija durante la compilación en función

4.5. IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA

a los procesos que se desee utilizar. La subrutina de PVM que permite esta reproducción de procesos es

```
call pvmfspawn(nodename,PVMDEFAULT,arch,nproc,tidelas,numt)
```

donde, la variable *nodename* contiene el nombre del programa de los procesos engendrados o esclavos, *nproc* contiene el número de procesos engendrados. Cada uno de estos nuevos procesos se enrola en PVM a través de la subrutina indicada (*pvmfmytid*). Para el posterior paso de mensajes los procesos esclavos requieren del número de identificación del proceso padre. El software de paralelización dispone de la siguiente subrutina

```
call pvmfparent( iptid )
```

dicha subrutina entrega a un determinado programa el número de identificación del proceso por el cual fue engendrado (en la variable *iptid*). A continuación el Programa Global envía información requerida por los nuevos procesos, como por ejemplo: cuantos procesos han sido generados, el número de identificación de dichos procesos (*tids*), la dirección y el nombre del archivo de datos de la microestructura (*celprob*), etc.

```
call pvmfinitsend( PVMDEFAULT, info )
call pvmfpack( INTEGER4, nproc, 1, 1, info )
call pvmfpack( INTEGER4, tids, nproc, 1, info )
call pvmfpack( INTEGER4, codigo, 1, 1, info )
call pvmfpack( INTEGER4, igrapg, 10, 1, info )
call pvmfpack( REAL8, promiest, 3, 1, info )
call pvmfpack( STRING, CELPROB, 70, 1, info )
msgtype = 1
call pvmfmcast( nproc,tids, msgtype, info )
```

nótese que el proceso de paso de mensajes consta de tres partes, la primera subrutina limpia el bufer de envío, las siguientes empaquetan la información, finalmente se procede al envío. Usualmente, se utiliza la subrutina *pvmf-send* para enviar un mensaje de un proceso a otro, pero como en este caso se transmite el mensaje a varios procesos, se utiliza la subrutina *pvmfmcast*, la cual requiere la siguiente información: el número de procesos receptores (*nproc*), sus números de identificación (*tids*) y el número del mensaje (*msgtype*). En este instante todos los procesos se encuentran activos. Por una parte, el Programa Global realiza algunas tareas de inicialización, como inicializar su base de datos, etc. Pero, para proceder a la obtención de la matriz de rigidez de cada elemento de la macroestructura, requiere disponer del *tensor*

constitutivo elástico homogeneizado. Por lo tanto, luego de haber finalizado las tareas de inicialización se detiene momentáneamente a través de las siguientes subrutinas

```
msgtype = 2
call pvmfrecv( -1, msgtype, info )
call pvmfunpack( REAL8, veric, 10, 1, info )
```

por medio de las cuales el Programa Global espera hasta recibir las *constantes elásticas del compuesto* contenidas en el vector denominado *veric*, con valores reales de doble precisión, cuya dimensión es 10 (problemas bidimensionales). Se remarca, la subrutina *pvmfrecv* tiene la característica de detener al proceso hasta recibir el mensaje.

Mientras tanto, los Programas Locales reciben el primer mensaje y desempaquetan la información mediante las siguientes sentencias

```
msgtype = 1
call pvmfrecv( mtid, msgtype, info )
call pvmfunpack( INTEGER4, nproc, 1, 1, info )
call pvmfunpack( INTEGER4, tids, nproc, 1, info )
call pvmfunpack( INTEGER4, codigo, 1, 1, info )
call pvmfunpack( INTEGER4, igrapg, 10, 1, info )
call pvmfunpack( REAL8, promiest, 3, 1, info )
call pvmfunpack( STRING, nomcelula, 70, 1, info )
```

Además del número de identificación del proceso con que el PVM los identifica, es útil que cada Programa Local se enumere o etiquete, es decir uno de los procesos va a ser etiquetado con el número 1, otro con el número 2, y así sucesivamente hasta *nproc*, esto fácilmente se consigue de la siguiente manera

```
do iproc=1, nproc
  if( tids(iproc) .eq. mytid ) mi = iproc
enddo
print *, 'Yo soy el proceso:', mi
```

a continuación cada uno de los procesos leen el archivo de datos de la célula contenido en la variable *nomcelu*, inicializan las bases de datos (que están adecuadas para un número determinado de células) y obtienen la matriz de rigidez de cada elemento de la microestructura. Para la gestión de las actividades se encontró conveniente crear una nueva variable (denominada *codigo*) que indica al Programa Local que actividad le corresponde desarrollar. Por

4.5. IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA

ejemplo: en el primer mensaje que reciben los Programas Locales el valor de la variable *codigo* es 555. Este valor de código indica a cada uno de los procesos esclavos la función que está cumpliendo, en este caso como *ecuación constitutiva del compuesto*. Entonces, cada uno de estos esclavos luego de obtener las matrices de rigidez elementales se encuentran con la subrutina de recibimiento de mensaje, a través de ésta se detienen en espera del incremento de deformación de cada una de las respectivas células. Excepto uno de los procesos, ya que se encuentra programado que el proceso que esté etiquetado con el número 1, cambie su código a 333 en el inicio del proceso. Esto le permite superar esta barrera para proceder a la determinación de las *constantes elásticas del compuesto*, las cuales transmite al Programa Global a través del siguiente mensaje

```
call pvmfinit send( PVMDEFAULT, info )
call pvmfpack( REAL8, veric, 10, 1, info )
msgtype = 2
call pvmf send( mtid, msgtype, info )
```

a diferencia que la subrutina de recibir, la subrutina de envío de mensajes *pvmf send* no bloquea el proceso, simplemente transmite el mensaje y continúa. En este caso, como este proceso también va a realizar la función de ecuación constitutiva del compuesto, este proceso luego de la transmisión del mensaje limpia su base de datos, modifica nuevamente el valor de *codigo* a 555 y se detiene junto a los otros procesos en espera del incremento de deformación.

Al recibir el Programa Global las constantes elásticas del compuesto, éste determina la matriz de rigidez de cada elemento de la macroestructura, aplica el primer incremento de carga, ensambla la matriz de rigidez global y el vector de fuerzas externas, y soluciona el sistema de ecuaciones. A continuación, obtiene la deformación en cada uno de los puntos de integración de la macroestructura, coloca el incremento de deformación de forma ordenada sobre un único vector y lo transmite a través de un nuevo mensaje,

```
call pvmfinit send( PVMDEFAULT, info )
call pvmfpack( REAL8, STRANHOM, MVALG, 1, info )
call pvmfpack( REAL8, veric, 10, 1, info )
call pvmfpack( REAL8, DTIME, 1, 1, info )
call pvmfpack( INTEGER4, IPOST, 1, 1, info )
msgtype = 3
call pvmf mcast( nproc, tids, msgtype, info )
```

todos los Programas Locales reciben la misma información, pero el número de etiqueta (1, 2, ..., nproc) permite a cada uno de ellos distinguir que parte de la información les corresponde. Cada uno de estos procesos soluciona secuencialmente las células respectivas. Esta labor, que implica obtener el equilibrio de fuerzas en cada uno de estos dominios, requiere de una gran potencia cálculo. No obstante, al no haber dependencia de datos, la eficiencia de la paralelización es muy alta. Como se indicó, cada Programa Local soluciona una célula a la vez hasta obtener convergencia, luego almacena la información y procede con la siguiente. De esta forma, cuando ha solucionado todas las células que le corresponden, la única información que requiere transmitir es la tensión macroscópica resultante de cada dominio. Estos procesos continúan con la determinación del tensor constitutivo secante que corresponde a cada una de las células.

Por otra parte, el Programa Global recibe uno por uno la información de las tensiones homogeneizadas que proviene de los Programas Locales, ordena esta información de acuerdo a la etiqueta del proceso que envía y no continúa hasta que toda la información está completa. Sólo entonces, verifica la condición de convergencia ($R < Tolerancia$). Esto es, si las fuerzas internas en la macroestructura son iguales a las solicitaciones impuestas. Si verifica esta condición, transmite una señal a los Programas Locales que indica que ellos tienen que almacenar las variables, el mensaje que envía es el valor de *codigo* igual a 777. Si la condición no se cumple a nivel global, el valor de *codigo* que envía es 444. Luego del envío del valor de *codigo*, el Programa Global espera el valor de los tensores constitutivos secantes. Los Programas Locales envían dichos tensores y reciben el valor de la variable *codigo*. Si éste es el 444, en vez de actualizar las variables, recuperan los valores del estado anterior convergido para iniciar una nueva iteración. De cualquier forma, los Programas Locales esperan nuevamente el incremento del campo de deformaciones macroscópico. Por lo tanto, si hubo convergencia a nivel macroscópico el nuevo incremento de deformaciones es un incremento de carga, en cambio si no hubo convergencia el nuevo incremento de deformación es una nueva aproximación. Realizandose de esta forma el procedimiento iterativo entre las dos escalas.

Cuando se hayan aplicado todos los incrementos de carga a nivel global, el Programa Global elimina a los Programas Locales de la siguiente manera:

```
do itids=1, nproc
  call pvmfkill( tids(itids), info )
enddo
```

4.5. IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA

a continuación, este proceso a través de la siguiente subrutina

```
call pvmfexit( info )
```

también finaliza.

4.5.6 Balance de carga

Durante la solución de un problema el Programa Global, luego de transmitir el incremento de deformación, continúa con la solución del problema únicamente cuando ha recibido los resultados de todos los Programas Locales. Si alguno de dichos programas tarda mayor tiempo que los demás, se considera que no hay un balance adecuado de carga, puesto que este exceso de trabajo podría ser compartido con el resto de Programas Locales que se encuentran detenidos. Así, el balance de carga se puede considerar óptimo si todos los procesos esclavos tienen aproximadamente el mismo tiempo de duración. En un primer intento de conseguir un buen balance, bajo la suposición de igualdad de recursos para los diferentes Programas Locales, se dividió el problema microestructural otorgando igual número de células a cada Programa Local. Al solucionar los primeros ejemplos con este código en paralelo se detectó que el balance de carga entre procesos era el adecuado cuando el problema completo permanecía en régimen elástico (lineal). Sin embargo, cuando el problema es no lineal, puede originarse en uno de los procesos un número mucho mayor de celdas que entran en régimen no lineal y puesto que el equilibrio de dichas células se consigue mediante una estrategia iterativa, la carga de alguno (o algunos) de los procesos, con respecto a los demás, puede aumentar significativamente produciéndose entonces el desbalance.

La raíz del problema tiene que ver con la distribución del trabajo a los Programas Locales. Como se indicó, cada uno de estos procesos tienen los mismos recursos y en lo posible les corresponde solucionar igual número de células. La distribución de estos problemas microestructurales se realizó de la siguiente manera: el Programa Local etiquetado con el número 1 soluciona las células que corresponden a los puntos de integración de los primeros elementos de la macroestructura, el proceso etiquetado con el número 2 soluciona los siguientes, y así sucesivamente hasta llegar al último Programa Local que soluciona los puntos de integración de los últimos elementos de la macroestructura, tal como se presenta en la Figura 4.8. Como se ha dicho, en problemas no lineales los Programas Locales requieren iterar para obtener el equilibrio de fuerzas en el dominio de la célula. Pero, puesto que los fenómenos no lineales, como plasticidad y daño suceden generalmente en zonas localizadas y en grados diferentes en una estructura, los procesos que contienen las células afectadas requieren de mucho mayor tiempo que los procesos cuyas células siguen en régimen elástico.

Obviamente, no es posible conocer a priori las zonas donde plastifica o

4.5. IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA

degrada el material, puesto que depende tanto de la estructura como de las solicitaciones. En principio se pensó en realizar un balance de carga de forma dinámica, de tal forma que aquellos procesos que hayan finalizado ayuden a los demás con parte del trabajo. Sin embargo, esto no sólo que complicaría el algoritmo, sino que al ser necesario transmitir cuantiosa información acerca de las variables internas, su conveniencia sería dudosa.

El balance de carga se consiguió asignando de diferente forma el trabajo de cada Programa Local. Obsérvese que, durante la discretización de una estructura, la numeración de los elementos finitos se realiza por zonas, entonces cuando el material que le corresponde a un elemento (o a una vecindad de elementos) entra en comportamiento no lineal, se afecta por lo general al trabajo de un Programa Local o en el mejor de los casos a unos pocos de estos programas. Por consiguiente, la asignación de las celdas a cada Programa Local no se realiza por partes de acuerdo a la numeración de los elementos finitos (tal como se presenta en la Figura 4.8), sino más bien se asigna los puntos de integración de la macroestructura de acuerdo a la numeración global en forma secuencial a los diferentes procesos, de tal forma que: el primer punto de integración de la macroestructura lo soluciona el Programa Local que tiene la etiqueta 1, el segundo punto de integración le corresponde al Programa Local con la etiqueta 2, y así sucesivamente, hasta llegar al último Programa Local que está etiquetado con el número n_{proc} , nuevamente el siguiente punto de integración $n_{proc} + 1$ (bajo la numeración global) le corresponde al Programa Local 1, etc. Por ejemplo, supóngase que se utiliza cuatro Programas Locales y los elementos de la discretización del macrodominio contienen también cuatro puntos de integración cada uno. En este caso, la determinación del comportamiento del compuesto en el primer punto de integración de cada elemento del dominio macroscópico le corresponde al Programa Local 1 y así sucesivamente hasta que las células que correspondan al cuarto punto de integración de cada elemento macroscópico le corresponden al Programa Local 4. De esta forma, todos los procesos tienen (en todo momento) igual probabilidad de incrementar el trabajo por la no linealidad de las células. Puesto que el número de Programas Locales y el número de puntos de integración de los elementos finitos pueden cambiar de un problema a otro, se recomienda tener cuidado en el manejo de los punteros, para que en el momento de pasar la información desde la macroestructura hacia la microestructura y viceversa los Programas no confundan la información. En los ejemplos realizados en un multiprocesador se observó que la diferencia del tiempo de duración entre los Programas Locales no supera el 5%.

4.6 COMPARACIÓN DE LA PROPUESTA EN DOBLE ESCALA CON OTROS MÉTODOS

Como se indicó en el Estado del Arte (subapartado 2.5.4), existen muy pocas propuestas para solucionar el problema no lineal de forma acoplada en las dos escalas. La propuesta de Fish y coautores combina la *teoría de la expansión asintótica* y la *teoría de transformación de campos* (Fish *et al.*, 1997; Fish & Shek, 1999). En cambio, la propuesta de Ghosh y coautores combina la *teoría de la expansión asintótica* con el *método de los elementos finitos Voronoi* (Ghosh *et al.*, 1995; Ghosh *et al.*, 1996; Lee *et al.*, 1999).

Para efectos de comparación se recuerda que la propuesta realizada por J. Fish y coautores (Fish *et al.*, 1997) es justificada por sus autores (en la introducción del artículo) en base al siguiente razonamiento “el acoplamiento del problema no lineal requiere de la solución de una celda por cada punto de integración de la macroestructura. Sin embargo, esto no es posible realizar por el enorme esfuerzo computacional que requiere, al menos no para fines prácticos”. Por esta razón, la propuesta presentada por estos autores prioriza la disminución del coste computacional en perjuicio de su precisión. En dicha propuesta, se utiliza un algoritmo que identifica los puntos críticos en base a un criterio de máxima tensión o máxima deformación plástica y solamente en estos lugares se determina los campos microestructurales mediante la solución de una celda. De esta forma este método reduce el cálculo computacional y el almacenamiento de información a cambio de precisión¹⁴. Cabe agregar, que este método utiliza la *teoría de transformación de campos* para abordar el problema no lineal en las celdas. El cual proporciona una solución con campos uniformes dentro de cada uno de los elementos resultantes de la discretización, en base a “eigenstran” o “eigenstress” (véase subapartado 2.5.4). Sin embargo, J. Fish y coautores proponen almacenar únicamente un valor promedio de las variables internas de los elementos que corresponden a cada material componente, es decir un valor constante para cada fase. Este método se denomina *esquema de promedio de 2 puntos*, puesto que almacena un valor para la fibra y otro para la matriz.

En un artículo reciente J. Fish y coautores (Fish & Shek, 1999) proponen otro método basado nuevamente en la *teoría de la expansión asintótica* y la *teoría de transformación de campos*. Este método busca mejorar la aproxi-

¹⁴De las experiencias obtenidas con el método propuesto en esta Monografía, el coste del problema es elevado por la solución de las celdas que entran en proceso no lineal y no así, la solución de las celdas que se encuentran en estado elástico.

mación de problemas no lineales con respecto al método anterior (esquema de promedio de 2 puntos) y se denomina un *esquema adaptativo de 2/n puntos*. Se denomina *esquema de n puntos* a la solución de la celda mediante una aproximación uniforme de los campos de "eigenstrain" dentro de cada uno de los n elementos resultantes de la discretización. A este método se lo presenta como óptimo en precisión. En cambio, el *esquema de 2 puntos* el campo de "eigenstrain" y los *factores de concentración elástica* de cada una de las fases son aproximados como valores constantes. Estas simplificaciones permiten solucionar rápidamente la celda a cambio de precisión y por lo tanto se lo presenta como óptimo en velocidad. El método propuesto se denomina adaptativo porque en la solución del problema en dos escalas combina los dos esquemas mencionados. Para lo cual opera de la siguiente manera: en principio el problema de los materiales compuesto se aborda a través de la solución de la macroestructura y una celda por cada uno de los puntos de integración que tiene dicha macroestructura, a través del *esquema de 2 puntos*. A continuación el algoritmo identifica aquellas regiones que son consideradas como críticas, mediante un criterio de máxima tensión o máxima deformación. En dichas regiones se soluciona nuevamente el problema de la celdas con el *esquema de n puntos*. En base a los resultados del *esquema de 2 puntos* y del *esquema de n puntos* se estima un error de aproximación. Entonces, en las zonas que se obtiene errores de aproximación mayores a una determinada tolerancia se utiliza en adelante el *esquema de n puntos*. De esta forma, el dominio macroscópico es dividido en una parte donde se utiliza el *esquema de 2 puntos* y otra parte donde se utiliza el *esquema de n puntos*, la cual puede extenderse en cada uno de los incrementos de carga.

El método formulado en esta Monografía presenta muchas diferencias con las dos propuestas indicadas en los párrafos anteriores. En primer lugar, para el análisis de la celda no se utiliza la *teoría de transformación de campos*, más bien se buscó la forma adecuada de hacerlo mediante el Método de los Elementos Finitos (MEF). De acuerdo a Dvorak (Dvorak *et al.*, 1994) quien es el que formula la *teoría de transformación de campos* (TTC), los resultados de este método con respecto a los resultados obtenidos con el MEF (*Abacus*) no presentan mayores diferencias y es más eficiente la TTC que el MEF, al menos cuando se utiliza discretizaciones gruesas. Ahora bien, el método propuesto en esta Monografía encuentra una forma directa de obtener las ecuaciones que gobiernan el problema en cada una de las escalas, razón por la cual no se utiliza la *teoría de la expansión asintótica*. Sin embargo, las ecuaciones resultantes (en cada una de las escalas) de estos distintos métodos pueden considerarse equivalentes. Las diferencias más relevantes se producen en la estrategia introducida por J. Fish y coautores para no solucionar una

célula por cada punto de integración de la macroestructura. En el primer método, que utiliza el esquema de 2 puntos, se consigue un gran ahorro del coste computacional, pero introduce muchas posibles fuentes de error al solucionar únicamente los puntos que se consideran críticos. Además, las celdas se solucionan con el esquema de 2 puntos, el cual es un método de aproximación pobre. En el segundo método, se intenta corregir la introducción de los posibles errores mediante el método adaptativo de $2/n$ puntos. Si bien, este método consigue aún una disminución bastante apreciable del coste computacional, es bastante más complicado y menos preciso que haber solucionado todas las células con el esquema de n puntos, que es la forma equivalente al método propuesto por esta Monografía. Cabe agregar que la solución de una celda por cada punto de integración de la macroestructura es la forma correcta de solucionar el problema en doble escala. Además, la dificultad de solucionar este problema radica no solo en disponer de gran potencia de cálculo, sino también en encontrar la forma adecuada de hacerlo. Una de estas formas es precisamente la implementación en paralelo del Método de los Elementos Finitos en Dos Escalas presentada en esta Monografía.

El método de Ghosh y coautores (Ghosh *et al.*, 1996) soluciona también una celda (o un volumen representativo) por cada punto de integración de la macroestructura. En este caso, la principal diferencia con respecto al método propuesto se encuentra en la forma de obtener los campos microestructurales. Como se indicó (véase Estado del Arte, subapartado 2.5.5), este método fue ideado para presentar materiales con dispersión aleatoria de las heterogeneidades. Para ello utiliza un volumen representativo discretizado mediante *elementos finitos Voronoi*. Cada uno de estos elementos representa un pequeño dominio que contiene las dos fases de un material compuesto. Por consiguiente una celda de un medio periódico puede representarse con uno solo de estos elementos Voronoi. La formulación de dichos elementos no convencionales se realiza considerando el efecto de esta inclusión en el contorno del elemento. Para ello se admite saltos en el campo de tensiones o deformaciones en el contorno de esta inclusión (interfase), además se considera que el campo de desplazamientos es continuo. Para el caso de medios con distribución aleatoria, este método se presenta actualmente como el más potente. Con respecto a la solución de una estructura de material compuestos de un medio periódico, este método presenta una notable ventaja en ahorro de coste computacional, puesto que para solucionar cada celda únicamente soluciona un elemento finito Voronoi. Los resultados a nivel macroscópico son bastante buenos, sin embargo a nivel microscópico se tiene mucho menor precisión y poca información acerca de los fenómenos micromecánicos. Además, por las consideraciones que se realizan durante su formulación, existe ciertas li-

4.6. COMPARACIÓN DE LA PROPUESTA EN DOBLE ESCALA

187

mitaciones de este método, principalmente la imposibilidad de considerar el despegue de los materiales componentes.

Parte III

**APLICACIONES Y
CONCLUSIÓN**

Capítulo 5

DETERMINACIÓN DE LAS PROPIEDADES ELÁSTICAS DEL COMPUESTO

El propósito de este capítulo es aclarar al lector algunos de los conceptos de la teoría de homogeneización, tales como: la representación de un compuesto a través de una celda unidad, la forma de imponer las condiciones de contorno y el posible mejoramiento de tales resultados mediante un refinamiento de la discretización de la celda. En especial, las *propiedades elásticas del compuesto* obtenido a través del análisis de una celda mediante el Método de los Elementos Finitos dependen de la calidad de la malla utilizada. Se comparan los resultados con valores presentados en la siguiente referencia (Bendsøe & Kikuchi, 1988), en donde se utiliza la teoría de los desarrollos asintóticos (en la referencia, la imposición de las condiciones de contorno se realiza a través de las funciones periódicas). En este capítulo, se estudia dos compuestos, el primero corresponde a un compuesto formado por partículas cuadriláteras de dos materiales componentes (apartado 5.1). El segundo problema corresponde a un medio con poros o agujeros rectangulares (apartado 5.2).

En el capítulo 6, se estudia la representación y el comportamiento de compuestos fibra-matriz, cuyo refuerzo (la fibra) tiene una dirección preferente. En este estudio se representa el comportamiento longitudinal de materiales con fibras largas (apartado 6.2), fibras cortas (apartado 6.3) y el comportamiento del compuesto transversal a las fibras (apartado 6.4). Finalmente en el capítulo 7 se presentan algunos problemas solucionados en dos escalas (la macroscópica y la microscópica). Los ejemplos presentados se contrastan o bien con ensayos experimentales o con la solución determinada con otros métodos numéricos, de dicha comparación se concluye la bondad del método

propuesto.

5.1 COMPUESTO FORMADO POR PARTÍCULAS CUADRADAS

Considérese que se requiere obtener el comportamiento de un material compuesto formado por partículas cuadradas de dos materiales componentes o fases. Dichas partículas se encuentran alternadas en dos direcciones ortogonales, tal como se presenta en la Figura 5.1. La longitud del lado de cada partícula cuadrada ($L/2$) es 1.2 mm. Los materiales componentes presentan comportamiento isótropo y tienen las propiedades elásticas presentadas en la Tabla 5.1.

MATERIAL COMPONENTE	MOD. ELÁSTICO E_{mod} [MPa]	COEF. POISSON ν	UMB. FLUENCIA σ^u [MPa]
M1	10	0.30	---
M2	1000	0.30	---

Tabla 5.1: Propiedades elásticas de los componentes

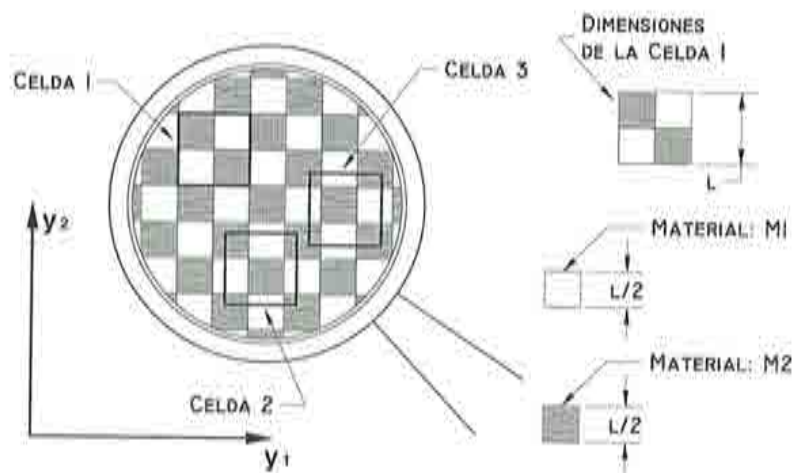


Figura 5.1: Detalle de la micro-estructura de un material compuesto.

Como se ha mencionado, se pueden utilizar diferentes células para representar al compuesto. En este caso, se usa una celda con la misma forma que la

celda utilizada en la referencia, esto es una celda cuadrada cuyo lado (L) mide 2.4 mm, ésta contiene en su interior cuatro partículas (dos de cada componente), véase en la Figura 5.1 la *Celda 1*. En la figura se indica además otras dos celdas (*Celda 2* y *Celda 3*) de la misma forma, pero que difieren en su interior por la posición de los materiales componentes. Considérese además la hipótesis de tensión plana. En primer lugar, se desea conocer el campo de tensiones cuando en el compuesto se genera la siguiente deformación (bajo el punto de vista macroscópico) $\boldsymbol{\varepsilon}^x = (\varepsilon_{xx}^x, \varepsilon_{yy}^x, 2\varepsilon_{xy}^x) = (0.02, 0.01, 0.0)$. Para lo cual, el problema se formula como un problema de valores de contorno sobre la célula, cuya solución se obtiene a través del Método de los Elementos Finitos.

Para una primera aproximación del campo de las tensiones, se discretiza cada una de las tres células con una malla gruesa uniforme de 36 elementos isoparamétricos de 4 nodos. Los resultados obtenidos con la Celda 1 se presentan en la Figura 5.2. Esta figura se encuentra dividida en 4 Gráficos, cada uno de los cuales está etiquetado en la parte inferior izquierda con un número: 1, 2, 3 ó 4. El Gráfico 1 indica la discretización de la célula, en donde cada uno de los 36 elementos finitos contienen un sólo material ($M1$ ó $M2$). Se presenta además, los nodos del contorno de la celda a través de los cuales se imponen las condiciones de contorno mediante los multiplicadores de Lagrange, tal como se presentó en el subapartado 3.6.7. Es decir, la celda del Gráfico 1 tiene 4 lados, de los cuales el lado que contiene a los nodos 1, 2, 3, ... 7 es periódico con respecto al lado que contiene los nodos 43, 44, 45, ... 49 y también el lado que contiene a los nodos 1, 8, 15, ... 43 es periódico con el lado que contiene a los nodos 7, 14, 21 ... 49. Obsérvese que la relación de periodicidad entre los nodos del contorno es la siguiente: los nodos 1, 7, 43 y 49 son vértices periódicos, el resto de nodos del contorno se dividen en pares de nodos periódicos, esto es: 2, 44; 3, 45; 4, 46; 5, 47; 6, 48 y también 8, 14; 15, 21; 22, 28; 29, 35; 36, 42. Para que se cumpla la hipótesis de periodicidad local el desplazamiento relativo entre estos nodos cumple $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{D}_i \boldsymbol{\varepsilon}^x$ (donde \mathbf{D}_i (con $i=1,2$) es el vector de periodicidad). Además, la fuerza en cada nodo del contorno con respecto a la fuerza del nodo correspondiente periódico es igual pero de sentido contrario, tal como se indicó en el subapartado 3.6.3.

Como se puede ver, se presenta además en el Gráfico 1 el campo de desplazamientos obtenido. Nótese que a consecuencia de la diferencia de rigidez de los materiales componentes, el contorno de la célula presenta ondulaciones. Sin embargo, los lados periódicos mantienen su periodicidad, garantizando de esta forma la compatibilidad de desplazamientos con las células vecinas.

En el Gráfico 2 se presenta el campo de tensiones $\sigma_{xx}(y)$, el Gráfico 3 el campo de tensiones $\sigma_{yy}(y)$ y el Gráfico 4 el campo de tensiones cortantes $\sigma_{xy}(y)$. Claramente se evidencia que en los vértices de las partículas rígidas se produce una fuerte concentración de tensiones.

De la misma forma, se ha discretizado y solucionado cada una de las otras dos células, cuyos resultados se presentan en las Figuras 5.3 y 5.4. Obsérvese en el Gráfico 1 de la Figuras 5.2, 5.3 y 5.4 que cada una de las células presentan diferentes ondulaciones en su contorno, sin embargo si se considera el desfase de estos dominios, es fácil apreciar que corresponden al mismo campo de desplazamientos. Algo similar sucede con el campo de tensiones $\sigma_{xx}(y)$, $\sigma_{yy}(y)$ y $\sigma_{xy}(y)$ de las Figuras 5.2, 5.3 y 5.4. Está claro que cada uno de los tres dominios reproduce exactamente el mismo campo de tensiones. En consecuencia, el resultado obtenido es independiente de la célula que se escoja (Celda 1, Celda 2 o Celda3).

Este ejemplo tiene la peculiaridad de que las partículas rígidas están en contacto entre sí únicamente en sus vértices, esto ocasiona una gran concentración de tensiones y deformaciones en dichos puntos y puesto que los elementos finitos utilizados para la discretización son elementos relativamente grandes y de interpolación lineal, el error numérico por integración es muy alto. Por consiguiente se requiere realizar un refinamiento de la discretización. Por ejemplo, se va a discretizar de manera uniforme la celda 1 en 256 elementos, el resultado obtenido presenta sustanciales diferencias, véase la Figura 5.5. No obstante, el error numérico puede ser aún demasiado grande. El refinamiento requiere ser realizado en las zonas en donde se producen errores numéricos altos, en este caso conviene afinar en la zona que existen altas concentraciones de tensiones o deformaciones, tal como se presenta en la Figura 5.6, en donde la malla tiene 324 elementos.

Como se mencionó, este compuesto fue estudiado en el artículo presentado por Bendsøe y Kikuchi (Bendsøe & Kikuchi, 1988). Estos autores, que utilizan la teoría de los desarrollos asintóticos, buscan obtener las constantes elásticas del compuesto, para ello utilizan unas funciones periódicas χ (véase el apartado 2.3). Se recuerda que, por la periodicidad del medio, se admite que el compuesto se comporta como un material ortótropo (véase el subapartado 4.2.3), entonces el tensor constitutivo elástico del compuesto (expresado

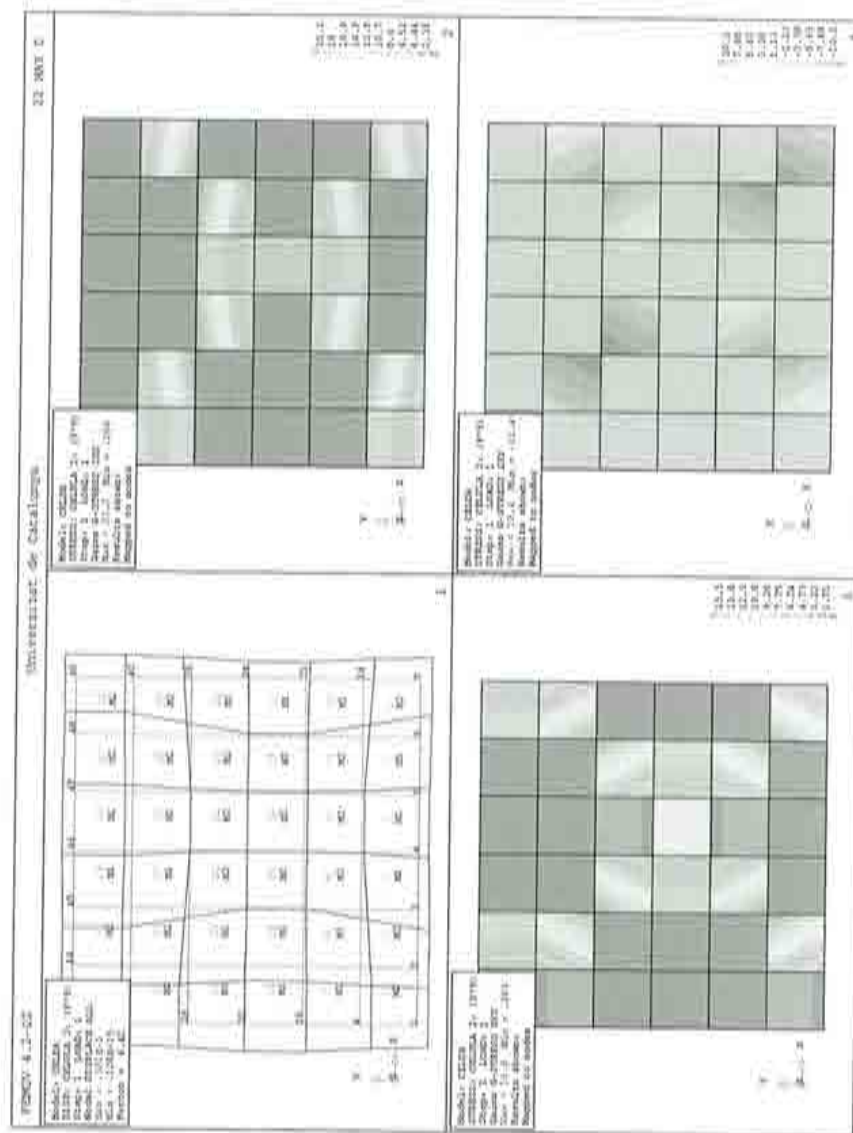


Figura 5.3: Resultados con la Célula 2; Gráfico 1.- Discretización y desplazamientos; Gráfico 2.- tensión σ_{xx} ; Gráfico 3.- tensión σ_{yy} ; Gráfico 4.- Tensión σ_{xy} .

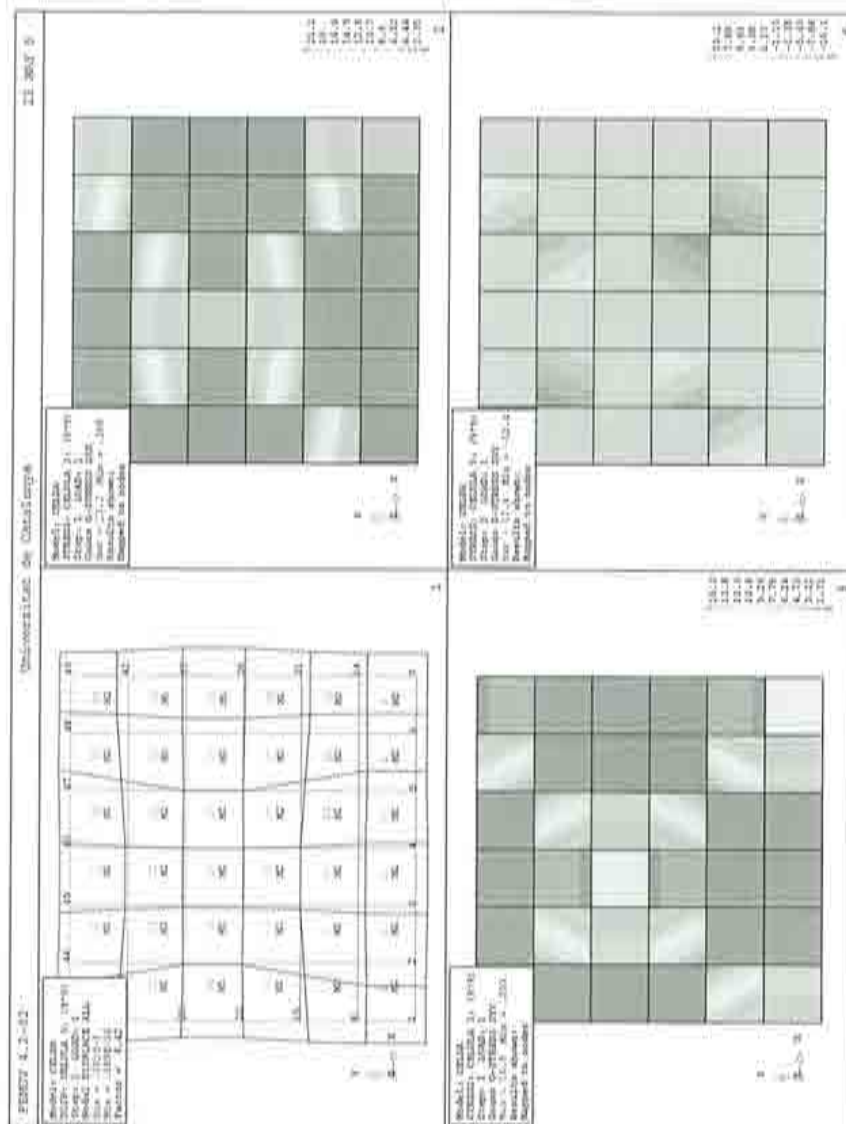


Figura 5.4: Resultados con la Célula 3; Gráfico 1.- Discretización y desplazamientos; Gráfico 2.- tensión σ_{xx} ; Gráfico 3.- tensión σ_{yy} ; Gráfico 4.- Tensión σ_{xy} .

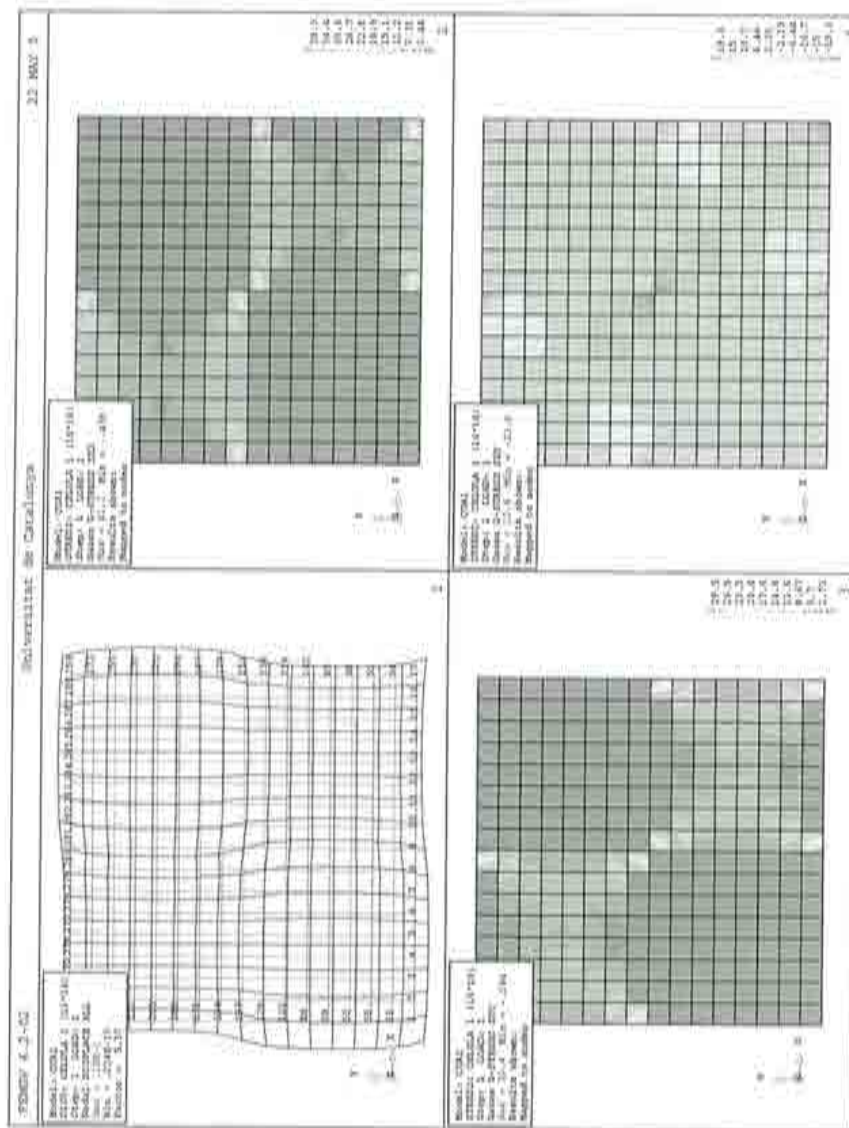


Figura 5.5: Célula discretizada en 256 elementos. Gráfico 1.- Discretización y desplazamientos; Gráfico 2.- tensión σ_{xx} ; Gráfico 3.- tensión σ_{yy} ; Gráfico 4.- Tensión σ_{xy} .

5.1. COMPUESTO FORMADO POR PARTÍCULAS CUADRADAS 199

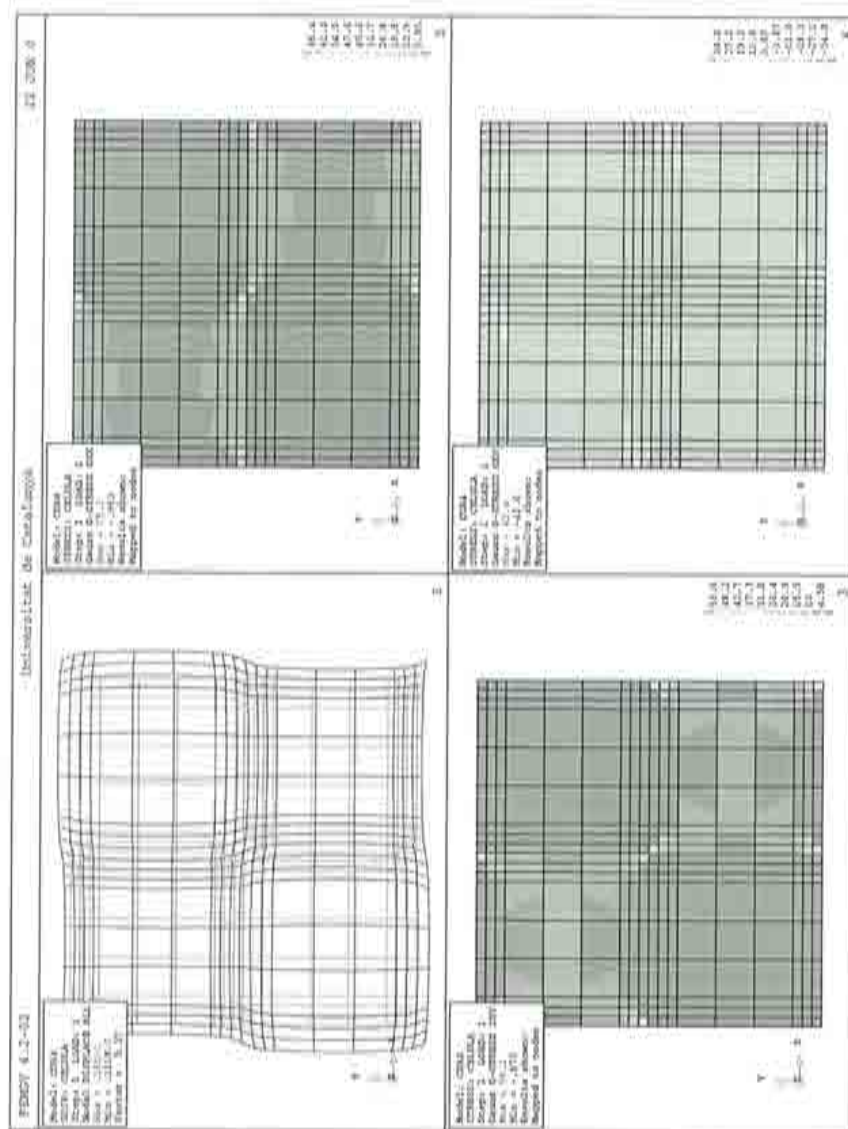


Figura 5.6: Célula discretizada en 324 elementos, Gráfico 1.- Discretización y desplazamientos; Gráfico 2.- tensión σ_{xx} ; Gráfico 3.- tensión σ_{yy} ; Gráfico 4.- Tensión σ_{xy} .

de forma matricial) es:

$$C^x = \begin{bmatrix} C_{xxxx}^x & C_{xyyy}^x & 0.00 \\ C_{yyxx}^x & C_{yyyy}^x & 0.00 \\ 0.00 & 0.00 & C_{xyxy}^x \end{bmatrix}$$

En la referencia se parte de la discretización uniforme de 256 elementos finitos. A continuación, se aplica un refinamiento de la malla mediante un método adaptativo. Este método se basa en un estimador de error y el posterior refinamiento de la discretización en donde se esperan errores numéricos apreciables, detalles del método adaptativo se presenta en una publicación de Guedes (Guedes & Kikuchi, 1990). De esta manera, el artículo presenta los coeficientes elásticos para el compuesto determinado mediante la celda discretizada con 256 elementos, posteriormente se obtienen también dichos coeficientes luego de aplicar 1 vez el método adaptativo y además cuando se aplica consecutivamente una segunda vez este método. En este trabajo no se utiliza ningún método adaptativo, sin embargo se han obtenido las constantes elásticas a partir de las discretizaciones presentadas, con el propósito de comparar el método propuesto para obtener dichas constantes (véase el subapartado 4.2.3) con el método que utiliza las funciones periódicas. Los valores determinados se presentan en la Tabla 5.2.

DISCRETIZACIÓN	C_{xxxx}^x	C_{xyyy}^x	C_{yyyy}^x	C_{xyxy}^x	AUTOR
Uniforme (36 elementos)	211.3640	88.7921	211.3640	115.9346	Zalamea
Uniforme (256 elementos)	149.7998	71.6086	149.7998	87.1283	Zalamea
Variable (324 elementos)	125.9193	61.8919	125.9193	75.3200	Zalamea
Uniforme (256 elementos)	149.80	71.61	149.80	87.12	Bendsøe
Mét. adaptativo (1 vez)	127.12	62.91	127.12	75.90	Bendsøe
Mét. adaptativo (2 veces)	125.79	62.62	125.79	75.78	Bendsøe

Tabla 5.2: Valores de las constantes elásticas determinados para el compuesto mediante las diferentes discretizaciones de la celda unidad.

En este ejemplo, los coeficientes elásticos del compuesto (ver la Tabla 5.2) son los adecuados únicamente si se realiza una discretización fina alrededor de los vértices donde se unen las partículas de mayor rigidez (ver la Tabla 5.2, filas: 3, 5 y 6). Esto es porque en dichos puntos, se produce una elevada concentración de tensiones y deformaciones junto a altos gradientes de estas variables, los cuales conducen a grandes errores numéricos al utilizar una malla gruesa. Cabe aclarar que este ejemplo es un caso extremo por su geometría; por lo general, es posible obtener aproximaciones aceptables

de las propiedades elásticas del compuesto con discretizaciones relativamente simples de la célula. Sin embargo, siempre es conveniente usar un método adaptativo o al menos comparar la solución determinada con una discretización con la solución obtenida de una discretización distinta, para asegurar la fiabilidad de los resultados.

Por otra parte, si se observa los resultados de las constantes elásticas obtenidas para la discretización de 256 elementos (fila 2 y fila 4 de la Tabla 5.2) se puede ver que los valores obtenidos con el método de la referencia y con el método propuesto coinciden. Esto indica que la imposición de las condiciones de contorno (periódicas) mediante las funciones periódicas es equivalente al método de los multiplicadores de Lagrange utilizado en este trabajo. Sin embargo, este último método tiene la ventaja de tener aplicación directa en problemas no lineales.

5.2 MATERIAL CON AGUJEROS

Como se indicó, el método propuesto puede ser fácilmente extendido a medios con agujeros o poros. Pero, puesto que (a nivel microscópico) en el dominio de los agujeros no está definido el campo de tensiones ni deformaciones, se debe considerar durante la implementación las recomendaciones presentadas en el apartado 3.7. En el siguiente ejemplo de aplicación se estudia un material con agujeros rectangulares, tal como se presenta en la Figura 5.7. En el artículo presentado por Bendsøe y Kikuchi (Bendsøe & Kikuchi, 1988), se utiliza la *Celda 1* (véase la Figura 5.7) para obtener las propiedades del compuesto. En este ejemplo, se utiliza además una celda cuyos lados coinciden parcialmente con los agujeros (*Celda 2*). Las dimensiones de los poros tienen la siguiente relación: $A = (3/5)L$, $B = (2/5)L$. La parte sólida del medio corresponde a un material isotrópico con las siguientes constantes elásticas: $C_{xxxx} = C_{yyyy} = 30 \text{ N/mm}^2$ y $C_{xxyy} = C_{yyxx} = 10 \text{ N/mm}^2$. Se desea conocer el campo

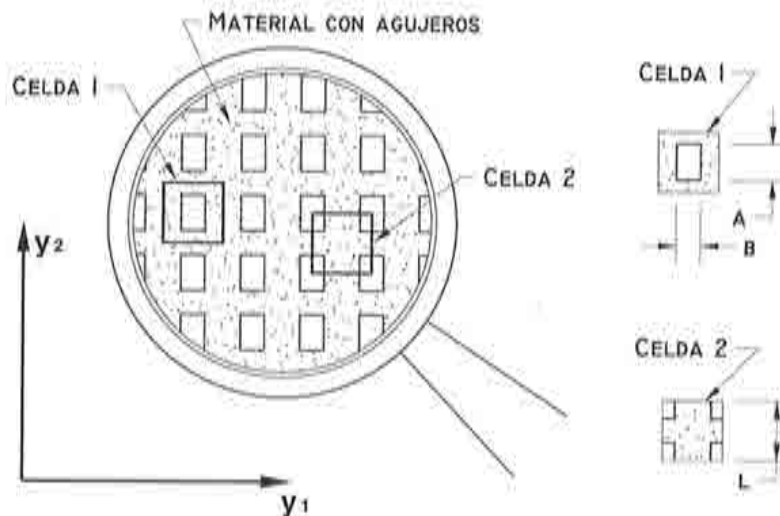


Figura 5.7: Microestructura de un medio con agujeros rectangulares y las dos celdas utilizadas para su representación.

de tensiones microscópicas cuando el compuesto tiene una deformación de $\varepsilon^x = (\varepsilon_{xx}^x, \varepsilon_{yy}^x, 2\varepsilon_{xy}^x) = (0, 0, 0, 0, 1)$.

Como lo presenta la Figura 5.7, se utilizan dos células del tipo cuadriláteras (2 pares de lados periódicos). En la Celda 1 el dominio del agujero se encuentra en el interior de la celda, en la Celda 2 el agujero se presenta en diferentes partes del contorno. Estas celdas se han discretizado con dos

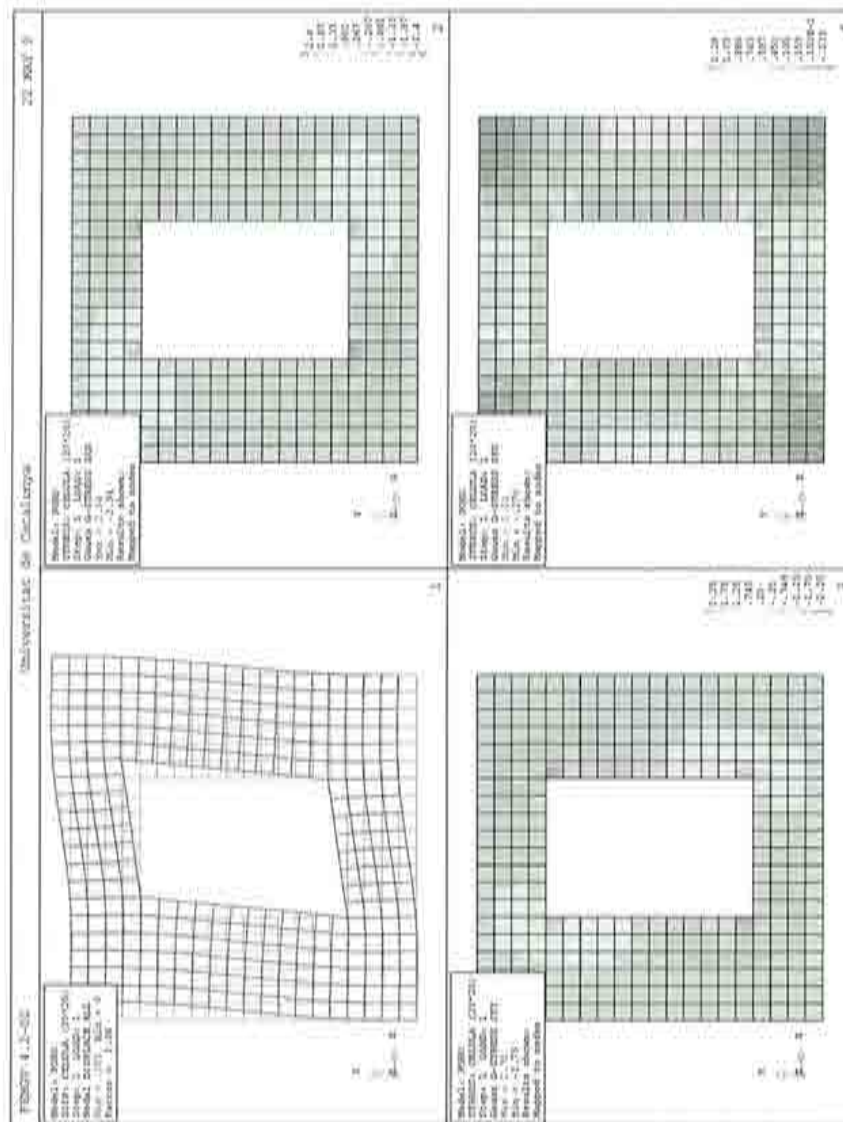


Figura 5.8: Resultado de la Celda 1 con discretización uniforme (304 elementos), para una deformación de $\epsilon^u = (\epsilon_{xx}^u, \epsilon_{yy}^u, 2\epsilon_{xy}^u) = (0.0, 0.0, 0.1)$. Gráfico 1.- Discretización y desplazamientos; Gráfico 2.- tensión σ_{xx} ; Gráfico 3.- tensión σ_{yy} ; Gráfico 4.- Tensión σ_{xy} .

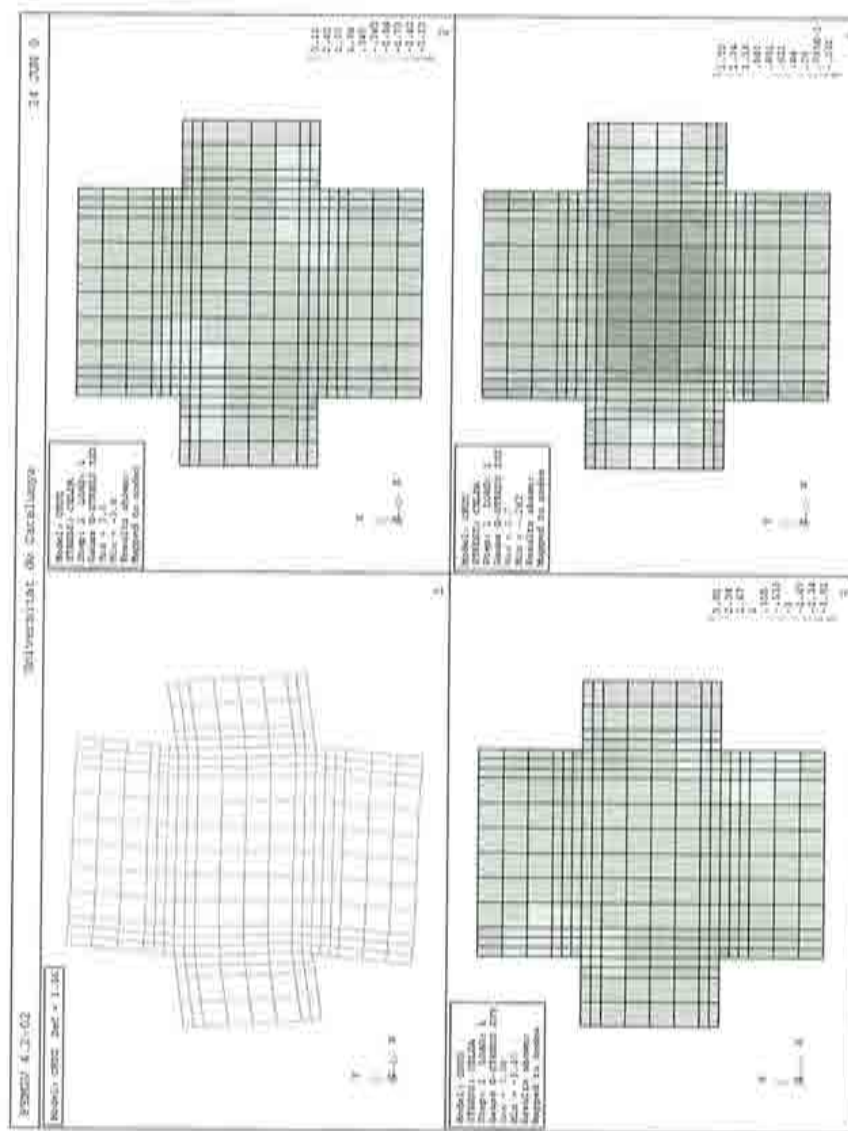


Figura 5.9: Resultado de la Celda 2 con discretización variable (304 elementos), para una deformación de $\epsilon^e = (\epsilon_{xx}^e, \epsilon_{yy}^e, 2\epsilon_{xy}^e) = (0.0, 0.0, 0.1)$. Gráfico 1.- Desplazamientos; Gráfico 2.- tensión σ_{xx} ; Gráfico 3.- tensión σ_{yy} ; Gráfico 4.- Tensión σ_{xy} .

mallas diferentes, pero con la misma cantidad de elementos (304 elementos). La primera de éstas utiliza una discretización uniforme y en la segunda una discretización más apropiada a la geometría de la celda.

En la Figura 5.8 se puede apreciar los resultados obtenidos con la Celda 1. Al igual que en el ejemplo anterior, la figura tiene cuatro gráficos. En el Gráfico 1 se indica la célula discretizada y la deformación de la malla bajo la carga impuesta. En los Gráficos 2, 3 y 4 se presentan respectivamente los campos de tensiones (microscópicos) σ_{xx} , σ_{yy} y σ_{xy} que se producen. De la misma forma, se presenta la solución con la Celula 2, ver la Figura 5.9. En este caso, la malla de la celda tiene el mismo número de elementos, pero las dimensiones de los elementos de menor tamaño se encuentran en las esquinas del agujero, que es en donde se espera grandes gradientes o concentraciones en los campos de las variables. Esta diferencia en la discretización induce a obtener una solución con mayor precisión.

Como se indicó, en la referencia (Bendsøe & Kikuchi, 1988) se determinan las constantes elásticas del compuesto. En este artículo se utiliza la Celda 1 con la discretización uniforme de 304 elementos y posteriormente se aplica hasta tres veces el método adaptativo, con el propósito de obtener una mejor aproximación de las propiedades del compuesto. Los valores determinados de las constantes para las dos discretizaciones indicadas y los resultados determinados en la referencia se presentan en la Tabla 5.3. Como se indica

DISCRETIZACIÓN	C_{xxxx}^x	C_{xyyy}^x	C_{yyyy}^x	C_{xyxy}^x	AUTOR
Uniforme (304 elementos)	13.0147	3.2407	17.5522	2.7848	Zalamea
Variable (304 elementos)	12.9353	3.1906	17.4921	2.7351	Zalamea
Uniforme (304 elementos)	13.015	3.241	17.552	2.785	Bendsøe
Mét. adaptativo (1 vez)	12.910	3.178	17.473	2.714	Bendsøe
Mét. adaptativo (2 veces)	12.865	3.146	17.437	2.683	Bendsøe
Mét. adaptativo (3 veces)	12.844	3.131	17.421	2.668	Bendsøe

Tabla 5.3: Constantes elásticas del medio poroso obtenidas con distintas discretizaciones de la celda unidad.

en la referencia (Bendsøe & Kikuchi, 1988) (véase la Tabla 5.3, fila 3, 4, 5, y 6), al refinar la malla de elementos finitos se tiende asintóticamente a las propiedades exactas del compuesto. En este caso, si bien el método adaptativo aplicado 1, 2 y hasta 3 veces aumenta significativamente el número de elementos en la discretización (véase referencia (Bendsøe & Kikuchi, 1988)),

la variación de los coeficientes elásticos no cambian de forma importante. De las dos discretizaciones utilizadas en este ejemplo, la segunda es la más apropiada; esto se debe exclusivamente a la mejor calidad de la malla y no a la diferencia de forma de las células. En este caso se obtiene una buena aproximación a las propiedades del compuesto (ver Tabla 5.3, fila 2) con el mismo número de elementos. Como se presenta en este ejemplo, la aplicación de la propuesta de esta monografía a medios porosos se realiza de forma natural y no requiere que estos agujeros o poros se encuentren dentro de la celda, sino que pueden coincidir con el contorno de la misma. Finalmente, obsérvese nuevamente que al utilizar la misma discretización de la celda unidad (ver fila 1 y 3 de la Tabla 5.3), los resultados obtenidos con el método de los multiplicadores de Lagrange y el método de los desarrollos asintóticos son los mismos.

Capítulo 6

COMPORTAMIENTO DE MATERIALES REFORZADOS CON FIBRAS EN UNA DIRECCIÓN

Sin lugar a duda esta clase de compuestos se encuentra entre los materiales que despiertan mayor interés en la ingeniería, razón por la cual se han desarrollado una gran variedad de métodos para representar su comportamiento. Sin embargo, dada la complejidad del problema no existe hasta el momento una metodología de solución universalmente admitida. Con el propósito de resaltar el alcance y las limitaciones del método propuesto, en este capítulo se aplica la teoría de homogeneización para reproducir el comportamiento de esta clase de materiales bajo determinadas sollicitaciones. Ahora bien, la implementación del método se realizó en un código bidimensional, esto conduce a diferenciar el comportamiento de estos compuestos en: comportamiento longitudinal y comportamiento transversal a las fibras. De esta manera, en el presente capítulo se indica la representación de un compuesto de fibras largas en una dirección (apartado 6.2), luego se obtiene el comportamiento de un material con fibras cortas (apartado 6.3) que a su vez se subdivide en compuestos con matriz dúctil y compuestos con matriz frágil. Finalmente, se determina el comportamiento del compuesto transversal a las fibras (apartado 6.4), en este caso se utilizan dos disposiciones diferentes: la *disposición cuadrada* y la *disposición hexagonal*. Algunos de los compuestos analizados se utilizan en el siguiente capítulo, en donde se abordan problemas en doble escala.

6.1 BREVE CRONOLOGÍA DE ESTOS MATERIALES

Como se sabe, parte de los materiales que se encuentran en la naturaleza deben sus propiedades mecánicas a la combinación de un material del tipo fibroso embebido en un medio con menor rigidez denominado *matriz*. En materiales como los tejidos orgánicos, las fibras se alinean en la dirección o direcciones de los mayores esfuerzos. De esta forma estos materiales compuestos presentan alta resistencia. De la misma manera, muchos de los materiales utilizados en la industria o en la construcción pertenecen a este grupo de materiales. Estos compuestos se fabrican con el propósito de obtener propiedades óptimas, combinando la alta resistencia otorgada por las fibras, con otras propiedades deseables que presenta la matriz, como por ejemplo: bajo peso, alta resistencia a ambientes químicos, etc.

Esta clase de compuestos pueden ser clasificados de acuerdo a las dimensiones y dirección de las fibras, en:

- Matrices reforzadas con fibras largas, en una o en varias direcciones.
- Matrices reforzadas con fibras cortas.

Las fibras más utilizadas son: de vidrio, de carbono, poliméricas (poliamida, polietileno), de boro y metálicas. Dentro de las fibras hay un ancho margen de propiedades, las cuales dependen de los materiales componentes, procedimiento de fabricación, condiciones de procesado, etc. De manera general, las fibras se caracterizan por tener alta resistencia a tracción. No obstante, algún micro defecto puede originar el fallo de la fibra a una tracción mucho más baja que su resistencia normal. Uno de los primeros trabajos sobre estos aspectos lo presenta Griffith (Griffith, 1920)¹, el cual utiliza fibras de vidrio de alta resistencia para probar que la aparente resistencia del material aumenta tanto como disminuye la talla de sus defectos internos, también se reportó un aumento de resistencia en relación a la disminución del diámetro de fibra. Otras investigaciones (Hitchon & Phillips, 1979) analizan la variación de resistencia de la fibra con respecto a su longitud, usando un análisis estadístico, naturalmente a mayor longitud mayor probabilidad que existan defectos.

¹La referencia viene del libro *Fiber Reinforced Cement Composites* (Balaguru & Shah, 1995), página 37.

Con el propósito de aprovechar la alta resistencia y rigidez de estas fibras en componentes estructurales, se embebió dichos elementos en matrices dúctiles, tales como matrices poliméricas (resinas polyester), esto dió lugar a compuestos conocidos como *fibra de vidrio*. En esta clase de compuestos se consigue una unión resistente gracias a la extensa área de superficie de contacto entre fibra y matriz, resultando un compuesto resistente a esfuerzos mecánicos, ataques químicos y de bajo peso. Posteriormente se han fabricado innumerables materiales reforzados por fibras para todo tipo de aplicaciones, por ejemplo: compuestos de fibras altamente rígidas (fibras de carbono) embebidas en matrices dúctiles (resinas epoxy o metálicas) que se utiliza en la industria aeroespacial. El material escogido para realizar la función de matriz depende de factores como: facilidad de fabricación, compatibilidad con las fibras, las propiedades finales deseadas, costo, entre otros. Quizá, las matrices más utilizadas son las de polímeros, entre ellos: polyester, epoxy, nylon, policarbonato y polipropileno.

Como se conoce, existen varios libros especializados sobre el tema que presentan una extensa cantidad de información acerca de: materiales utilizados, propiedades componentes, tratamientos, procesos de fabricación, etc. El presente trabajo no tiene el propósito de repetir esta amplia información; sino más bien obtener el comportamiento físico de esta clase de compuestos, aclarando el alcance y las limitaciones del método desarrollado. Cabe señalar que en la práctica para representar el comportamiento de los materiales compuestos se utilizan modelos semiempíricos, los cuales se basan en una serie de parámetros obtenidos en ensayos de laboratorio que sirven como parámetros de calibración. Por otra parte, algunos modelos numéricos a partir de la *teoría de homogeneización* se encuentran en las siguientes referencias (Lene, 1986) (Devries *et al.*, 1989) (Suquet, 1987) (Jansson, 1992) (Aravas *et al.*, 1995) (Michel *et al.*, 1999) (entre otros).

6.2 REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS LARGAS

Supóngase que la estructura del compuesto está formado con fibras continuas orientadas en una sola dirección, las cuales están embebidas en una matriz. Supóngase además que la distribución de las fibras es periódica. Bajo esta representación idealizada del material, se puede tomar como celda unidad a una pequeña parte de fibra con la matriz que le rodea, es decir un pequeño prisma con la fibra en su interior, tal como lo presenta la Figura 6.1.a). En este caso, en donde la fibra es continua, la longitud de la célula puede ser simplemente un valor cualquiera (conveniente), gracias a la hipótesis de periodicidad. Este dominio puede ser fácilmente representado en un código

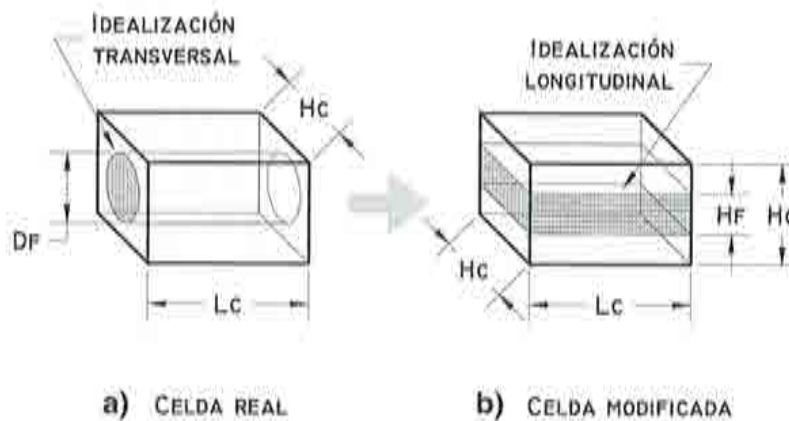


Figura 6.1: Perspectiva de la célula real y célula modificada

de elementos finitos tridimensional. Sin embargo, puesto que la teoría de homogeneización se implementó en un código bidimensional, se representa al compuesto considerando una idealización longitudinal a las fibras, o una idealización transversal a las fibras, de acuerdo al problema. De esta manera, en este apartado se centra el interés en conocer el comportamiento del material en el plano longitudinal a las fibras, para ello se realiza la representación longitudinal del compuesto. Dejando para más adelante los problemas en donde el interés se centra en el comportamiento transversal a las fibras. Para la caracterización longitudinal se requiere realizar una modificación del dominio (ver Figura 6.1.b), tal como se indica en el siguiente subapartado.

En la literatura de fibras se pueden encontrar simplificaciones similares.

6.2.1 Idealización longitudinal de la célula

Como se mencionó, el dominio más simple que cumple con las características de una unidad estructural es una celda de forma de prisma, cuya sección transversal cumple con las proporciones de fibra y matriz (ver Figura 6.1.a). La longitud de la célula (l_c) es simplemente un valor conveniente, gracias a las condiciones de periodicidad. Obviamente, para representar en dos dimensiones a este dominio se requiere realizar algunas simplificaciones, las cuales se espera que no distorsionen el comportamiento del compuesto. Por consiguiente, en adelante se considera que la sección del prisma es cuadrada, cuyo lado se le denomina h_c . Obviamente este volumen debe cumplir con las proporciones de fibra y matriz. Para una fibra de sección circular el lado de la sección cuadrada del prisma resulta $h_c = (\pi \times d_f^2 / (4 \times c_f))^{0.5}$, siendo d_f el diámetro de la fibra y c_f es la fracción en volumen de la fibra.

En una discretización bidimensional de un dominio, todos los elementos tienen la misma profundidad, por este motivo se reemplaza la sección de la fibra por un rectángulo equivalente, cuya profundidad es igual a la de la celda, tal como lo indica la Figura 6.1.b. Para fibras de sección circular la altura equivalente de la fibra es $h_f = (\pi \times d_f^2) / (4 \times h_c)$. Cabe remarcar, que estas simplificaciones se producen al forzar la simulación tridimensional a una simulación bidimensional. De tal manera que, la idealización de material puede ser representada como lo presenta la Figura 6.2. En este caso, es usual utilizar la hipótesis de tensión plana.

6.2.2 Comportamiento del compuesto bajo esfuerzos de tracción

Con el propósito de ilustrar el comportamiento de este tipo de materiales, se obtiene a continuación el comportamiento de un compuesto, cuyos datos corresponden a un material constituido por una matriz epoxi reforzado con fibras de carbono, el compuesto se denomina *T300/914C*. Las características de los materiales componentes son las siguientes: la matriz epoxi corresponde a un material de comportamiento isótropo con un rango elástico lineal que al ser superado presenta ablandamiento, produciéndose la correspondiente degradación del material. Dicho comportamiento fue representado mediante una ecuación constitutiva isótropa de daño, cuya formulación se encuentra en el Apéndice B. En cambio, las fibras (largas) tienen una sección circular de

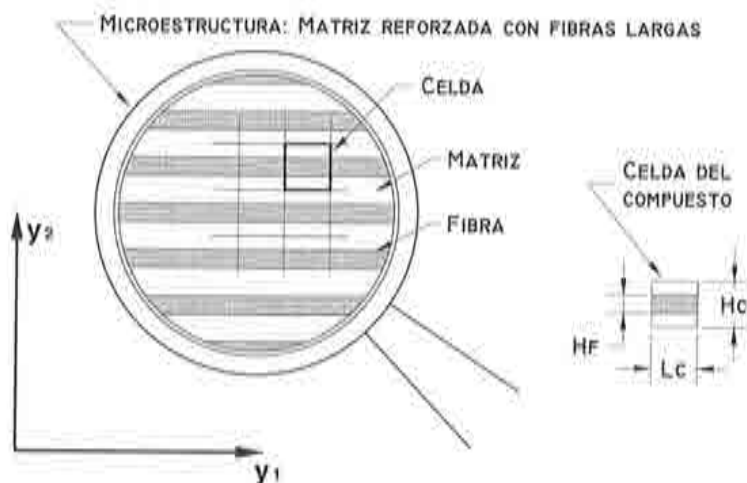


Figura 6.2: Micro-estructura de una matriz con fibras continuas y célula del compuesto

5 μm de diámetro. El material de estas fibras es carbono, su comportamiento es elástico hasta el umbral de tensiones, posteriormente se considera un cierto endurecimiento hasta su rotura, su comportamiento se representó a través de una ecuación constitutiva elastoplástica isotrópica estándar que sigue el criterio de von Mises. Se supone adherencia perfecta entre los componentes. Los parámetros de cada uno de los materiales se presentan en la Tabla 6.1.

Material Componente	Módulo de elasticidad	Coefficiente de Poisson	Límite de fluencia	Energ. Fractura (G) Endurecimiento (H)
M_1 ó M_2	[MPa]	ν	[MPa]	(H [MPa]); (G [N/m])
MATRIZ (M1)	14715	0.325	43.323	G = 5
FIBRA (M2)	239551	0.000	2800.0	H = 30000

Tabla 6.1: Propiedades de los materiales componentes

De acuerdo al subapartado anterior, la célula utilizada es de sección cuadrada cuya lado (altura y profundidad) es $h_c = 6.429366 \mu\text{m}$, la fibra de sección circular se reemplaza por una de sección rectangular equivalente cuya altura es $h_f = 3.053949 \mu\text{m}$. Para la longitud se tomó un valor igual a $l_c = 8.0 \mu\text{m}$. Se considera la hipótesis de tensión plana. Con el propósito de visualizar el comportamiento del compuesto en la dirección de la fibra, se impone a la célula una deformación en la dirección de la fibra (eje xx) de: $\epsilon^x = (\epsilon_{xx}^x, \epsilon_{yy}^x, 2\epsilon_{xy}^x) = (0.005, 0, 0)$, aplicada gradualmente en 25 incrementos.

La solución del ejemplo a través del método propuesto se presenta en la Figura 6.3. De la misma manera que algunas de las figuras anteriores, ésta se encuentra dividida en cuatro gráficos. El Gráfico 1 corresponde a la discretización del dominio en 24 elementos isoparamétricos de 4 nodos, en cada uno de estos elementos está indicado el material componente. Así, M1 representa el material de la matriz y M2 el material de la fibra. En el Gráfico 2 se presenta la malla en el estado inicial y el desplazamiento ó deformación de la misma luego de ser aplicada la sollicitación (incremento 25). Obsérvese que bajo esta sollicitación las condiciones de contorno periódicas generan un desplazamiento uniforme en el contorno del dominio. El Gráfico 3 presenta el campo de tensiones σ_{xx} (en dirección de la fibra) en el dominio de la célula, en donde claramente se aprecia la diferente respuesta de los materiales. Finalmente, el Gráfico 4 presenta el campo de deformación ε_{xx} , el cual indica que en todo el dominio tiene lugar la misma deformación. Esto implica que, cuando la deformación se produce en la dirección longitudinal de las fibras, la *teoría de homogeneización* verifica la hipótesis de la *teoría de mezclas*. Esto es, la deformación de cada uno de los materiales componentes es igual a la deformación del compuesto.

En la Figura 6.4 se presenta las curva tensión-deformación obtenida para el compuesto a través de la célula y también las curvas de comportamiento de cada uno de los materiales componentes (fibra y matriz) determinadas en sendas simulaciones. Se puede observar que el material de la fibra presenta alta rigidez. En cambio, el material de la matriz, además de presentar una rigidez relativamente baja, al sobrepasar el umbral de fluencia inicia el proceso de degradación. Sin embargo, como se puede apreciar en la Figura 6.4, la respuesta global que presenta el compuesto no se ve alterada significativamente, puesto que la mayor parte de energía de deformación es absorbida por la fibra. Cabe agregar que, de acuerdo a esta representación mediante la celda unidad y bajo condiciones periódicas, se podría continuar deformando al compuesto hasta que la fibra sobrepase su límite de fluencia 2800 N/mm^2 , pero en la práctica esto no sucede, ya que la matriz se desprende (o desgarrar) mucho antes de exigir toda la capacidad a las fibras.

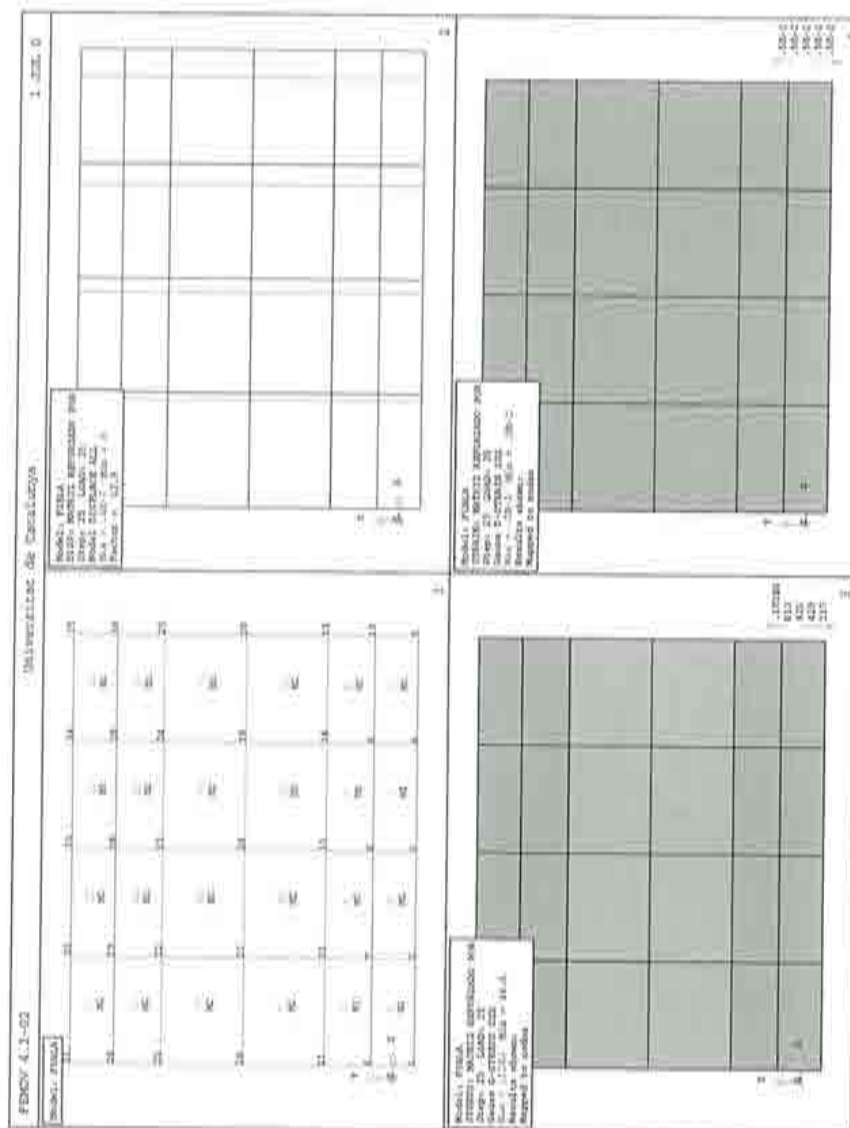


Figura 6.3: Resultados obtenidos mediante una celda unidad de un compuesto de matriz con fibras continuas bajo una deformación en dirección a la fibra; Gráfico 1: Discretización, Gráfico 2: Desplazamientos, Gráfico 3: Tensiones σ_{xx} , Gráfico 4: Deformaciones ϵ_{xx} .

6.2. REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS LARGAS215

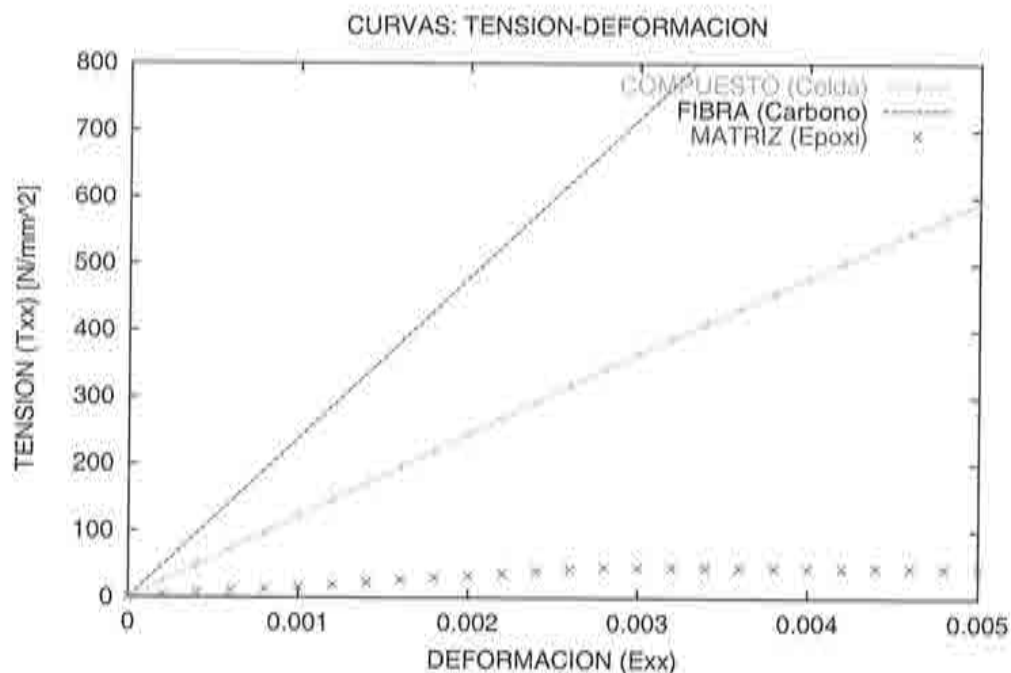


Figura 6.4: Curvas de tensión-deformación del compuesto y de los materiales componentes: fibra y matriz.

6.2.3 Comportamiento del compuesto bajo esfuerzos de cortante

Como se conoce, estos materiales presentan un comportamiento completamente anisótropo y por consiguiente, su comportamiento es muy diferente si las sollicitaciones no coinciden con la dirección de la fibra. En este caso, se va a someter al compuesto a una deformación cortante de: $\epsilon^x = (\epsilon_{xx}^x, \epsilon_{yy}^x, 2\epsilon_{xy}^x) = (0.0, 0.0, 0.006)$, la misma que es impuesta de forma gradual a la célula en 30 incrementos de carga.

El resultado obtenido se presenta en la Figura 6.5. Al igual que en el caso anterior, esta figura se encuentra dividida en cuatro gráficos. El Gráfico 1 presenta la discretización de la célula. El Gráfico 2 indica el esquema de desplazamientos o deformación de la malla cuando se aplica toda la sollicitación (incremento 30). Nótese que al imponer una deformación cortante la célula presenta cierta rotación; además, ya no se produce un desplazamiento uniforme en las caras. En el Gráfico 3 se representa el campo de tensiones cortantes (σ_{xy}), que en este caso es constante para todo el dominio y no supe-

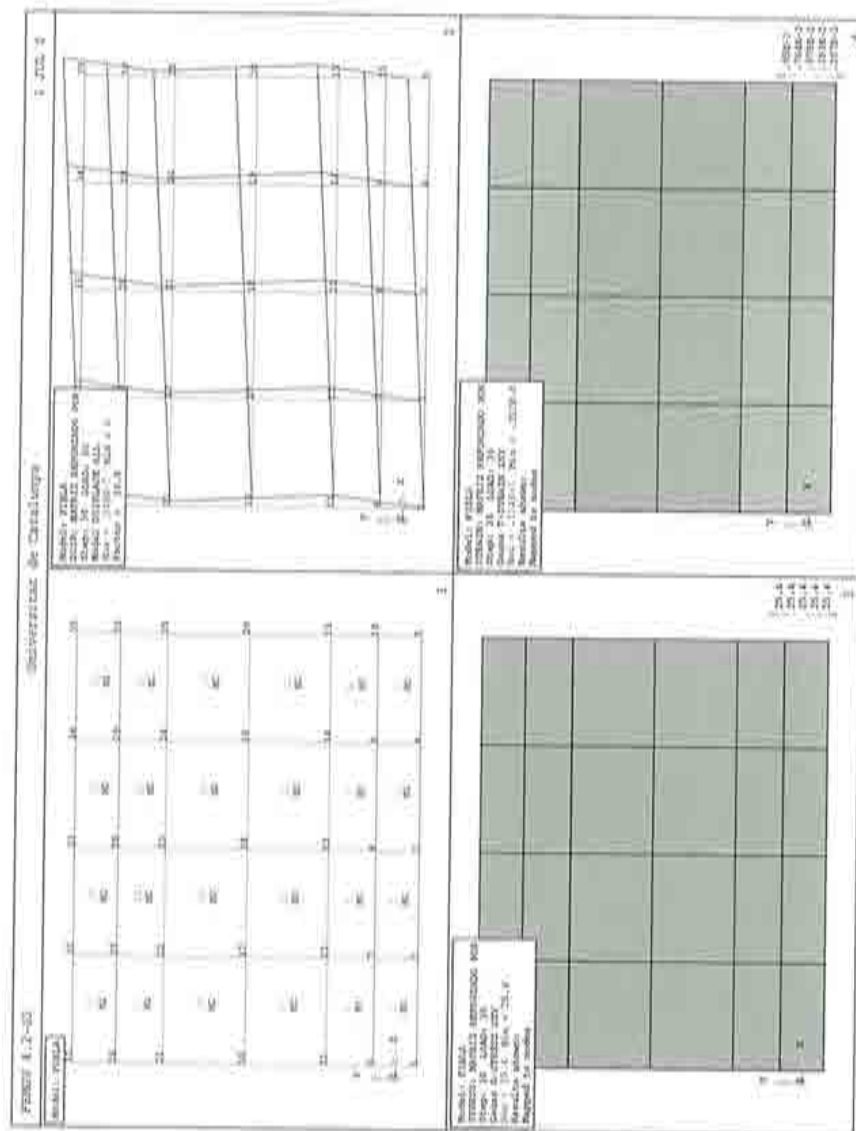


Figura 6.5: Resultados obtenidos con la Célula del compuesto sometido a una deformación cortante $\epsilon^x = (\epsilon_{xx}^x, \epsilon_{yy}^x, 2\epsilon_{xy}^x) = (0.0, 0.0, 0.006)$; Gráfico 1: Discretización, Gráfico 2: Desplazamientos, Gráfico 3: Tensiones σ_{xy} , Gráfico 4: Deformaciones $2\epsilon_{xy}$.

6.2. REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS LARGAS217

ra el máximo valor de cortante que puede soportar la matriz. En el Gráfico 4 se encuentra el campo de deformaciones cortantes ($2\varepsilon_{xy}$) para el mismo incremento. Obsérvese, que la deformación ya no es constante, puesto que existe una localización de deformaciones en la matriz, mientras que la fibra prácticamente no se deforma. Esto indica que bajo esta clase de solicitaciones, la matriz no es capaz de transmitir esfuerzos grandes a la fibra.

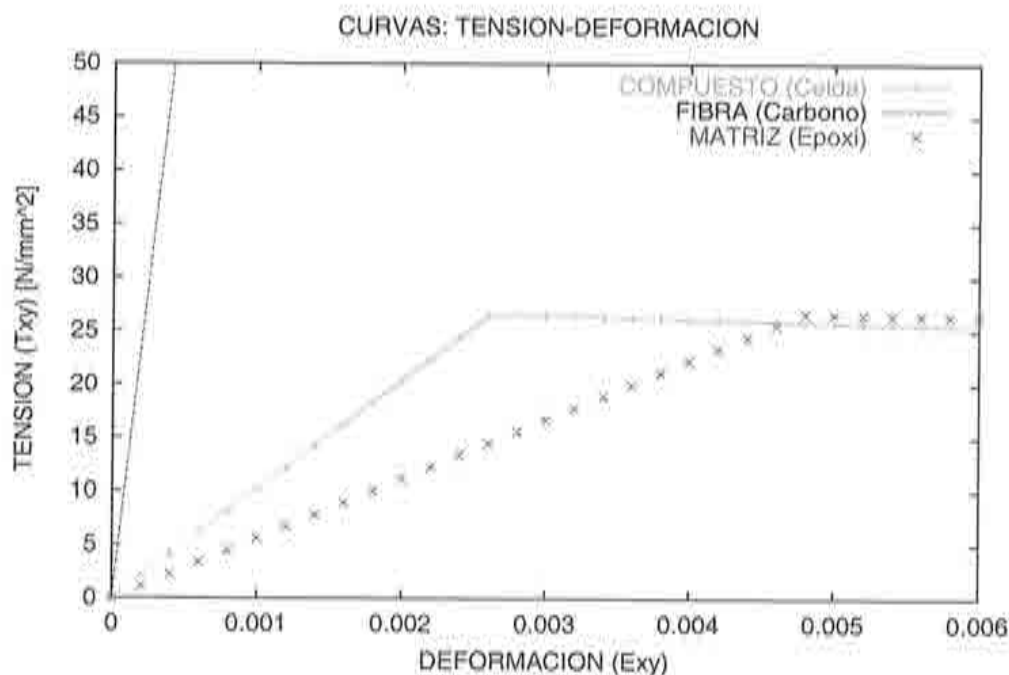


Figura 6.6: Comportamiento bajo esfuerzos de cortante del compuesto (determinado mediante la celda unidad), la fibra de carbono y la matriz epoxi.

Las curvas tensión-deformación del comportamiento del compuesto determinado a través de la célula y del comportamiento de cada uno de los materiales componentes se presenta en la Figura 6.6. Obsérvese que aunque el compuesto presenta mayor rigidez que la matriz, no es capaz de sobrepasar la tensión máxima de ésta. Naturalmente, esto sucede porque en la matriz que pertenece al compuesto se genera una concentración de deformaciones, lo cual inicia tempranamente el fenómeno de degradación.

Como se puede ver, el comportamiento del compuesto puede ser obtenido mediante una célula que representa al material. En este caso, el compues-

to presenta alta anisotropía, pese a que las ecuaciones constitutivas de los materiales componentes son isotrópicas.

6.3 REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS CORTAS

Ya sea por la disponibilidad de los materiales o por el proceso de fabricación del compuesto, el refuerzo de la matriz se realiza en muchas ocasiones con fibras cortas. De las experiencias obtenidas sobre esta clase de materiales, existen dos comportamientos claramente diferenciados de acuerdo al comportamiento no lineal de la matriz. Si la matriz presenta endurecimiento y ductilidad, entonces se espera que el compuesto aproveche la capacidad resistente de las fibras. Si por el contrario, la matriz en estado no lineal presenta ablandamiento el compuesto puede localizar rápidamente, como sucede en muchas ocasiones cuando se utilizan matrices frágiles, ya que al rebasar la capacidad resistente de la matriz, ésta se fractura.

Sin embargo, recientes estudios sobre matrices frágiles reforzadas con fibras, sugieren que este no siempre es el caso y que dicho comportamiento depende de factores como: cantidad de refuerzo, forma y dimensiones de las fibras, entre otros. Hoy en día hay una amplia experiencia sobre el tema, gracias a ensayos realizados en matrices de mortero de cemento reforzados con fibras. Gran parte de estas experiencias se pueden encontrar en libros especializados sobre el tema, tales como: *Fiber reinforced cement composites* (Balaguru & Shah, 1995), *High performed fiber reinforced cement composites 2* (Naaman & Reinhardt, 1996). Donde además se corrobora las dificultades de determinar el comportamiento de esta clase de materiales.

6.3.1 Idealización longitudinal de la célula

Por razones constructivas, es difícil obtener un compuesto con distribución periódica de las fibras, sin embargo se va a considerar que el compuesto es periódico. Bajo esta hipótesis es posible determinar un simple volumen representativo del material. Por sencillez la célula escogida contiene únicamente una fibra y la matriz que la rodea. Es decir, al igual que en el caso de fibras largas, la célula es un prisma de sección cuadrada, en cuyo interior se encuentra una fibra.

Las dimensiones de la célula está en función de: las proporciones de fibra y matriz, forma y dimensiones de la fibra. En el caso de fibras rectas de sección circular los datos de la fibra son únicamente el diámetro (d_f)

y la longitud (l_f). Además se requiere conocer el valor de la separación longitudinal (s) entre fibras. De tal manera que, la longitud de la celda (l_c) puede ser calculada como la longitud de la fibra (l_f) más la separación (s) entre fibras ($l_c = l_f + s$). En el artículo publicado por Guedes (Guedes & Kikuchi, 1990) el valor de s es igual al 10% de la longitud de la fibra. Entonces, si c_f es el coeficiente de proporción en volumen de la fibra y puesto que la fibra tiene sección circular, el lado de la sección cuadrada de la célula resulta:

$$h_c = \sqrt{\frac{\pi \times d_f^2 \times l_f}{4 \times c_f \times l_c}} \quad (6.1)$$

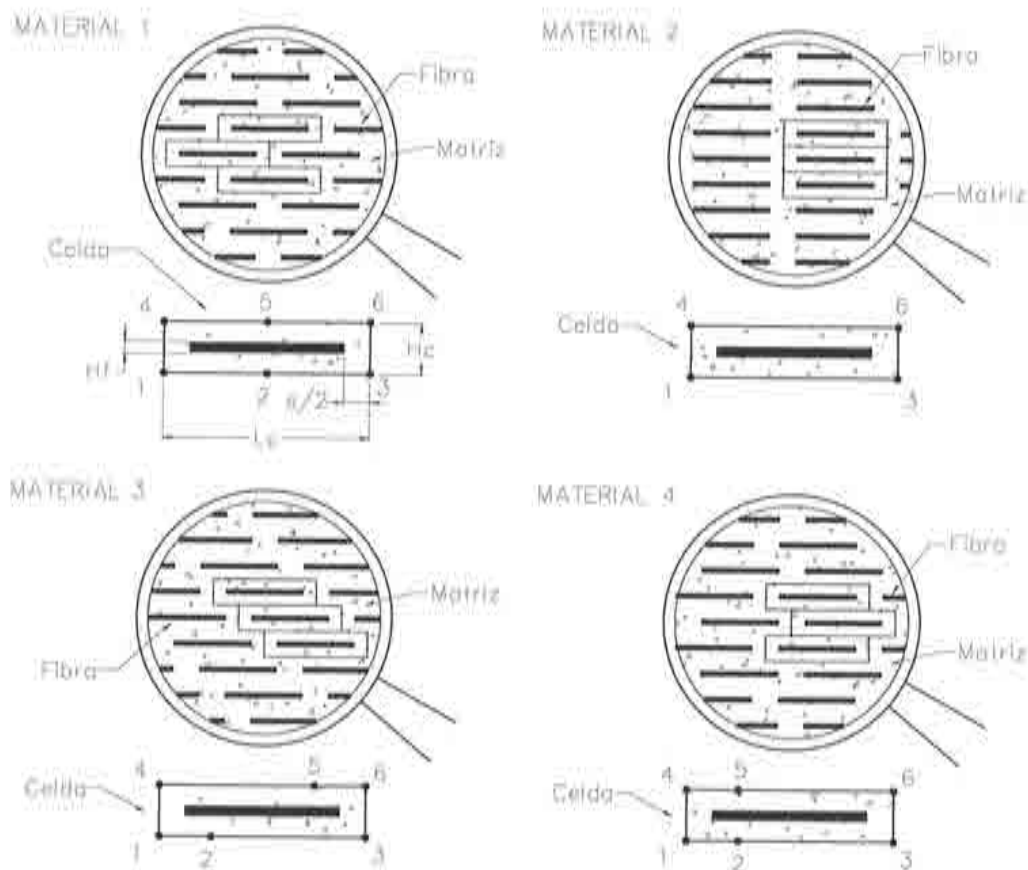


Figura 6.7: Material bajo diferentes distribuciones periódicas.

Al igual que en el caso de fibras largas es necesario realizar una simplificación adicional para representar la célula como un problema bidimensional

6.3. REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS CORTAS 221

(véase la Figura 6.1); esto es, se reemplaza la sección circular de la fibra por una sección rectangular equivalente, cuya sección es $h_c \times h_f$ (donde, h_c es la profundidad de la celda y h_f la altura de la fibra).

En la Figura 6.7 presenta que para representar diferentes distribuciones de fibras en una dirección basta con modificar las condiciones de contorno de la celda. Es decir, obsérvese que en la Figura 6.7 se representa cuatro compuestos distintos, cuya diferencia es únicamente la distribución de las fibras. Para cada uno de estos compuestos se ha separado una celda y numerado los vértices periódicos del 1 al 6. Estos vértices definen los lados o caras de la celda; por ejemplo, el lado comprendido entre los vértices 4 y 5 se le denomina *lado 45*. De esta forma, en el *material 1* la célula es hexagonal, ya que tiene tres pares de lados periódicos, estos son: el lado 12 con el 56, el 23 con el 45, y el 14 con el 36; la célula de *material 2* es cuadrilátera, es decir tiene dos pares de lados periódicos, estos son: el lado 13 con el 46 y el 14 con el 36; la célula del *material 3* es similar a la célula del material 1, únicamente cambia la dimensión de los lados periódicos; la célula del *material 4* es una célula hexagonal particular, ya que dos de los tres pares de lados correspondientes tienen unas condiciones de periodicidad inversas, esta son: el lado 12 con el 54 (inverso del 45), el 23 con el 65 (inverso del 56), y el 14 con el 36. Para el análisis de las matrices con fibras cortas se va a suponer la primera distribución. Esta elección es poco conservadora, pero es la que se utiliza en trabajos anteriores, véase por ejemplo el artículo presentado por Guedes (Guedes & Kikuchi, 1990), en donde se obtiene la variación de los coeficientes elásticos de un compuesto de fibras cortas, para diferentes valores de la relación l_f/d_f .

Por otra parte, el colapso del compuesto se realiza mediante uno de los dos mecanismos siguientes: falla del material por el desprendimiento de la fibra justo por la superficie de contacto, lo cual implica una falla de adherencia entre componentes. La segunda posibilidad es que la falla del material se produzca en uno de los componentes, es decir falla de la matriz o de la fibra. En este trabajo se considera únicamente la segunda posibilidad, es decir, se supone adherencia perfecta entre materiales componentes.

6.3.2 Comportamiento a tracción de un compuesto con matriz dúctil

En la siguiente representación numérica el compuesto corresponde a un material con fibras cortas. Se considera que el comportamiento de los materia-

222CAPÍTULO 6. COMPORTAMIENTO DE MATERIALES REFORZADOS

les componentes corresponden a materiales isotrópicos, cuyas propiedades se presentan en la Tabla 6.2. La matriz es un material dúctil que presenta plas-

Material Componente	Módulo de elásticidad	Coficiente de Poisson	Límite de fluencia	Endurecimiento (H)
M_1 ó M_2	[MPa]	ν	[MPa]	[MPa]
MATRIZ (M1)	14715	0.325	43.323	H = 0
FIBRA (M2)	239551	0.000	2800.0	H = 30000

Tabla 6.2: Propiedades de los materiales componentes

ticidad perfecta. Para modelar el comportamiento de la matriz como de la fibra se va a utilizar una ecuación constitutiva estándar que sigue el criterio de von Mises. Aunque se conoce que la fibra no supera el rango elástico y cuando esto sucede algunas clases de fibras llegan directamente a su límite de rotura.

En esta aplicación se considera que la fibra tiene una longitud de $300 \mu m$ y es de sección circular cuyo diámetro es $5 \mu m$. La separación longitudinal (s) entre fibras es de $50 \mu m$. Se considera además adherencia perfecta y la hipótesis de tensión plana. De acuerdo a la idealización propuesta (subpartado 6.3.1), la célula tiene las dimensiones presentadas en la Tabla 6.3.

Coef. Vol. de fibra (c_f)	Coef. Vol. de matriz (c_m)	Separación entre fibras (s) [μm]	Longitud de célula (l_c) [μm]	Alto de célula h_c [μm]	Alto equiv. de fibra h_f [μm]
0.525	0.475	50	350	5.952436	3.298642

Tabla 6.3: Dimensiones de la célula de fibras cortas

Se sometió a la celda a un proceso incremental en donde se aplicó gradualmente una deformación en la dirección longitudinal a la fibra (eje xx). En la Figura 6.8 se presenta 4 gráficos que corresponden cuando la deformación aplicada a la célula es de: $\epsilon^x = (\epsilon_{xx}^x, \epsilon_{yy}^x, 2\epsilon_{xy}^x) = (0.006, 0, 0)$, esto es en el incremento número 30. Como el dominio de la célula es relativamente delgado con respecto a su longitud, para la visualización de los resultados, se multiplicó las dimensiones geométricas verticales por 10. Entonces, en el Gráfico 1 se encuentra la discretización de la célula; en el Gráfico 2 se presenta el esquema de desplazamientos; el Gráfico 3 contiene el campo de

6.3. REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS CORTAS 223

tensiones σ_{xx} , en este se observa que existe una concentración de tensiones en la fibra, y finalmente el Gráfico 4 contiene el campo de deformaciones ε_{xx} , en donde se aprecia que los mayores valores se encuentran en la matriz cerca de los extremos de la fibra, como también existen valores altos en la matriz que se encuentra en la parte central de la célula.

Se continúa con los incrementos de deformación (a la celda de fibras cortas) hasta alcanzar un valor total de $\varepsilon^x = (\varepsilon_{xx}^x, \varepsilon_{yy}^x, 2\varepsilon_{xy}^x) = (0.010, 0, 0)$. Por otra parte, con el propósito de comparar la respuesta de este material con un compuesto de fibras largas, se realizó una nueva simulación con el compuesto del apartado anterior (véase el subapartado 6.2.2) que tiene las mismas proporciones y propiedades similares de los materiales componentes. A este compuesto de fibras largas se impone la deformación (en dirección de las fibras) de $\varepsilon^x = (\varepsilon_{xx}^x, \varepsilon_{yy}^x, 2\varepsilon_{xy}^x) = (0.0125, 0, 0)$.

Los resultados obtenidos se presenta en la Figura 6.9. Como indica la figura, el compuesto de fibras continuas no cambia apreciablemente su comportamiento al fluir la matriz, pero si lo hace cuando llega a fluir la fibra. Para el compuesto reforzado con fibras cortas se observa que, conforme plastifica la matriz, la respuesta del compuesto se modifica considerablemente, hasta el punto de comportarse como un material con plasticidad perfecta. En este caso la matriz no es capaz de transmitir un mayor esfuerzo a la fibra y mantiene dicho comportamiento hasta que la matriz agota su ductilidad y se rompe. Cabe anotar que en este proceso no lineal, conforme se incrementa la carga, la convergencia es cada vez más lenta, motivo por el cual se utilizó al final incrementos más pequeños.

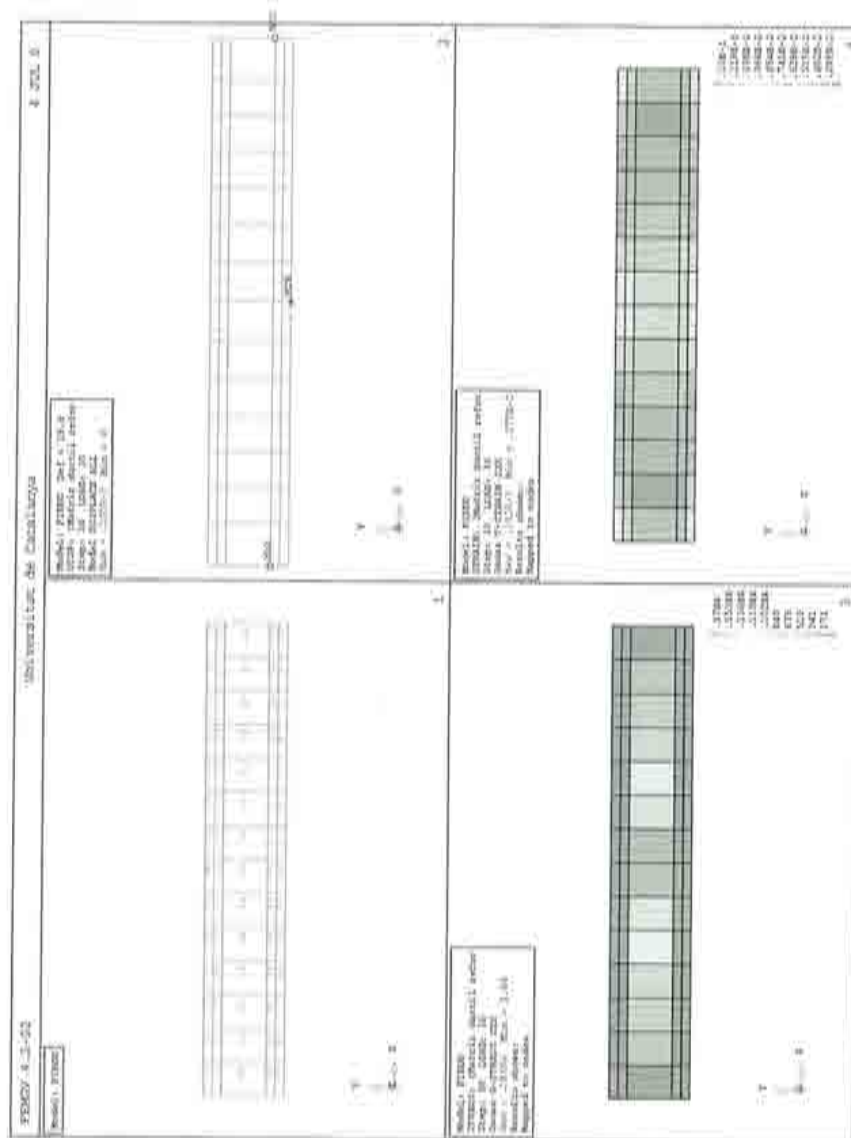


Figura 6.8: Célula de matriz reforzada con fibras cortas sometida a esfuerzo de tracción. Gráfico 1: discretización; Gráfico 2: desplazamientos; Gráfico 3: tensiones σ_{xx} ; Gráfico 4: deformaciones ϵ_{xx} .

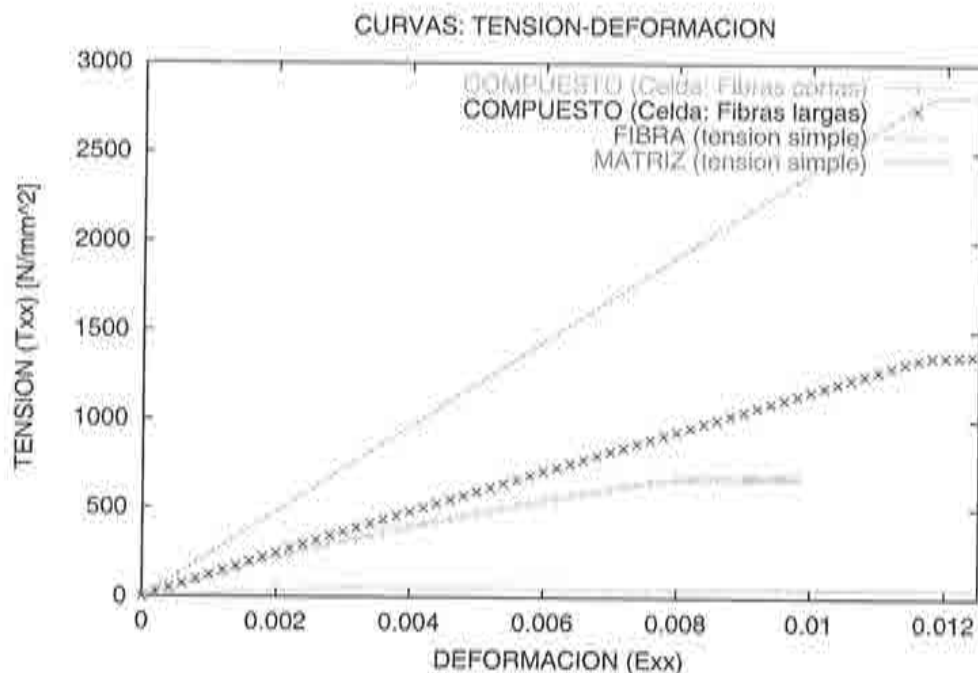


Figura 6.9: Curvas tensión-deformación bajo esfuerzos de tracción simple: compuesto de fibras corta, compuesto de fibras largas, fibra y matriz.

6.3.3 Compuesto de matriz frágil con refuerzo de fibras cortas

Gran parte del estudio sobre estos materiales están dirigidos al refuerzo de matrices de cemento. Véase por ejemplo, las siguientes referencias, en donde se estudian diferentes aspectos sobre estos compuestos (Banthia *et al.*, 1995) (Houget *et al.*, 1995) (Jun & Stang, 1998) (Taerwe & Gysel, 1996) (Mitchell *et al.*, 1996). Sin embargo, pese a la gran cantidad de publicaciones existentes, los resultados obtenidos no siempre concuerdan o si lo hacen es únicamente de forma cualitativa. Esta sección se centra en la simulación de estos compuestos. Como punto de referencia se parte de publicaciones que contienen ensayos experimentales. Lamentablemente es difícil conseguir un trabajo experimental que contenga todos los datos necesarios para comparar rigurosamente los resultados, ya que además del ensayo de algunos especímenes del compuesto, necesarios para validar el modelo, se requiere conocer las características y propiedades de cada uno de los materiales componentes.

En esta clase de compuestos, la típica matriz de cemento portland consiste en: mortero de cemento (cemento más un agregado fino), u hormigón (cemento más agregados grueso y fino). En la práctica se utilizan aditivos plastificantes y reductores de agua para obtener una buena mezcla, trabajabilidad y calidad de la matriz, como también es frecuente aditivos para mejorar la adherencia fibra-matriz. De acuerdo a los fines deseados las características de la matriz fluctúa dentro del siguiente rango: la resistencia a tracción de la matriz de hormigón está entre 2.5 MPa a 7.0 MPa (la resistencia a compresión es aproximadamente del orden de 10 a 15 veces mayor), el módulo de elasticidad está alrededor de 20 GPa y el coeficiente de Poisson generalmente es de 0.20.

La fibra puede ser metálica, mineral, polimérica, u orgánica. La fibra metálica tiene alto módulo y resistencia, puede presentar además un comportamiento dúctil. La fibra mineral, usualmente de vidrio, tiene un módulo alto con respecto al cemento pero más bajo que la metálica, la falla es frágil. Algunas fibras poliméricas como el Kevlar tienen alto módulo, pero su unión con la matriz no es tan buena como la de las fibras minerales o metálicas. Las fibras metálicas provienen de aleaciones de hierro más carbono, su resistencia está en el rango de los 690 MPa a 1380 MPa , el módulo de elasticidad es de alrededor de 210 GPa . La sección de las fibras puede ser: circular, cuadrada, etc. Para fibras metálicas, la longitud es por lo general menor a los 75 mm con una relación longitud-diámetro (l/d) típicamente entre 50 a 100. En esta clase de compuestos (matriz de cemento y fibras metálicas) el refuerzo es superior al 0.5%, y debido a la disminución de la trabajabilidad generalmente no se utiliza porcentajes mayores al 6%.

De acuerdo a publicaciones sobre estos materiales (Li *et al.*, 1995) (Li *et al.*, 1998) (Balaguru & Shah, 1995) (Naaman & Reinhardt, 1996), se han identificado diferentes comportamientos claramente diferenciados, como lo presenta la Figura 6.10, en donde:

- a) El compuesto no gana resistencia. Se comporta aproximadamente como la matriz (hormigón), ya que el compuesto falla inmediatamente después de la fractura de la matriz. Este comportamiento se detecta principalmente cuando se utiliza cantidades bajas de fibras (menores al 1%) y valores bajos de la relación l/d .
- b) El compuesto disminuye bruscamente su capacidad de resistencia después de la primera fractura, pero no falla. En adelante presenta parte de dicha capacidad y ductibilidad, tal como lo presenta la curva *b* de la

6.3. REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS CORTAS 227

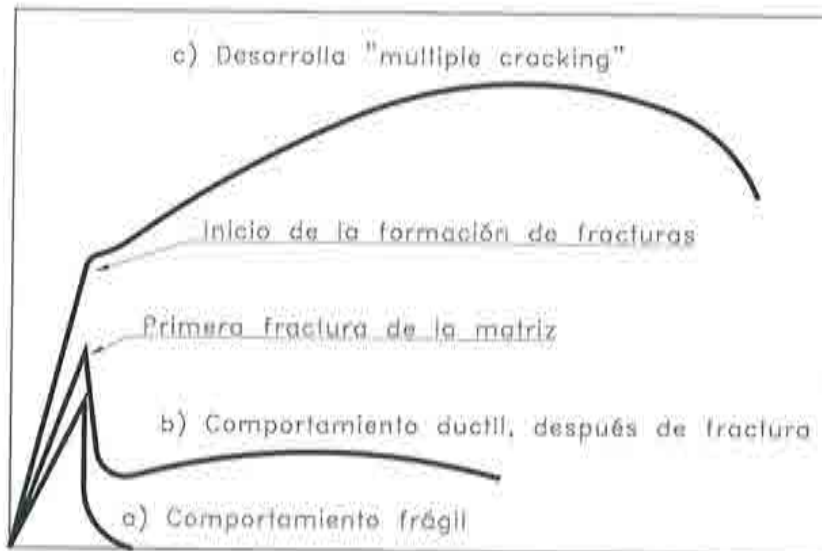


Figura 6.10: Comportamiento de compuestos de cemento reforzados con fibras cortas

Figura 6.10. Durante este proceso, se agrandan las fisuras anteriores y aparecen algunas nuevas, hasta que falla por completo el compuesto.

- c) Bajo ciertas características favorables, el material después de pasar de la zona elástica, entra en un proceso denominado *múltiple fractura* ("multiple cracking") en donde, presenta una significativa ganancia de resistencia y ductilidad; en dicho proceso se generan gradualmente numerosas fracturas, hasta el colapso del material.

Obviamente, es el último de estos comportamientos el más deseable. Para obtener dicho comportamiento, hace falta considerar una serie de variables que intervienen. En la literatura del tema, hay algunas publicaciones que presentan fórmulas para determinar la fracción de refuerzo crítico, bajo el cual el compuesto tiene un comportamiento frágil o cuasi-frágil (curvas: a y b) y sobre este valor crítico el compuesto desarrolla mayor resistencia y ductilidad (curva: c). Naturalmente dada la complejidad del problema los investigadores en el tema presentan diferentes formulaciones basadas en parámetros distintos (Naaman, 1987) (Li & Wu, 1992) (Tjiptoroto & Hansen, 1993). A efectos de comparación de los diferentes métodos, Naaman presenta la Tabla 6.4 (Naaman & Reinhardt, 1996), en donde se utiliza valores compatibles, manteniendo todos los parámetros constantes excepto la relación de forma

de la fibra (l/d).

Fibra l/d	Naaman (1987) $\sigma_{mu}/\tau = 1$	Naaman (1987) $\sigma_{mu}/\tau = 2$	Li & Wu (1992)	Tjiptobroto & Hansen (1993)
0	100.0	100.0	Negativo	209.0
1	80.0	67.0	Negativo	71.8
10	28.6	16.7	Sin Solución	10.3
20	16.7	9.1	Sin solución	5.28
50	7.41	3.85	2.73	2.14
100	3.85	1.96	0.55	1.07
200	1.96	1	0.13	0.54

Tabla 6.4: Resultados acerca del porcentaje de refuerzo de fibras crítico, para un determinado compuesto, en base a diferentes métodos propuestos. En esta tabla σ_{mu} representa la resistencia a la tracción de la matriz y τ la resistencia promedio de la junta de interface entre fibra y matriz.

De estos resultados se deduce dos cosas, la primera es, que la forma de la fibra es muy importante, a mayor l/d menos refuerzo de fibras se requiere. La segunda es, que aún no hay unanimidad entre los investigadores, lo mismo sucede si nos referimos a otras características del compuesto. Si se requiere valores orientativos estas fórmulas tienen una cierta utilidad. Pero, si lo que se requiere es mayor información, es necesario utilizar nuevos mecanismos que permitan conocer el comportamiento del compuesto.

A continuación se reproduce el comportamiento del compuesto mediante la *teoría de homogeneización*, en donde a través de la celda es posible considerar las propiedades de cada componente, forma de las fibras y adherencia fibra-matriz (aunque en este trabajo se considera adherencia perfecta). En este caso se representa el comportamiento de dos materiales compuestos, el primero con un refuerzo de 2% y el segundo con un refuerzo de 6% de fibras metálicas.

6.3.4 Compuesto de matriz de hormigón con el 2% de fibras

El compuesto que se analiza a continuación es una matriz de cemento reforzada con el 2% de fibras metálicas. Las propiedades de los materiales componentes son valores presentados en un artículo de carácter experimen-

6.3. REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS CORTAS 229

tal (Li *et al.*, 1998). Es preciso sin embargo, hacer una aclaración previa: Las fibras del ensayo tienen distribución aleatoria, mientras que en el modelo numérico se supone una distribución periódica. Además, las fibras reales tienen unos pequeños dobleces en los extremos ("hooked ends") que no se consideran en el modelo numérico. Ahora bien, la longitud de la fibra es de 30 mm, su sección es circular de diámetro 0.5 mm, esto significa que la relación l/d es igual a 60. Como se indicó, se considera adherencia perfecta entre los materiales componentes y la hipótesis de tensión plana. Las propiedades de los materiales se presentan en la tabla 6.5.

Material Componente	Módulo de elasticidad	Coefficiente de Poisson	Límite de fluencia	Energ. Fract. (G) Endurecim. (H)
M_1 ó M_2	[MPa]	ν	[MPa]	G [N/mm]; H [MPa]
MATRIZ (M1)	20000	0.20	$f_t = 4$; $f_c = 40$	$G=0.006$
FIBRA (M2)	200000	0.30	1380	$H = 20000$

Tabla 6.5: Propiedades de los materiales componentes

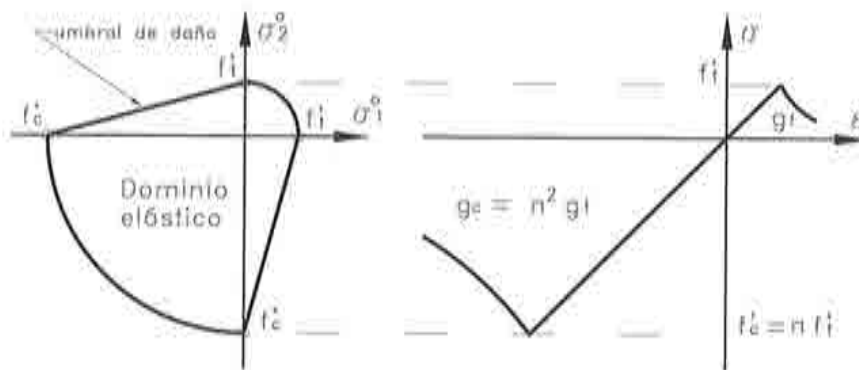


Figura 6.11: Ecuación constitutiva de daño

Para representar el comportamiento del metal se utilizó una ecuación constitutiva elastoplástica isotrópica que sigue el criterio de von Mises, aunque en este caso la fibra solo trabaja dentro del rango elástico. En cambio, el comportamiento de la matriz de cemento se obtiene mediante una ecuación constitutiva de degradación isotrópica (Oliver *et al.*, 1990), cuyo dominio elástico en el espacio de tensiones es no simétrico, tal como se presenta en la

Figura 6.11; el ablandamiento es de tipo exponencial y está controlado por la energía de fractura². Esta ecuación constitutiva se encuentra formulada en el Apéndice B.

Las dimensiones de la célula se obtienen en función de la proporción de los materiales (2% fibras), dimensiones de la fibra y la separación entre fibras s . Admítase que el valor de s es el 10% de la longitud de la fibra (Guedes & Kikuchi, 1990), esto es 3 mm . Las dimensiones determinadas para la celda se presentan en la Tabla 6.6. Se somete a la célula a una deformación glo-

Coef. Volum. de fibra (c_f)	Coef. Volum. de matriz (c_m)	Separación de fibras (s) [mm]	Longitud de célula (l_c) [mm]	Alto de célula (h_c) [mm]	Alto equiv. de fibra (h_f) [mm]
0.02	0.98	3	33	2.9875	0.0657

Tabla 6.6: Dimensiones de la célula con el 2% de fibras

bal en dirección longitudinal a la fibra (Eje xx), impuesta gradualmente con pequeños incrementos para obtener convergencia. Como la deformación de los contornos de la célula en sentido perpendicular a la fibra está restringida, se prefirió utilizar un coeficiente de Poisson nulo ($\nu = 0.0$) en los materiales componentes con el propósito de no inducir esfuerzos adicionales por esta restricción, es decir se busca aproximar la simulación numérica a un ensayo a tracción simple. El resultado obtenido del comportamiento de la célula se presentan en la Figura 6.12, también se indica la curva tensión-deformación de los materiales componentes: fibra y matriz, y el comportamiento obtenido en el ensayo experimental (Li *et al.*, 1998).

En este caso, existe una sorprendente concordancia entre la representación numérica y el ensayo experimental. Si se compara el comportamiento de la célula con el de la matriz se observa que si bien existe una pequeña ganancia de rigidez y resistencia, el compuesto después de alcanzar su máxima resistencia se degrada a mayor velocidad, como consecuencia de la fractura de la matriz. Sin embargo, posteriormente a esta rotura frágil la célula presenta un cierto grado de recuperación de resistencia y sobre todo presenta ductilidad, la cual ha sido reportada en numerosos ensayos experimentales. Por otra parte, se podría haber esperado una resistencia algo mayor para la simulación numérica del compuesto en comparación con el ensayo, puesto que

²El valor de la energía de fractura es un valor usual para este material, puesto que no figura en la referencia.

6.3. REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS CORTAS231

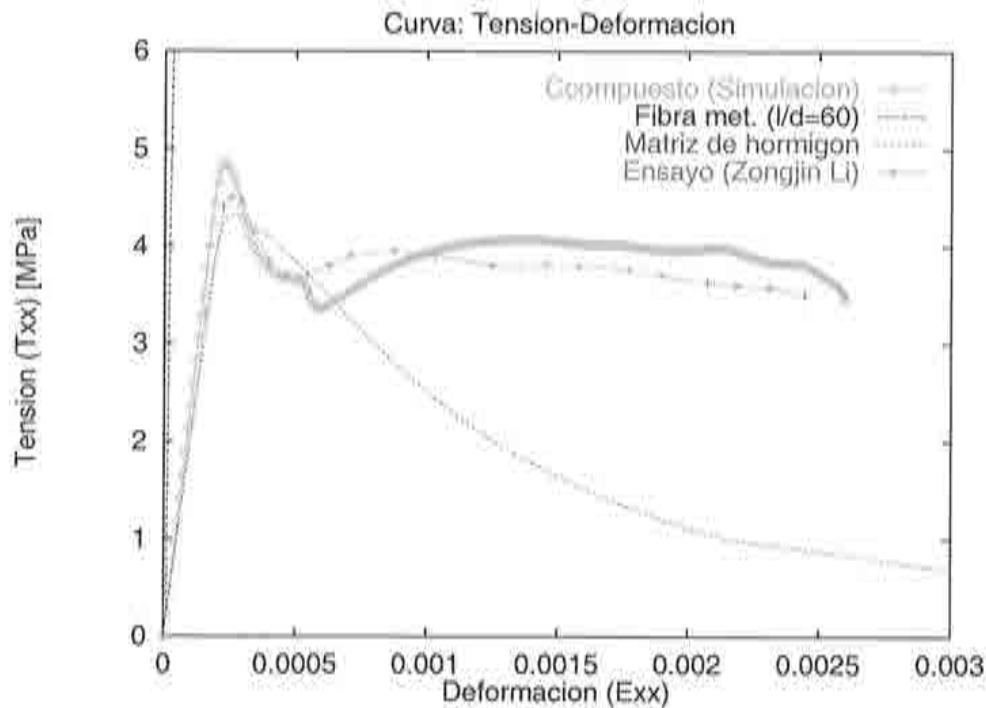


Figura 6.12: Curvas de tensión-deformación: (global) de la célula, fibra, matriz y ensayo experimental de un compuesto con fibras aleatorias.

la distribución periódica alineada en la dirección de la sollicitación favorece al comportamiento de la célula y además se considera adherencia perfecta. No obstante, se debe considerar también que el doblez en los extremos de la fibra real contribuye a mejorar el comportamiento del material compuesto ensayado. Por otra parte, aunque las fibras del ensayo tienen distribución aleatoria, la parte de la fibra que se encuentra justo en el lugar de la fractura, (por su esbeltez) tiende a alinearse en dirección perpendicular a la fractura, lo cual contribuye también a explicar el buen comportamiento del compuesto con distribución aleatoria de fibras. En cualquier caso, lo más importante de este método es que a través de la teoría de homogeneización se obtiene información acerca de los mecanismos que se generan a nivel microestructural, que es en donde se encuentra la explicación de dicho comportamiento. Con este propósito, se presenta los campos de las variables de tensiones y deformaciones que se producen bajo tres incrementos de carga diferentes. El primero corresponde cuando la celda se encuentra justo antes de lo que se conoce como *primera fractura*, véase la Figura 6.12 (cuando la deformación alcanza $\varepsilon_{xx}^e = 0.0002$, cada incremento se representa por una señal), después



Figura 6.13: Campos microscópicos generados en la célula bajo una deformación del compuesto de $\epsilon^x = (\epsilon_{xx}^x, \epsilon_{yy}^x, 2\epsilon_{xy}^x) = (0.0002, 0, 0)$ (incremento 20): Gráfico 1: Tensión σ_{xx} ; Gráfico 2: Tensión σ_{xy} ; Gráfico 3: Deformación ϵ_{xx} ; Gráfico 4: Deformación $2\epsilon_{xy}$.

6.3. REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS CORTAS 233

se analiza brevemente cuando ya se ha producido completamente la localización ($\varepsilon_{xx}^y = 0.0005$) y posteriormente cuando la célula sufre deformaciones mucho mayores pero mantiene su capacidad de carga ($\varepsilon_{xx}^x = 0.0020$).

En la Figura 6.13 se presenta cuatro gráficos que corresponden cuando la deformación global de la célula alcanza $\varepsilon^x = (\varepsilon_{xx}^x, \varepsilon_{yy}^x, 2\varepsilon_{xy}^x) = (0.0002, 0, 0)$ (incremento 20). Nuevamente, para apreciar mejor el resultado la escala vertical se amplió por un factor de 10. Como se puede constatar en la Figura 6.12, este incremento es justo antes que se produzca el cambio brusco de comportamiento, conocido como *primera fractura de la matriz*. Entonces, el Gráfico 1 representa el campo de tensiones σ_{xx} , en donde claramente se aprecia la concentración de esfuerzos en la fibra. En la Gráfico 2 se presenta el campo de tensiones cortantes σ_{xy} , los mayores valores se encuentran en la matriz junto a los extremos de la fibra. El Gráfico 3 indica el campo de deformaciones ε_{xx} , en éste se aprecia una localización de deformaciones en los extremos de la fibra, es decir se ha producido una pequeña fractura. Por consiguiente, se generan pequeñas fracturas en los extremos de la fibra a una deformación algo menor de lo que se conoce como primera fractura, cuando aparentemente el compuesto aún se comporta como un material elástico, sin embargo a nivel global este efecto tiene poca influencia; obsérvese además que la matriz cercana a la mitad de la fibra esta fuertemente comprometida. Finalmente en el Gráfico 4 se presenta el campo de deformaciones cortantes (ε_{xy}).

En los próximos incrementos de carga se produce la localización denominada *primera fractura*, el compuesto disminuye sensiblemente su capacidad de carga (véase la Figura 6.12), mientras se genera una redistribución de esfuerzos, tal como lo indica la Figura 6.14 que corresponde a una deformación global de $\varepsilon^x = (\varepsilon_{xx}^x, \varepsilon_{yy}^x, 2\varepsilon_{xy}^x) = (0.0005, 0, 0)$ (incremento 20); esto es, una deformación 2.5 veces mayor que la anterior. Nuevamente, el Gráfico 1 contiene el campo de tensiones σ_{xx} , como se aprecia las tensiones se han concentrado prácticamente en la parte central de la fibra. El Gráfico 2 presenta que los mayores esfuerzos de cortante se generan, ya no en la matriz cercana a los extremos de la fibra, sino en la matriz cerca al centro, esto explica las altas tensiones axiales en el centro de la fibra. El Gráfico 3 indica que la localización de las deformaciones de los extremos de la fibra se han extendido, además se ha generado una localización que pasa por el centro de la fibra. Considerando la periodicidad del material se puede observar que la localización en la banda central coincide con la localización del extremo de la célula vecina; de esta forma dicha localización representa claramente la forma en que fractura este material. Sin embargo, el compuesto se encuentra



Figura 6.14: Campos microscópicos generados en la célula bajo una deformación del compuesto de $\epsilon^x = (\epsilon_{xx}^x, \epsilon_{yy}^x, 2\epsilon_{xy}^x) = (0.0005, 0, 0)$ (incremento 50); Gráfico 1: Tensión σ_{xx} ; Gráfico 2: Tensión σ_{yy} ; Gráfico 3: Deformación ε_{xx} ; Gráfico 4: Deformación $2\varepsilon_{yy}$.

6.3. REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS CORTAS 235



Figura 6.15: Campos generados en la célula bajo una deformación del compuesto de $\epsilon^c = (\epsilon_{xx}^c, \epsilon_{yy}^c, 2\epsilon_{xy}^c) = (0.0020, 0, 0)$ (incremento 450). Gráfico 1: Tensión σ_{xx} ; Gráfico 2: Tensión σ_{xy} ; Gráfico 3: Deformación ε_{xx} ; Gráfico 4: Deformación $2\varepsilon_{xy}$.

aún lejos del colapso. Finalmente, el Gráfico 4 indica que las mayores deformaciones por cortante se producen en la matriz cerca del centro de la fibra.

Posteriormente, el compuesto es capaz de soportar deformaciones mayores manteniendo la capacidad de carga, mientras tanto las fisuras siguen ensanchándose. La explicación de dicho comportamiento se puede obtener de la Figura 6.15, la cual corresponde a la célula del compuesto cuando alcanza una deformación global de $\epsilon^x = (\epsilon_{xx}^x, \epsilon_{yy}^x, 2\epsilon_{xy}^x) = (0.0020, 0, 0)$ (incremento 450); es decir, una deformación 10 veces mayor a la deformación que se produce la primera fractura (véase la Figura 6.12). Obsérvese que en el campo de tensiones σ_{xx} (Gráfico 1) gran parte de la longitud de la fibra se encuentran con tensiones altas. Nótese en el gráfico de las tensiones cortantes σ_{xy} (Gráfico 2) que los mayores valores se han trasladado (paulatinamente) desde el centro hacia los extremos de la fibra. El gráfico de deformaciones ϵ_{xx} (Gráfico 3) indica una mayor localización o abertura de las grietas, aunque estas se han concentrado sobretodo en el extremo izquierdo. Finalmente el gráfico de deformaciones cortantes (Gráfico 4) presenta que se han generado grandes deformaciones por cortante en la matriz a lo largo de la fibra. Todo esto indica que la matriz falla por esfuerzos de cortante desde el centro de la fibra hacia los extremos. En el instante que presenta la Figura 6.15 los esfuerzos se transmite a la fibra a lo largo de ésta, pero sobre todo a través de la matriz cercana a sus extremos, cuando ésta falla por completo se produce el despegue entre la matriz y fibra, que es el colapso total del material.

6.3.5 Compuesto de matriz de hormigón con el 6% de fibras

En el siguiente ejemplo, los materiales componentes tienen las mismas características que el problema anterior, véase la Tabla 6.5. Sin embargo, en este caso se utiliza un refuerzo cuyo porcentaje en volumen de fibras cortas es de 6%. En la representación numérica se considera que las fibras tienen distribución periódica y como se mencionó, la longitud de las fibras es de 30 mm y su diámetro de 5 mm. Las dimensiones determinadas para la célula se presenta en la Tabla 6.7.

El comportamiento de la fibra se representó mediante una ecuación constitutiva elastoplástica isotrópica que obedece el criterio de von Mises. En cambio, el comportamiento de la matriz de cemento se modeló mediante una ecuación constitutiva de degradación isotrópica (Oliver *et al.*, 1990), tal como se presenta en el Apéndice B. La célula se discretiza en 110 elementos cuadriláteros lineales. Se considera la hipótesis de tensión plana y adherencia

6.3. REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS CORTAS 237

Coef. Volum. de fibra (c_f)	Coef. Volum. de matriz (c_m)	Separación de fibras (s) [mm]	Longitud de célula (l_c) [mm]	Alto de célula (h_c) [mm]	Alto equiv. de fibra (h_f) [mm]
0.06	0.94	3	33	1.7248	0.113838

Tabla 6.7: Dimensiones de la célula de un compuesto formado por una matriz de hormigón y con el 6% de fibras.

perfecta entre materiales componentes. La sollicitación aplicada es una deformación incremental en la dirección longitudinal a la fibra (Eje xx).

En la Figura 6.16 se presenta la curva del comportamiento tensión-deformación obtenido para el compuesto a través de la célula y las curvas tensión-deformación de los materiales componentes. También se presenta el resultado de un ensayo experimental (Li *et al.*, 1998) de tracción simple de un compuesto, cuyos componentes tiene iguales propiedades, pero con una distribución de fibras aleatoria y además, las fibras del ensayo experimental tiene dobleces en los extremos. Obsérvese que tanto la simulación numérica como el compuesto del ensayo presentan, después del tramo elástico, una marcada ganancia de resistencia con respecto al hormigón, en dicho proceso se genera múltiples fracturas (*"multiple cracking"*). En este caso existe una mayor rigidez en el modelo numérico en comparación con el compuesto del ensayo, en cambio dicho material (del ensayo) presenta mucha mayor ductilidad. Esta diferencia de comportamiento entre el ensayo y el modelo numérico está relacionado principalmente con la diferencia que existe en la distribución de las fibras y al despegue entre componentes.

Como en el caso anterior, se presenta los campos de las variables que se generan en la celda en tres incrementos de carga diferentes, con el propósito de explicar el comportamiento de estos compuestos. En la Figura 6.17 (Nuevamente se amplió la escala vertical por un factor de 10) se presenta cuatro gráficos, los cuales corresponden al incremento número 20, cuando la deformación global de la célula alcanza $\epsilon^x = (\epsilon_{xx}^x, \epsilon_{yy}^y, 2\epsilon_{xy}^x) = (0.0002, 0, 0)$. Obsérvese en la curva tensión-deformación de la célula (Figura 6.16) que en este incremento (cada incremento se representa por una señal) ya se aprecia un cambio de comportamiento a nivel global de la célula. Entonces, en el Gráfico 1 se presenta el campo de tensiones σ_{xx} , en éste se aprecia una concentración de esfuerzos en la fibra, principalmente en su centro. En el Gráfico 2 se indica el campo de tensiones cortantes (σ_{xy}), los mayores valores

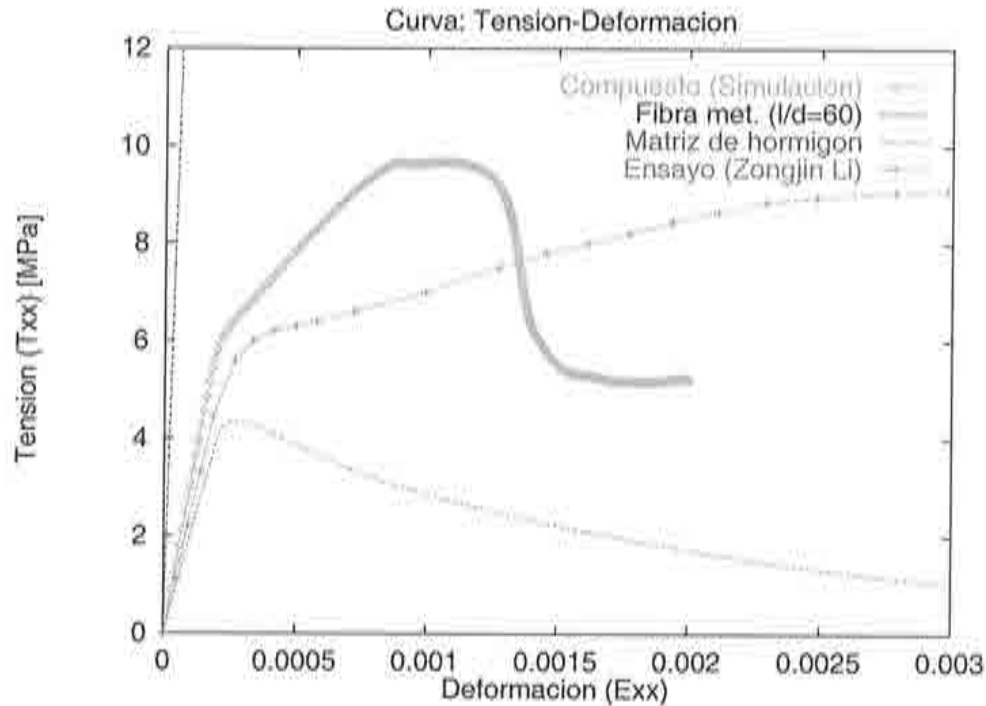


Figura 6.16: Curvas tensión-deformación: de la célula, de los materiales componentes y de un ensayo experimental.

se encuentran en la matriz junto a los extremos de la fibra, pero también hay valores importantes cerca del centro de la célula, por lo que se entiende que se ha producido un cierto grado de redistribución de esfuerzos. El Gráfico 3 presenta el campo de deformaciones ε_{xx} , el cual indica que se ha generado ya la localización de deformaciones en los extremos de la fibra y también empieza a formarse una en el centro. Sin embargo, como lo presenta la curva tensión-deformación de la celda (Figura 6.16), el compuesto aunque cambia de comportamiento, no disminuye su capacidad de carga, mas bien inicia el proceso de *múltiple fractura*. Finalmente el Gráfico 4 indica el campo de deformaciones cortantes ($2\varepsilon_{xy}$).

En los siguientes incrementos el compuesto continúa aumentando su capacidad de carga, mientras se genera un proceso de redistribución de esfuerzos. Dicho proceso se produce de la siguiente manera: en primer lugar los mayores esfuerzos pasan de la zona de los extremos de la fibra al centro, luego los mayores esfuerzos se desplazan de forma continua siguiendo la dirección contraria, es decir desde el centro hacia los extremos. Por

6.3. REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS CORTAS 239

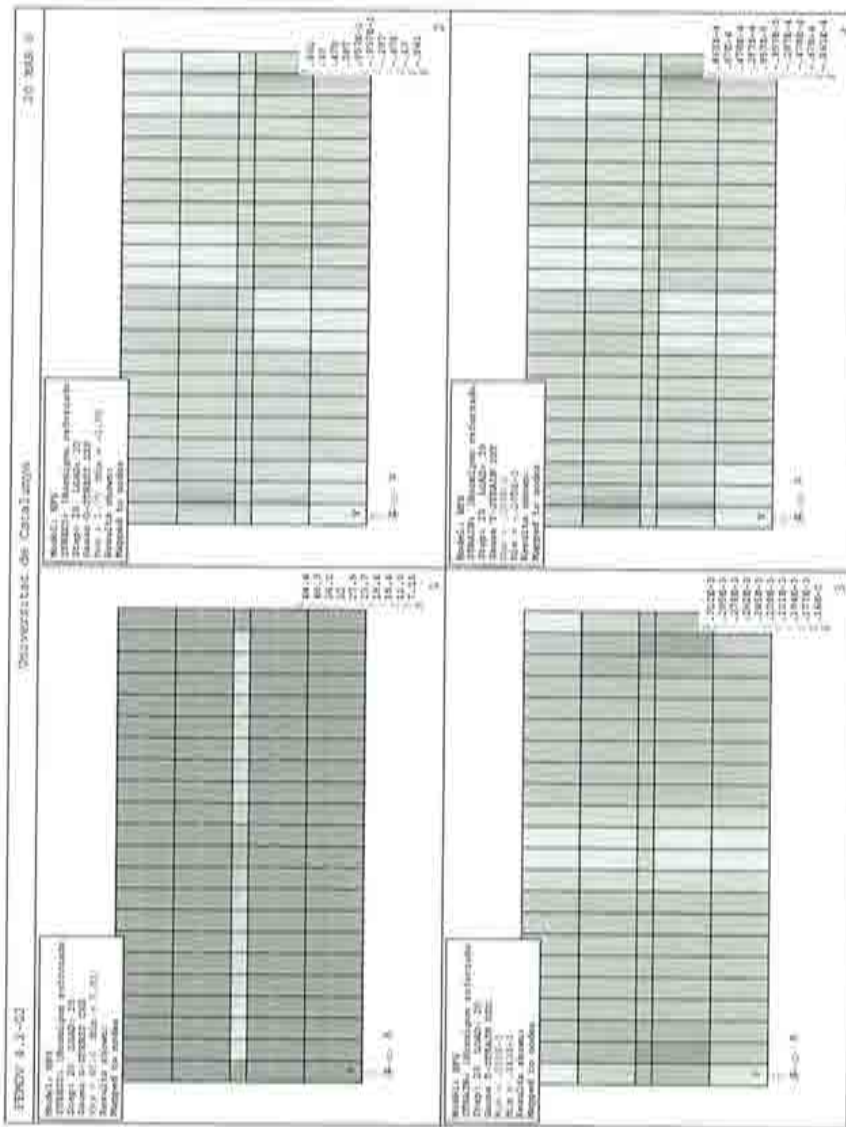


Figura 6.17: Campos microscópicos generados en la célula bajo una deformación del compuesto de $\epsilon^a = (\epsilon_{xx}^a, \epsilon_{yy}^a, 2\epsilon_{xy}^a) = (0.0002, 0, 0)$ (incremento 20): Gráfico 1: Tensión σ_{xx} ; Gráfico 2: Tensión σ_{yy} ; Gráfico 3: Deformación ϵ_{xx} ; Gráfico 4: Deformación $2\epsilon_{xy}$.

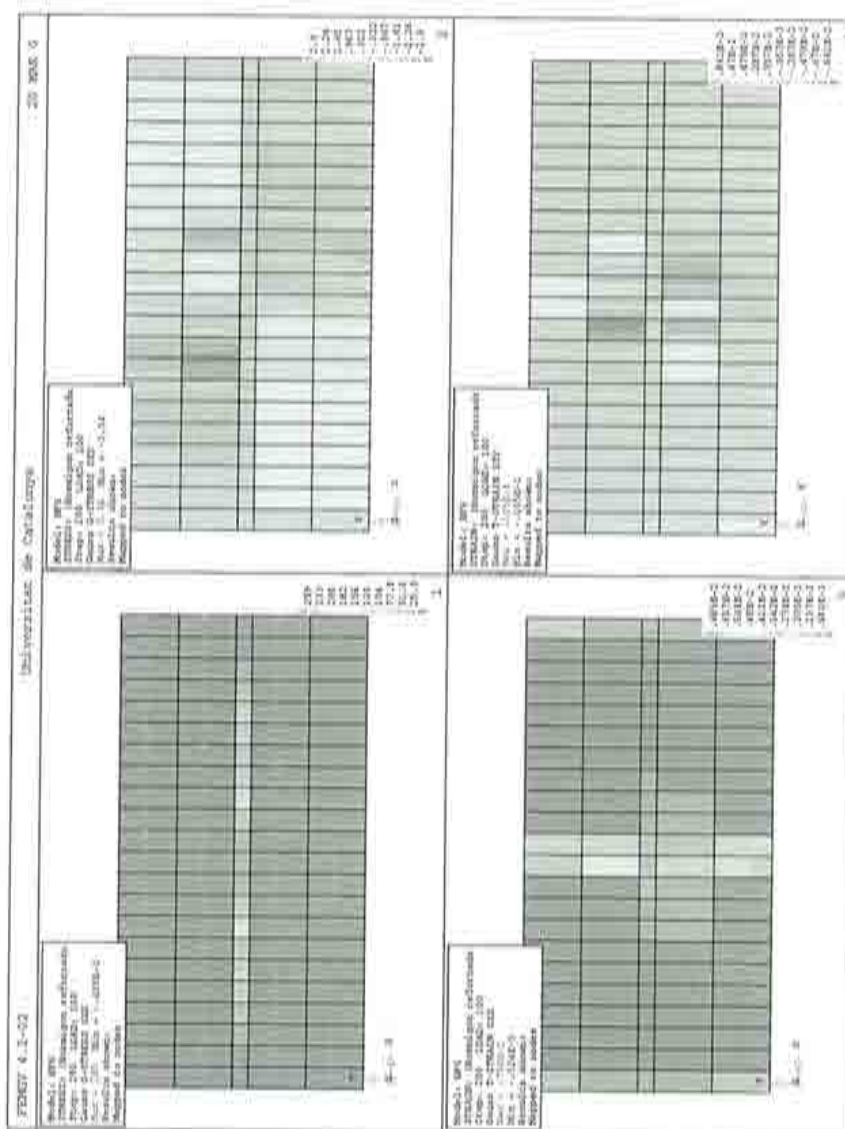


Figura 6.18: Campos generados en el incremento 150, en donde la deformación global de la célula es de $\boldsymbol{\epsilon}^x = (\epsilon_{xx}^x, \epsilon_{yy}^x, \epsilon_{xy}^x) = (0.0010, 0, 0)$. Entonces: Gráfico 1: Tensión σ_{xx} ; Gráfico 2: Tensión σ_{xy} ; Gráfico 3: Deformación ϵ_{xx} ; Gráfico 4: Deformación $2\epsilon_{xy}$.

6.3. REPRESENTACIÓN LONGITUDINAL DE COMPUESTOS CON FIBRAS CORTAS 241

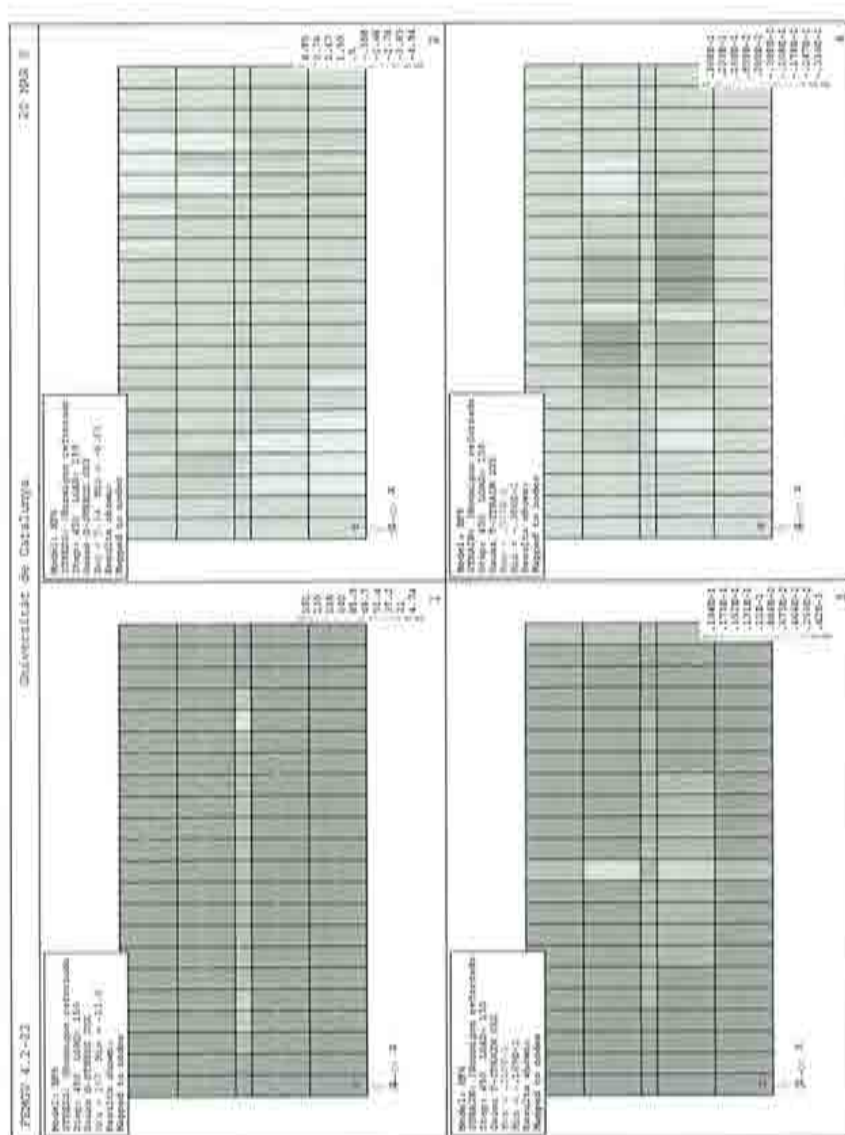


Figura 6.19: Campos generados en la celda bajo una deformación del compuesto de $e^p = (\varepsilon_{xx}^p, \varepsilon_{yy}^p, 2\varepsilon_{xy}^p) = (0.0015, 0, 0)$ (incremento 450). Gráfico 1: Tensión σ_{xx} ; Gráfico 2: Tensión σ_{xy} ; Gráfico 3: Deformación ε_{xx} ; Gráfico 4: Deformación $2\varepsilon_{xy}$.

ejemplo, la Figura 6.18 corresponde a una deformación del compuesto de $\boldsymbol{\varepsilon}^x = (\varepsilon_{xx}^x, \varepsilon_{yy}^x, 2\varepsilon_{xy}^x) = (0.0010, 0, 0)$, es decir, 5 veces la deformación anterior. El campo de tensiones σ_{xx} (Gráfico 1) indica que los mayores valores de los esfuerzos se producen en la parte central de la fibra. En el Gráfico 2 se puede ver como los mayores esfuerzos de cortante se generan en la matriz cerca del centro. En este caso, conforme se incrementa la sollicitación, la redistribución que se genera desplaza los mayores valores (de deformación cortante) desde la matriz que rodea al centro de la fibra hacia la matriz que rodea los extremos de la fibra. El Gráfico 3 indica que la localización de las deformaciones se concentra en los elementos de un extremo, mientras que en el otro se produce una descarga elástica; algo similar ocurre en la localización del centro. Finalmente, el Gráfico 4 presenta el campo de deformaciones cortantes. Nótese que se está produciendo una falla por cortante en la matriz alrededor del centro de la fibra y empieza a extenderse a lo largo de ésta.

Obsérvese en la curva tensión-deformación obtenida de la celda (Figura 6.16) que en los siguientes incrementos se mantiene esta capacidad de carga para después disminuir sensiblemente. Dicho proceso se estabiliza cuando alcanza una deformación de $\boldsymbol{\varepsilon}^x = (\varepsilon_{xx}^x, \varepsilon_{yy}^x, \varepsilon_{xy}^x) = (0.0015, 0, 0)$ (incremento 450). En la Figura 6.19 se presenta los campos de las variables para esta deformación. El campo de tensiones σ_{xx} (Gráfico 1) indica que gran parte de la fibra soporta tensiones altas. El gráfico de las tensiones cortantes σ_{xy} (Gráfico 2) presenta que los mayores esfuerzos se encuentran cerca de los extremos de la fibra. El gráfico de deformaciones ε_{xx} (Gráfico 3) indica una mayor localización de las fisuras principales (centro y extremo), pero también hay deformaciones importantes en el resto de la celda, estas generan la aparición de gran cantidad de pequeñas fracturas. Por último el gráfico de deformaciones cortantes (Gráfico 4) indica que se han producido grandes deformaciones en la matriz a lo largo de la fibra. En los próximos incrementos de carga, el compuesto mantiene esta capacidad de carga. Nuevamente, la matriz falla por esfuerzo de cortante desde el centro de la fibra hacia los extremos.

6.4 COMPORTAMIENTO TRANSVERSAL DEL COMPUESTO FIBRA-MATRIZ

En este apartado se obtiene el comportamiento transversal (a las fibras) de compuestos reforzados con fibras continuas. En la literatura sobre el tema se pueden encontrar varios artículos, presentados en la última década, que abordan este problema mediante la teoría de homogeneización, véase por ejemplo (Jansson, 1992) (Dvorak *et al.*, 1994) (Aravas *et al.*, 1995) (Ghosh *et al.*, 1996) (Michel *et al.*, 1999) en donde cada una de estas publicaciones utilizan métodos distintos. Para validar el método propuesto se estudia el compuesto que se presenta en dos de las referencias citadas (Jansson, 1992) (Ghosh *et al.*, 1996). En este caso, el material que se desea representar es una matriz metálica reforzada con fibras unidireccionales colocadas en dirección perpendicular al plano. Jansson analiza dos distribuciones periódicas usualmente utilizadas para caracterizar a estos compuestos. La primera distribución

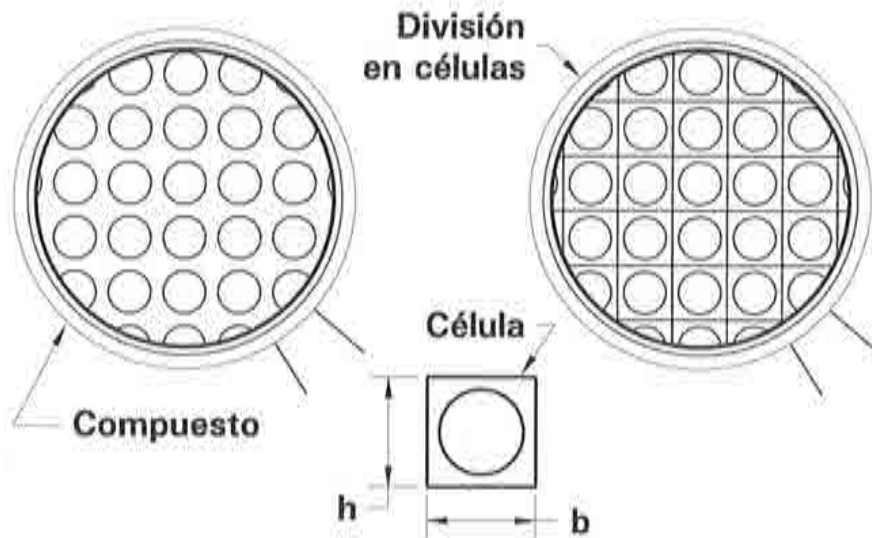


Figura 6.20; División del compuesto de disposición cuadrado en células cuadriláteras.

se denomina *disposición cuadrada*, en ésta las fibras son distribuidas en dos direcciones ortogonales formando filas y columnas, tal como se indica en la parte izquierda de la Figura 6.20; en la parte derecha se presenta la división de este material en células cuadriláteras. Por otro lado, la segunda distribución de las fibras dentro del compuesto se denomina *disposición hexagonal*. Esta distribución y una posible división en celdas (que utiliza Jansson), se

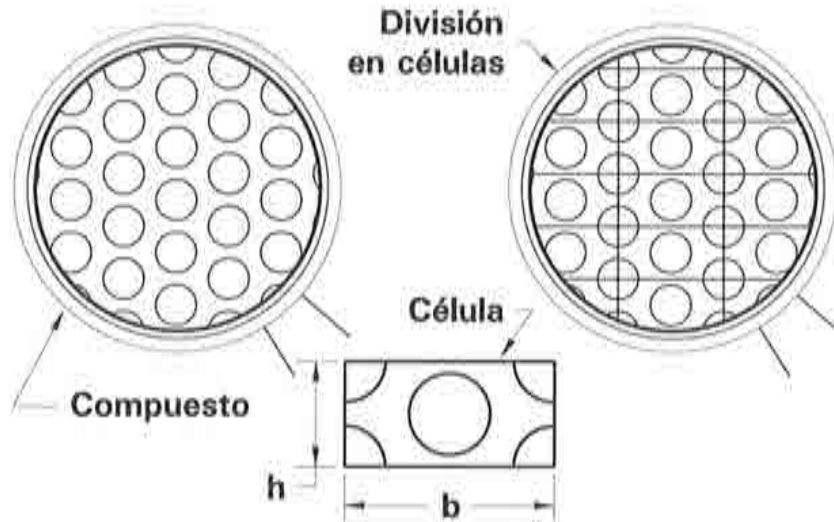


Figura 6.21: División del compuesto de disposición hexagonal en células cuadriláteras.

presenta en la Figura 6.21.

En el estudio realizado por Jansson se utiliza la teoría de la expansión asintótica. Las condiciones de contorno del problema buscan simular un ensayo a tracción simple del compuesto. Es decir, se impone una deformación global a la célula en una dirección (ε_{xx}^x) y se busca que la tensión homogeneizada (o total de la celda) en la dirección ortogonal (σ_{yy}^y) sea nula. En este caso, se supone deformación plana en dirección longitudinal a las fibras.

COMPUESTO (disposición)	FIG. (núm.)	CELULA (Clase)	C. VOL. (c_f)	Diam.F. [μm]	b [μm]	h [μm]
Cuadrada	6.20	Cuadrilátera	0.55	10.0	11.9499	11.9499
Hexagonal	6.21	Cuadrilátera	0.55	10.0	22.2412	12.8410
Hexagonal	6.22	Hexagonal	0.55	10.0	11.1206	12.8410

Tabla 6.8: Clase de células utilizadas y dimensiones.

Otra posibilidad de representar una célula para este compuesto se indica en la Figura 6.22. Naturalmente, las dos alternativas son válidas y deben conducir a los mismos resultados. En este caso la célula de la Figura 6.21 corresponde al tipo de células cuadriláteras. Por el contrario, la célula de

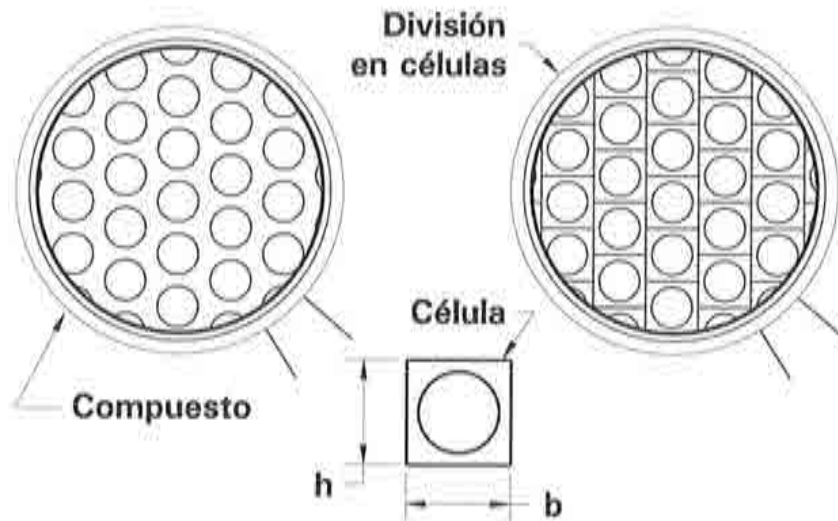


Figura 6.22: División del compuesto de disposición hexagonal en células hexagonales.

la Figura 6.22, aunque tiene forma rectangular, corresponde al tipo de celda hexagonal, puesto que presenta 6 caras periódicas.

El material compuesto (FT/AL) está formado por fibras de mineral de alumina embebidas en una matriz de aluminio. La unión entre estos materiales tiene una elevada resistencia, por lo que es usual considerar adherencia perfecta entre estos componentes. Las proporciones en volumen de matriz y de fibras son respectivamente 55% y 45%. Las dimensiones de las diferentes células se obtubieron suponiendo que el diámetro de la fibras es de $10 \mu\text{m}$ y se indican en la Tabla 6.8. La fibra es muy resistente, razón por la cual se considera que su comportamiento es únicamente elástico. En cambio, el comportamiento de la matriz se obtiene a través de una ecuación constitutiva elasto-plástica isótropa que obedece el criterio de von Mises (Simo & Hughes, 1998). La formulación de esta ecuación se presenta en el Apéndice C. Las propiedades elásticas de los componentes se indican en la Tabla 6.9. La expresión del endurecimiento utilizado es una combinación de endurecimiento cinemático lineal y endurecimiento isótropo del tipo exponencial. La expresión es: $\tilde{K}(\alpha) = \sigma^o + \alpha H + (\sigma^\infty - \sigma^o)(1 - \exp(-\delta\alpha))$. En donde, H (endurecimiento cinemático) es igual a 1000 MPa . La diferencia entre la tensión de saturación y la tensión de fluencia ($\sigma^\infty - \sigma^o$) es 30 MPa y la velocidad de saturación (δ) es 300.

MATERIAL COMPONENTE	MOD. ELASTICO E_{mod} [MPa]	COEF. POISSON ν	UMB. FLUENCIA σ^u [MPa]
MATRIZ	68900.0	0.32	94.0
FIBRAS	344500.0	0.26	---

Tabla 6.9: Propiedades elásticas de los componentes

Un problema que debe ser tomado en cuenta (en este ejemplo) es el bloqueo numérico de la solución. Este problema se origina porque en la matriz se produce un estado de cuasi-incompresibilidad. Para evitarlo, Jansson utiliza elementos isoparamétricos de 9 nodos con integración reducida selectiva, los cuales determinan la componente hidrostática de tensiones mediante una cuadratura de 2×2 puntos de integración y para la componente desviadora una cuadratura de 3×3 puntos de integración. En cambio, en este trabajo se implementó el método *B-bar* (Simo *et al.*, 1985) (Hughes, 1987) (Zienkiewicz & Taylor, 1994a) (Valverde, 1995) (Simo & Hughes, 1998). Este método se basa en la formulación mixta (del Método de los Elementos Finitos) en tres campos: desplazamientos, tensiones y deformaciones. El método considera campos de tensiones y deformaciones discontinuos entre elementos. Su implementación se consigue mediante la modificación de la matriz de las derivadas de las funciones de forma o matriz \mathbf{B} de los elementos finitos. Si se utilizan elementos (cuadriláteros lineales) isoparamétricos de 4 nodos (2×2 puntos de integración), la parte volumétrica de la matriz \mathbf{B} se evalúa como un valor promedio constante en el elemento, mientras que la evaluación de la parte desviadora se realiza de la forma estándar.

En primer lugar se estudia el compuesto con disposición hexagonal. Para lo cual, a la celda de este compuesto se aplica una deformación horizontal (Eje xx) total de $\varepsilon_{xx}^x = 0.01$ en 100 incrementos. El valor de la deformación en el sentido ortogonal ε_{yy}^x no se encuentra restringido, más bien (como se mencionó) es la tensión homogeneizada σ_{yy}^x la que debe ser nula. Los resultados obtenidos de las curvas tensión-deformación (deformación plana), tanto para los materiales componentes como el comportamiento del compuesto evaluado a través del dominio representativo, se presenta en la Figura 6.23. Obsérvese que el comportamiento de la fibra es sumamente rígido y se encuentra definido por sus propiedades elásticas. En cambio, la matriz fluye en deformación plana aproximadamente a 106 MPa (en estado uniaxial a 94 MPa) y como se indicó, el endurecimiento es similar al comportamiento de la matriz de la referencia citada (Jansson, 1992). Ahora bien, para obtener el comportamiento del compuesto se realizaron dos simulaciones numéricas, en

6.4. COMPORTAMIENTO TRANSVERSAL DEL COMPUESTO FIBRA-MATRIZ247

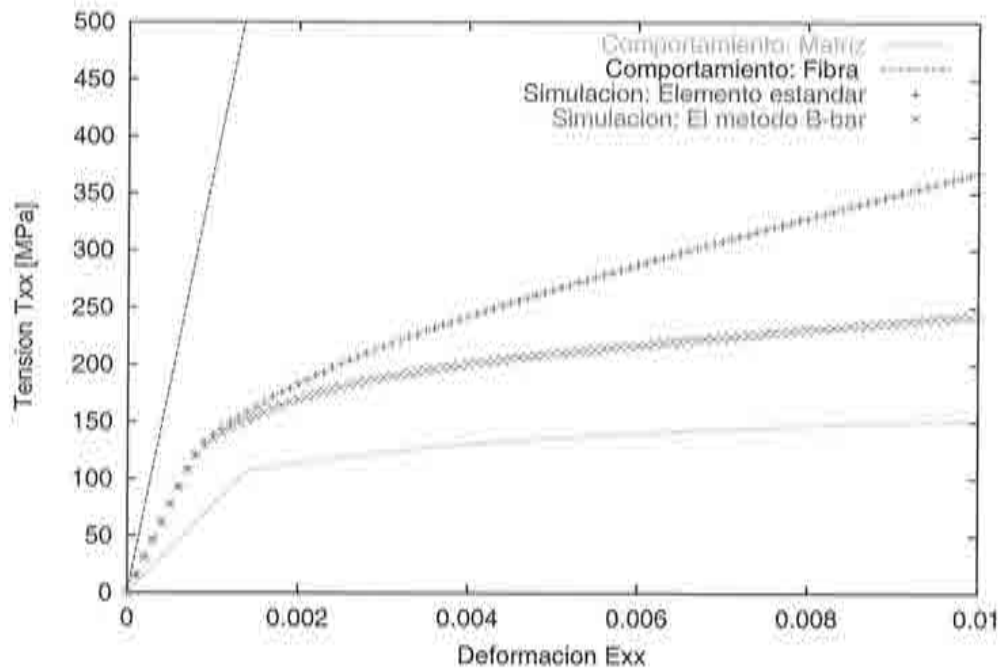


Figura 6.23: Curvas de comportamiento: tensión - deformación de los materiales componentes (fibra y matriz) y de la celda mediante el elemento estándar y el método B-bar.

la primera de estas simulaciones los elementos de la célula corresponden al elemento lineal cuadrilátero (de 4 nodos) estándar. En la segunda simulación numérica se utiliza el mismo elemento pero modificados por el *método B-bar*. Los valores de las tensiones homogeneizadas obtenidas en dichas simulaciones presentan sustanciales diferencias. Específicamente, como lo indica la Figura 6.23, el elemento estándar genera, dentro del rango no lineal, un exceso de rigidez por el efecto de bloqueo numérico, desvirtuando significativamente el resultado.

Los campos microscópicos obtenidos para el incremento 100 (método B-bar) mediante la celda que utiliza Jansson se presenta en la Figura 6.24. Esta figura se encuentra dividida en 4 gráficos. El Gráfico 1 indica los desplazamientos que se producen en la malla. Obsérvese que en este caso, la condición de periodicidad exige que el contorno de la célula sufra un desplazamiento uniforme, sin embargo esto no es frecuente. El Gráfico 2 corresponde a las tensiones de von Mises, el Gráfico 3 presenta el campo de deformaciones ϵ_{xx} ,

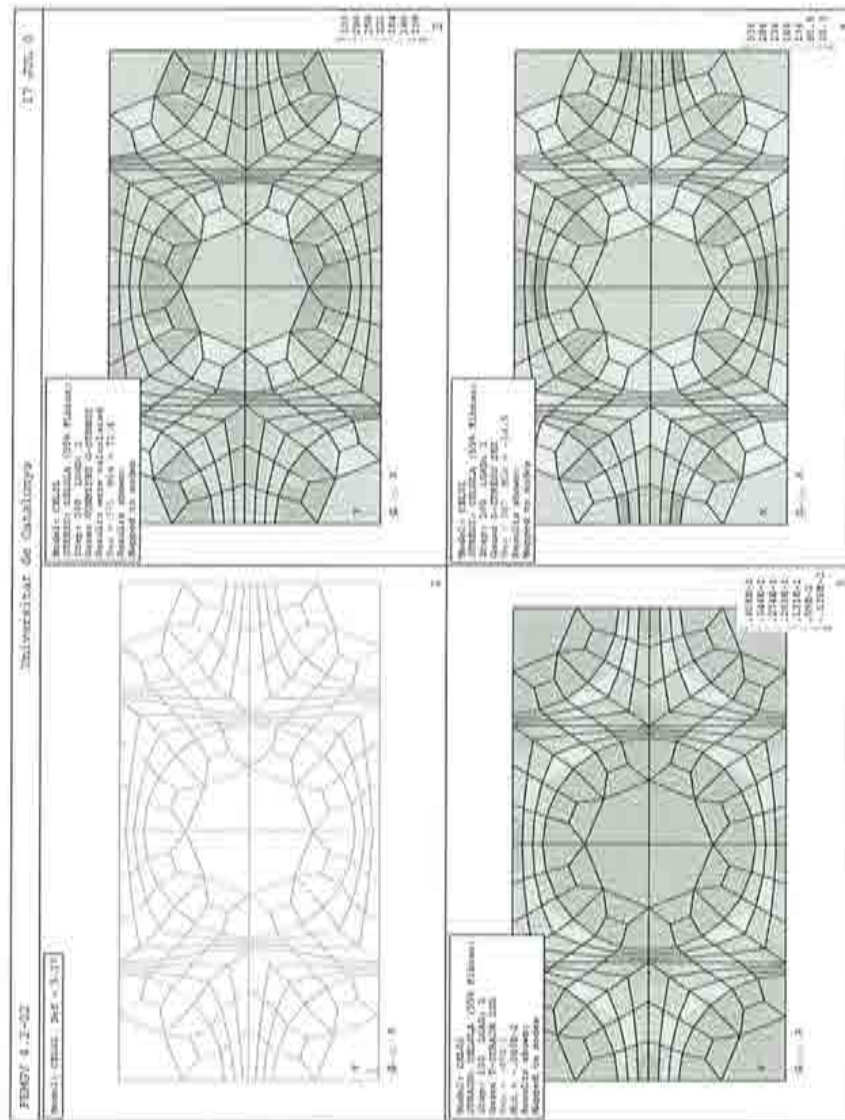


Figura 6.24: Solución en la microestructura, para el incremento 100: Gráfico 1 Deformación de la malla; Gráfico 2 Tensiones de von Mises; Gráfico 3 Deformación ϵ_{xx} ; Gráfico 4 Tensión σ_{xx} .

6.4. COMPORTAMIENTO TRANSVERSAL DEL COMPUESTO FIBRA-MATRIZ249

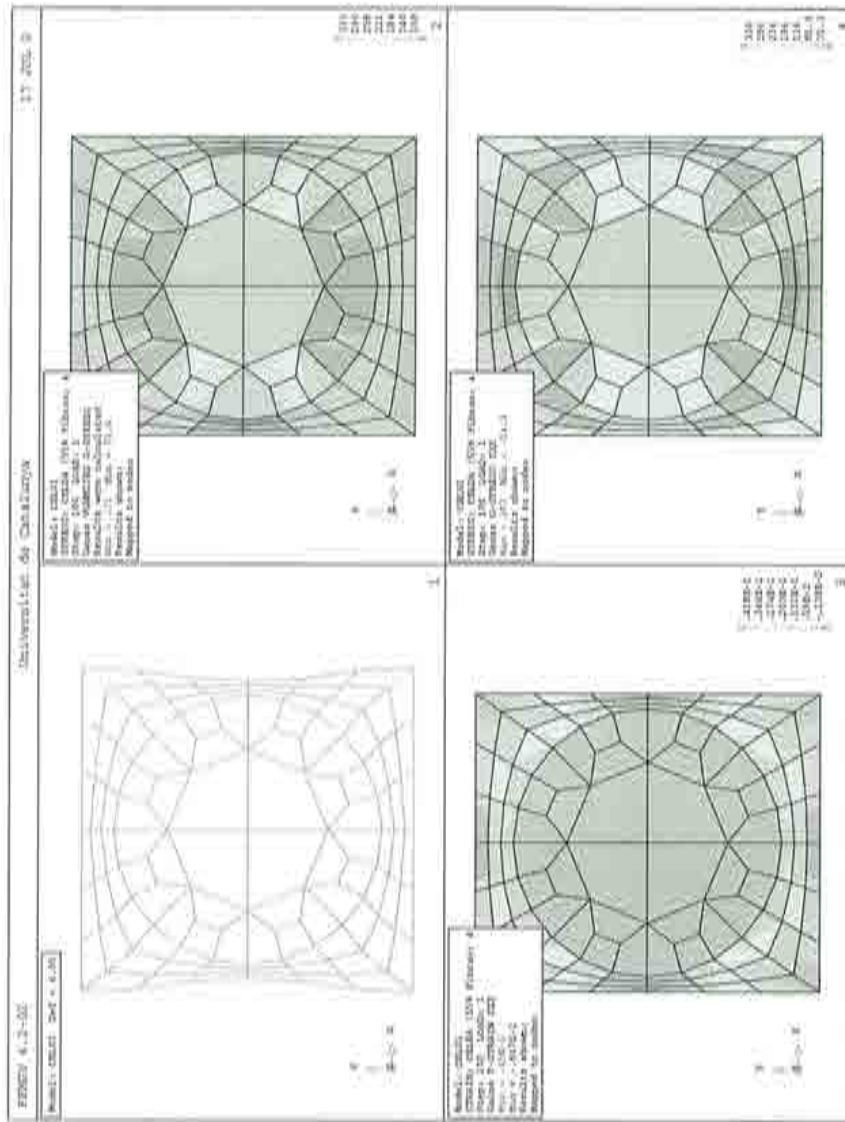


Figura 6.25: Solución en la microestructura, para el incremento 100: Gráfico 1 Deformación de la malla; Gráfico 2 Tensiones de von Mises; Gráfico 3 Deformación ϵ_{xx} ; Gráfico 4 Tensión σ_{xx} .

el Gráfico 4 presenta las tensiones σ_{xx} . La solución de este problema con la célula hexagonal (indicada en la Figura 6.22) se presenta en la Figura 6.25. En dicha figura, cada uno de los gráficos representa las mismas magnitudes que en la Figura 6.24. Nótese que los campos generados por las dos diferentes células, tanto para las deformaciones como las tensiones, son exactamente iguales. Naturalmente, con esta última célula el costo computacional es mucho menor. El tensor constitutivo elástico homogeneizado determinado por el código es el siguiente:

$$C^x = \begin{bmatrix} 185831 & 76178 & 0 \\ 76178 & 185436 & 0 \\ 0 & 0 & 54621 \end{bmatrix}$$

Este ejemplo también se solucionó con elementos cuadráticos de ocho nodos, con los que se obtiene una mejor aproximación (aunque aumenta el costo computacional). En este caso, además de evaluar el comportamiento de los materiales componentes en más puntos de integración, se describe mejor tanto la geometría de la fibra, como las condiciones de contorno. Los resultados obtenidos se presentan en la Figura 6.26. Por otra parte, el tensor constitutivo homogeneizado elástico determinado por el algoritmo es el siguiente:

$$C^x = \begin{bmatrix} 186779 & 76919 & 0 \\ 76919 & 186770 & 0 \\ 0 & 0 & 54928 \end{bmatrix}$$

Cuando se utiliza el elemento cuadrático de 8 nodos, también implementado mediante el método *B-bar*, se observa que la curva obtenida es algo menos rígida que con el elemento lineal de 4 nodos, esta pequeña diferencia se debe (además de las razones ya indicadas) a que el efecto de bloqueo con el elemento de 4 nodos no se soluciona completamente. De cualquier manera, el resultado concuerda bastante bien con el obtenido por Jansson, en especial cuando se utiliza elementos cuadráticos. Véase la figura 6.27. En el trabajo publicado por (Ghosh *et al.*, 1996) se presenta los resultados obtenidos para este ejemplo por dos métodos, uno a través del *método con elementos finitos Voronoi* y otro mediante un código de elementos finitos basado en el trabajo de (Guedes & Kikuchi, 1990). La curva tensión deformación para el compuesto con disposición hexagonal obtenida por Ghosh concuerdan también con el presentado en este trabajo.

Por otra parte, Jansson obtiene el comportamiento del compuesto con disposición cuadrada. Ghosh además de éste, obtiene también el comportamiento del compuesto cuando presenta una disposición cuadrada girada un

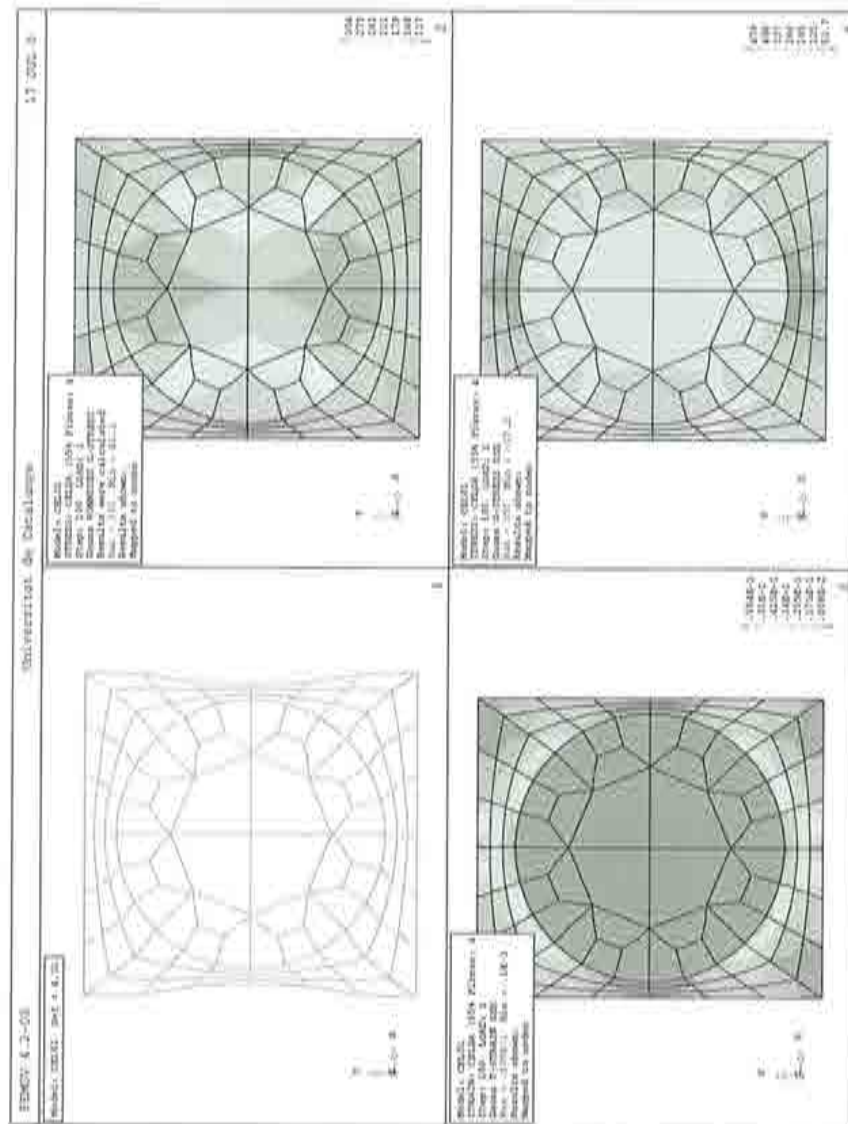


Figura 6.26: Solución en la microestructura, para el incremento 100: Gráfico 1 Deformación de la malla; Gráfico 2 Tensiones de von Mises; Gráfico 3 Deformación ϵ_{xx} ; Gráfico 4 Tensión σ_{xx} .

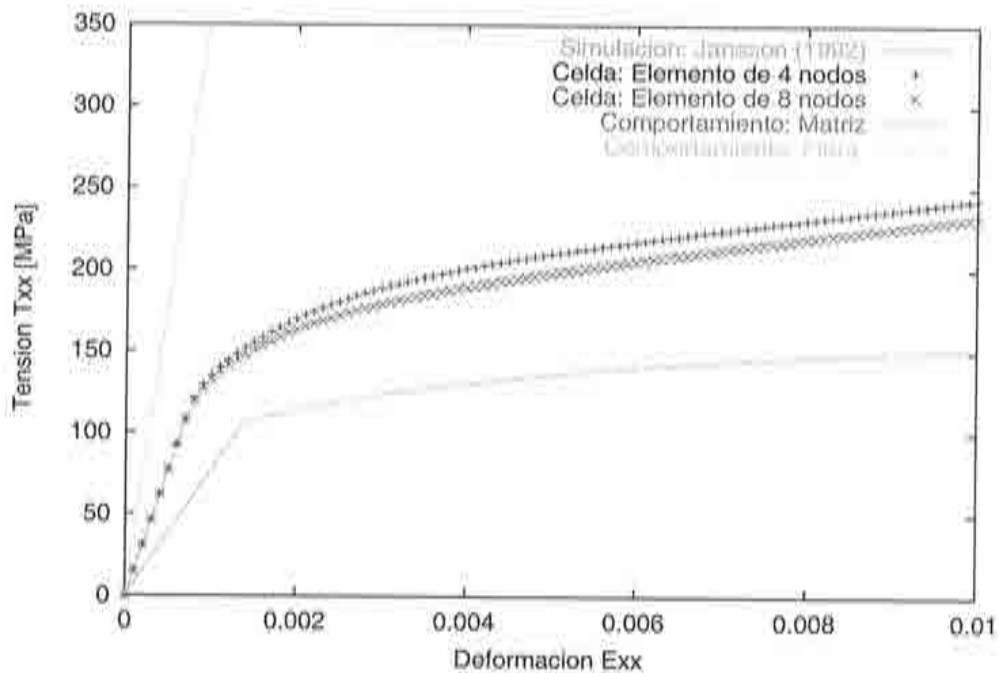


Figura 6.27: Comparación entre las curvas de comportamiento tensión-deformación obtenidas para el compuesto.

ángulo de 45 grados con respecto a la dirección de la sollicitación. Los campos microestructurales obtenidos con el método propuesto, cuando se utiliza la célula con disposición cuadrada (discretizada en elementos cuadriláteros lineales y con el método \bar{B}), se presentan en la Figura 6.28 y cuando esta celda se encuentra girada 45 grados se presenta en la Figura 6.29. Al igual que en el caso anterior, estas figuras se encuentran divididas en cuatro gráficos. El Gráfico 1 indica los desplazamientos que se producen en la malla. El Gráfico 2 corresponde a las tensiones de von Mises, el Gráfico 3 presenta el campo de deformaciones ε_{xx} , el Gráfico 4 presenta las tensiones σ_{xx} . Obsérvese que los campos generados por las dos celdas son distintos.

Las curvas tensión-deformación obtenidas para los materiales componentes y las dos celdas (una girada 0 grados y la otra 45 grados) se presentan en la Figura 6.30. Se presenta además, los resultados obtenidos por Ghosh³

³Los resultados de Ghosh presentados en esta monografía corresponden a los determinados por este autor con una celda unidad (y no con el MEFV), estos resultados fueron utilizados para verificar la validez del MEFV. La celda unidad fue discretizada con una

6.4. COMPORTAMIENTO TRANSVERSAL DEL COMPUESTO FIBRA-MATRIZ253

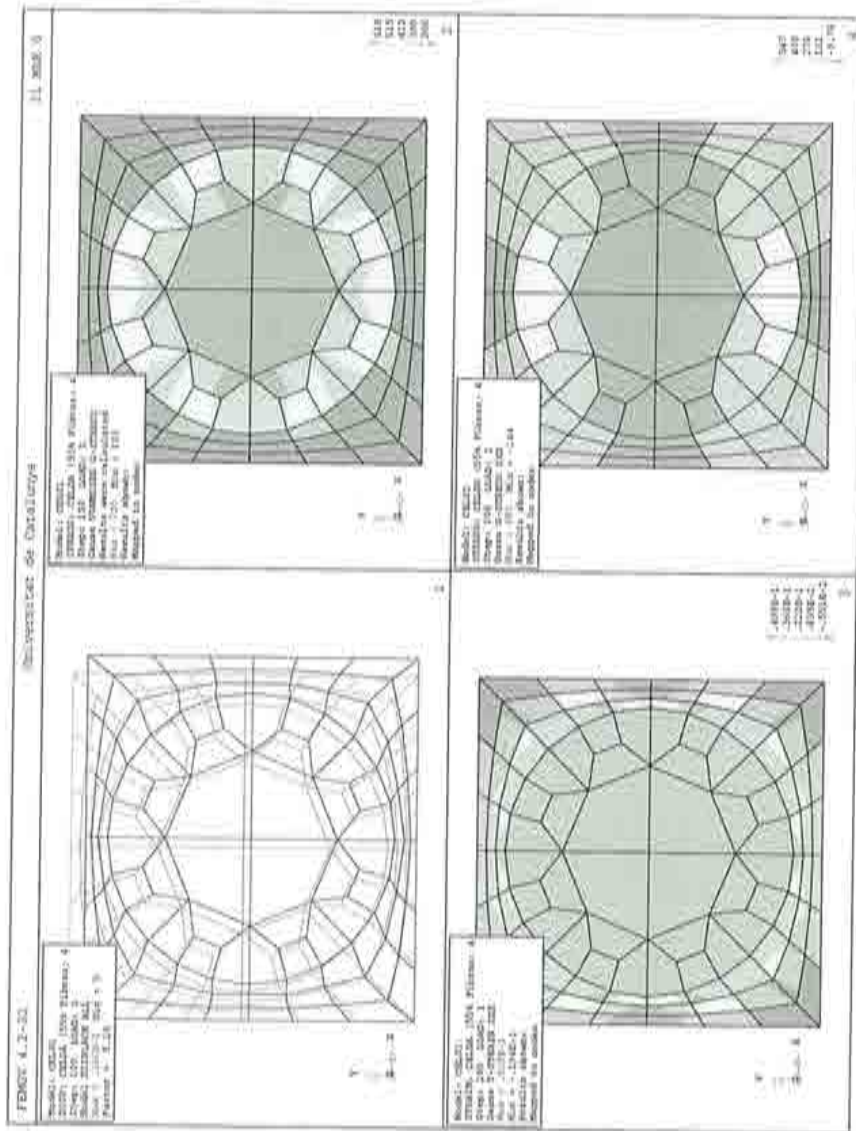


Figura 6.28: Solución en la microestructura, para el incremento 100. Célula del disposición cuadrada (rotación 0 grados): 1 Desplazamiento de la malla, 2 tensiones de von Mises, 3 deformación ϵ_{xx} , 4 tensión σ_{xx} .

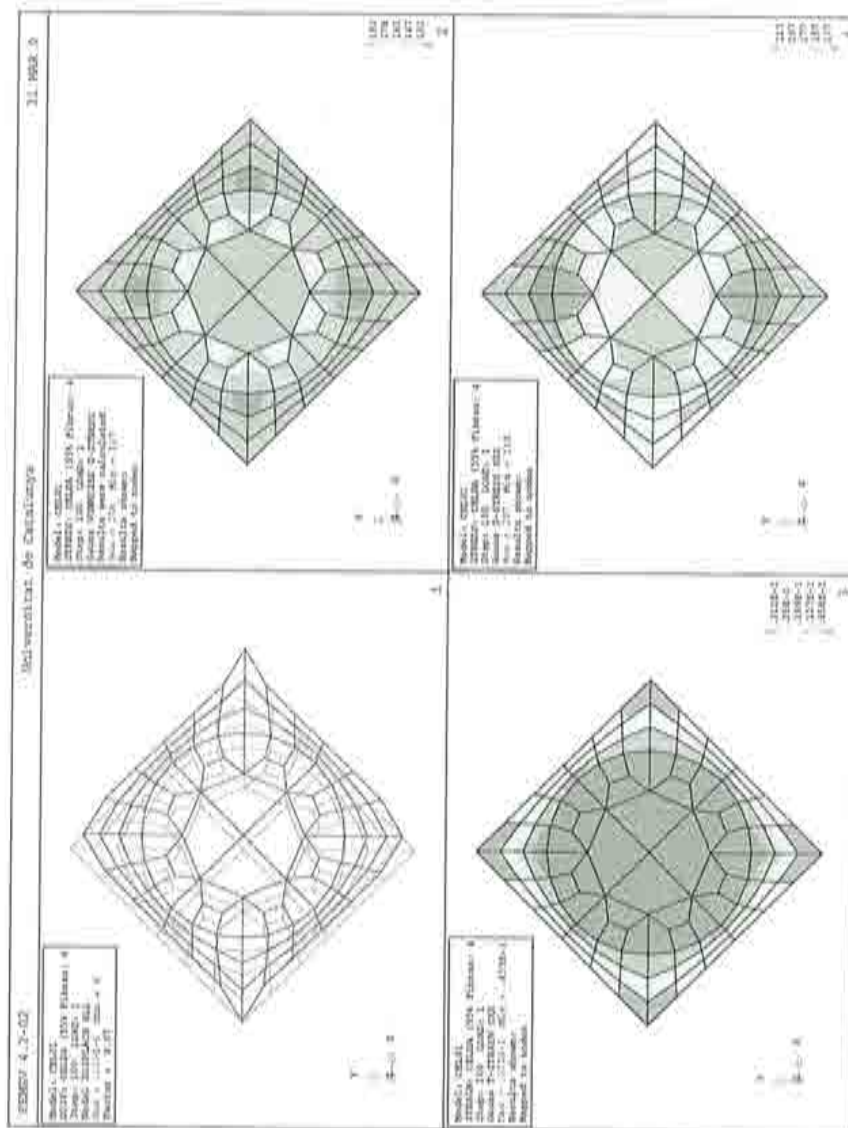


Figura 6.29: Solución en la microestructura, para el incremento 100. Célula del disposición cuadrada (rotación 45 grados): 1 Desplazamiento de la malla, 2 tensiones de von Mises, 3 deformación ϵ_{xx} , 4 tensión σ_{xx} .

6.4. COMPORTAMIENTO TRANSVERSAL DEL COMPUESTO FIBRA-MATRIZ 255

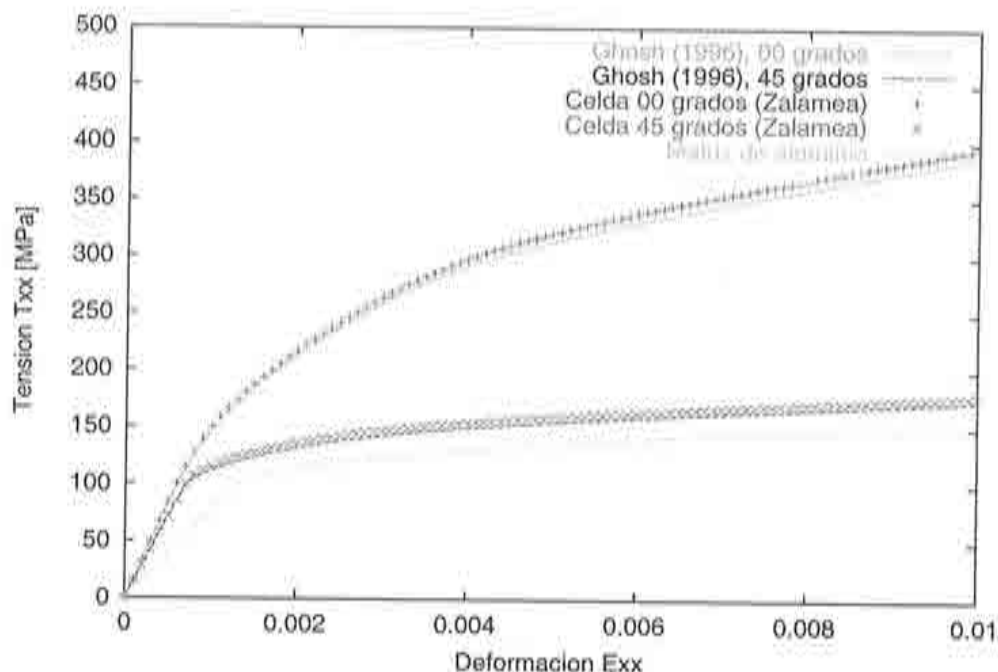


Figura 6.30: Curvas de comportamiento tensión-deformación de: celda con disposición cuadrada a 0 grados, celda con disposición cuadrada a 45 grados, comportamiento de la matriz de aluminio y comportamiento de la fibra de mineral de alumina.

(Ghosh *et al.*, 1996), los cuales concuerdan bastante bien con los resultados obtenidos en esta Monografía. Como se puede observar en la figura, el comportamiento de las dos celdas dentro del rango elástico es muy similar. Por el contrario en el rango no lineal, las curvas del comportamiento tenso-deformacional del compuesto presentan sustanciales diferencias. Las curvas del comportamiento del compuesto con disposición cuadrada, cuando la celda no se ha girado, alcanza aproximadamente unos 400 MPa cuando el material experimenta una deformación de 0.01. Mientras que, al girar la celda 45 grados con respecto a la dirección de la sollicitación, el compuesto presenta una disminución notable de rigidez, alcanzando únicamente los 175 MPa. En consecuencia, en estado no lineal este material presenta un alto grado de anisotropía.

De los resultados obtenidos se puede concluir que a nivel de la micro-malla bastante más fina que la utilizada en esta Monografía,

estructura el método propuesto es equivalente al método de los desarrollos asintóticos. Estos resultados también concuerdan cercanamente con los determinados con el método de elementos Voronoi, sin embargo por su distinta formulación existen importantes diferencias. El Método de Elementos Finitos Voronoi es un método aproximado que consigue una reducción importante del costo computacional. Esto le permite representar compuestos con distribución aleatoria de heterogeneidades, mediante una celda que contiene una distribución aleatoria de elementos Voronoi. Cabe indicar que con la propuesta de esta Monografía también se puede obtener el comportamiento de materiales con distribución aleatoria de componentes, pero naturalmente el coste computacional es mayor. Sin embargo, mediante una celda unidad que utiliza el método propuesto se obtiene mayor información y de mejor calidad a nivel de la microestructura. Además, por su formulación se puede representar fenómenos como "debonding" y puede adaptarse directamente a microestructuras periódicas complejas.

Capítulo 7

ANÁLISIS EN DOS ESCALAS

Como se indicó en el *estado del arte*, dentro de la literatura de homogeneización se afirmaba que *no era posible solucionar el problema de materiales compuestos dentro de un contexto multiescala (de forma acoplada), por el enorme esfuerzo computacional que implica*. De esta manera, si bien las formulaciones que abordan este problema en dos escalas mediante el Método de Elementos Finitos (Ghosh *et al.*, 1996) (Fish *et al.*, 1997) se orientan en esta dirección, se busca a través de métodos no convencionales reducir dicho costo. Los resultados obtenidos con estas innovadoras propuestas son ciertamente sorprendentes, sin embargo presentan: elevada complejidad, dificultad de generalización y menor exactitud. Por otra parte, en el artículo (Michel *et al.*, 1999) se propone el concepto de *grado de libertad macroscópico*. En dicho trabajo se soluciona únicamente el problema microestructural, pero parece evidente que a través de este concepto se busca abordar en futuros trabajos el problema acoplando las dos escalas. En la presente Monografía Doctoral se realiza precisamente dicho acoplamiento (pero no requiere del concepto de grado de libertad macroscópico). La implementación del método propuesto consigue una gran flexibilidad gracias a la solución del problema mediante un esquema en doble escala, en donde se utiliza un proceso para solucionar la macroestructura y uno o varios procesos para solucionar la microestructura.

En este capítulo se analiza tres problemas de materiales compuestos dentro del contexto en doble escala (macroestructura y microestructura). El primer problema (apartado 7.1) se estudia un tubo de pared gruesa sometido a presión interior, el material de este tubo corresponde a una matriz con fibras continuas. En el segundo problema (apartado 7.2) se representa un ensayo de una pared de mampostería de ladrillo sometida a esfuerzo cortante. Finalmente, en la última aplicación del método (apartado 7.3) se representa un ensayo de laboratorio de una lámina de material epoxi reforzado con fibras

de carbono.

7.1 CILINDRO GRUESO CON PRESIÓN INTERNA

Como se indicó previamente, son muy escasas las propuestas para solucionar el problema de los materiales compuestos acoplando las dos escalas. Una de éstas se presenta en un artículo de (Ghosh *et al.*, 1996). Estos investigadores utilizan un innovador método en donde la microestructura se representa a través de elementos finitos especiales denominados *elementos finitos Voronoi*. En estos elementos se introduce una inclusión, de tal forma que contienen las dos fases de un material compuesto. El paso de las variables entre las dos escalas se consigue mediante la teoría de la expansión asintótica. Uno de los ejemplos que presenta este artículo consiste en un tubo cilíndrico de material compuesto sujeto a presión interior, dicha presión se incrementa desde 0 a un máximo de 100 MPa. La simetría del cilindro permite realizar el estudio

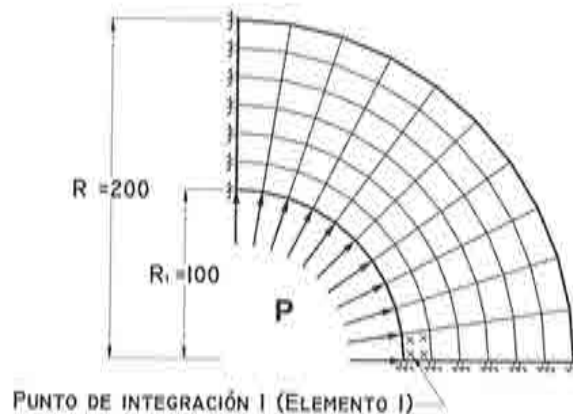


Figura 7.1: Representación de la cuarta parte del tubo, su discretización y condiciones de contorno.

considerando únicamente la cuarta parte de la sección. La discretización de este cilindro se realiza utilizando 60 elementos cuadriláteros lineales, de la misma forma que la referencia citada. Las dimensiones del cilindro y condiciones de contorno impuestas a nivel de la macroestructura se presentan en la Figura 7.1.

Si el material por el cual se encuentra formado el cilindro fuera homogéneo

e isótropo, este problema es uno de los clásicos ejemplos académicos de problemas no lineales. Pero, en este caso el material no es homogéneo (ni isótropo), puesto que el tubo se encuentra formado por un material compuesto fibra-matriz denominado *FT/AL*. Las fibras son continuas y siguen la dirección del tubo. En primer lugar, se considera que dichas fibras se encuentran distribuidas manteniendo una disposición cuadrada, véase (apartado 6.4) la Figura 6.20. Posteriormente, se estudia nuevamente el cilindro considerando que la distribución de fibras corresponde a la disposición hexagonal, véase (apartado 6.4) la Figura 6.22. Como el problema del apartado 6.4, la fibra está formada por 99% α -alúmina cristalina (Al_2O_3) cubierto con silicio, en cambio el material de la matriz es una aleación de aluminio. El comportamiento de la fibra se representa con una ecuación constitutiva elástica, mientras que el comportamiento de la matriz se reproduce mediante una ecuación constitutiva elasto-plástica que obedece el criterio de von Mises, tal como lo indica el Apéndice C. Los materiales componentes son los mismos que los utilizados en la aplicación del apartado 6.4, las propiedades de estos componentes se presentan en dicho apartado en la Tabla 6.9. Ahora bien, a diferencia que el compuesto del apartado 6.4, este material está formado por el 40% en volumen de refuerzo de fibras y el restante 60% es matriz. Se considera que el diámetro de la fibra es $10.0 \mu m$. En el apartado 6.4 se presenta al material compuesto con estas dos disposiciones de fibras y su representación mediante sendas células. En este caso, las dimensiones determinadas para las células con disposición cuadrada y hexagonal se indican en la Tabla 7.1.

COMPUESTO (disposición)	FIG. (núm.)	CELULA (Clase)	FIBRAS [%]	Diam.F. [μm]	b [μm]	h [μm]
Cuadrada	6.20	Cuadrilátera	40%	10.0	14.0125	14.0125
Hexagonal	6.22	Hexagonal	40%	10.0	13.0401	15.0574

Tabla 7.1: Célula utilizada y sus dimensiones.

Bajo la consideración que las dimensiones de la fibras son muy pequeñas con respecto a la macroestructura (tubo de pared gruesa), el problema puede ser solucionado mediante la teoría de homogeneización, en donde el comportamiento local del compuesto se obtiene a través de una celda. De esta forma, la solución del problema bajo el esquema en doble escala implica: solucionar el problema a nivel macroscópico (tubo) y microscópico (celda) de forma acoplada. En este caso, el cilindro se encuentra discretizado en 60 elementos finitos, cada uno de estos elementos tiene 4 puntos de Gauss, esto representa 240 células del compuesto (cada punto de integración a nivel macroscópico

corresponde a una celda), la solución se obtiene de forma acoplada (el cilindro con las 240 celdas) en cada incremento de carga.

Como se indicó, el método multiescala propuesto divide el programa en un proceso a nivel macroestructural y uno o varios procesos a nivel microestructural. En este caso, el problema se solucionó en un ordenador *Oringin 2000* que dispone de 8 procesadores. No obstante, para esta aplicación se decidió utilizar un proceso para la macroestructura y tres procesos para la microestructura que trabajan en paralelo, cada uno de los cuales solucionan 80 celdas.

En el caso que el material compuesto corresponde a la disposición cuadrada de fibras, el tensor constitutivo elástico homogeneizado determinado por el código es el siguiente:

$$C^e = \begin{bmatrix} 156471 & 61806 & 0 \\ 61806 & 156471 & 0 \\ 0 & 0 & 40280 \end{bmatrix}$$

Los resultados obtenidos para el tubo cilíndrico, cuando el material corresponde a la disposición cuadrada de fibras, se presentan en la Figura 7.2. Como se ve esta figura tiene cuatro gráficos. El Gráfico 1 representa la discretización de la estructura en elementos finitos y los desplazamientos o deformación que sufre la malla, cuando la sollicitación ha sido completamente aplicada. En el Gráfico 2 se presenta el campo de tensiones de acuerdo al criterio de von Mises cuando la presión aplicada es de 10 MPa. En este caso, todo el dominio del tubo se encuentra dentro del rango elástico lineal. Obsérvese que la distribución de tensiones sobre el tubo corresponde aproximadamente a la que se genera con un material isótropo, puesto que el campo de tensiones es prácticamente uniforme en sentido circunferencial. Este hecho coincide con los resultados obtenidos en el apartado anterior, figura 6.30, en donde se presenta que el compuesto formado por una disposición cuadrada de fibras, dentro del rango elástico presenta muy poca diferencia en su comportamiento con respecto a la dirección de la sollicitación, no así cuando este material entra en proceso no lineal. El Gráfico 3 presenta las tensiones de von Mises cuando la presión aplicada alcanza los 50 MPa, en este incremento se inicia el proceso no lineal en unos pocos puntos de integración. Finalmente, en el Gráfico 4 se presenta la tensión de von Mises cuando la presión llega a los 100 MPa. En este caso, parte del material se encuentra dentro del rango no lineal y el efecto de la anisotropía del material se manifiesta, generándose concentración de tensiones en partes del dominio. Los resultados reportados en la referencia (Ghosh *et al.*, 1996) presentan las tensiones de von Mises

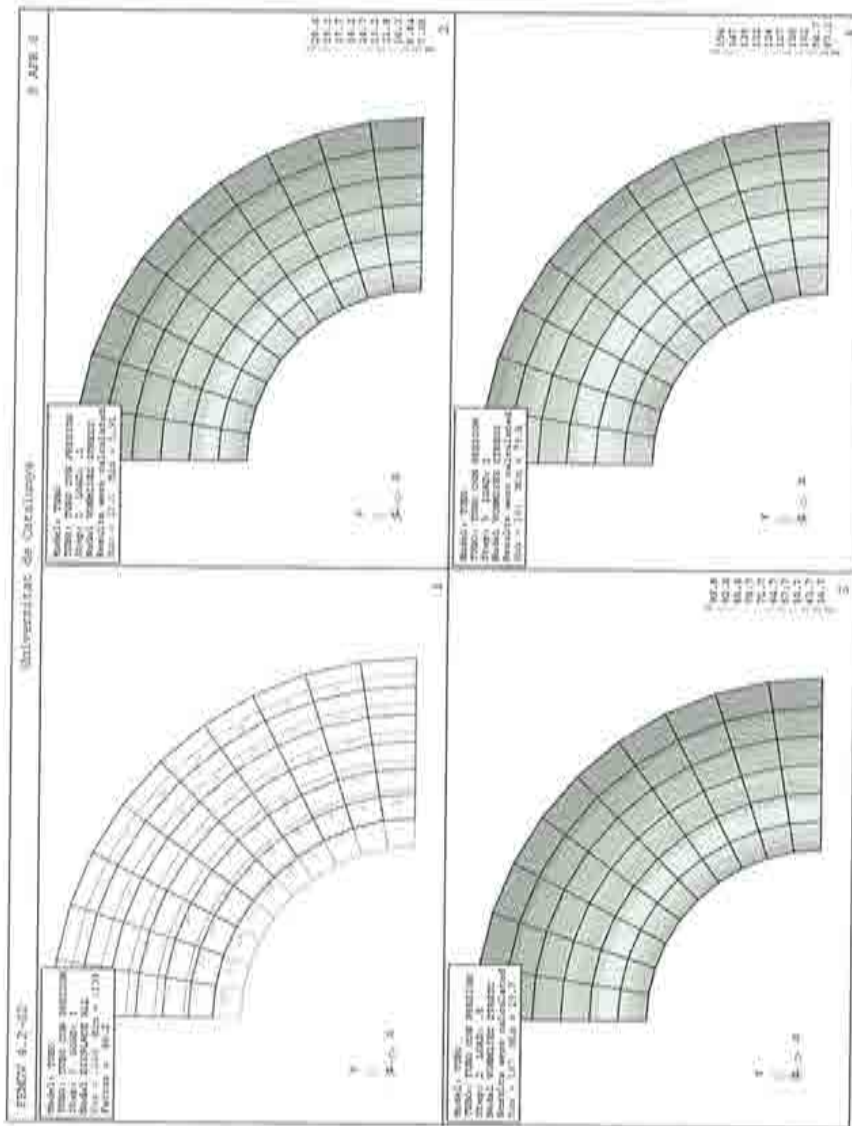


Figura 7.2: Tubo cilíndrico sometido a presión interior. Se presenta cuatro gráficos: Gráfico 1 Discretización y desplazamientos. Gráfico 2 Tensiones de von Mises (presión de 10 MPa), Gráfico 3 Tensiones de von Mises (presión de 50 MPa) y Gráfico 4 Tensiones de von Mises (presión de 100 MPa).

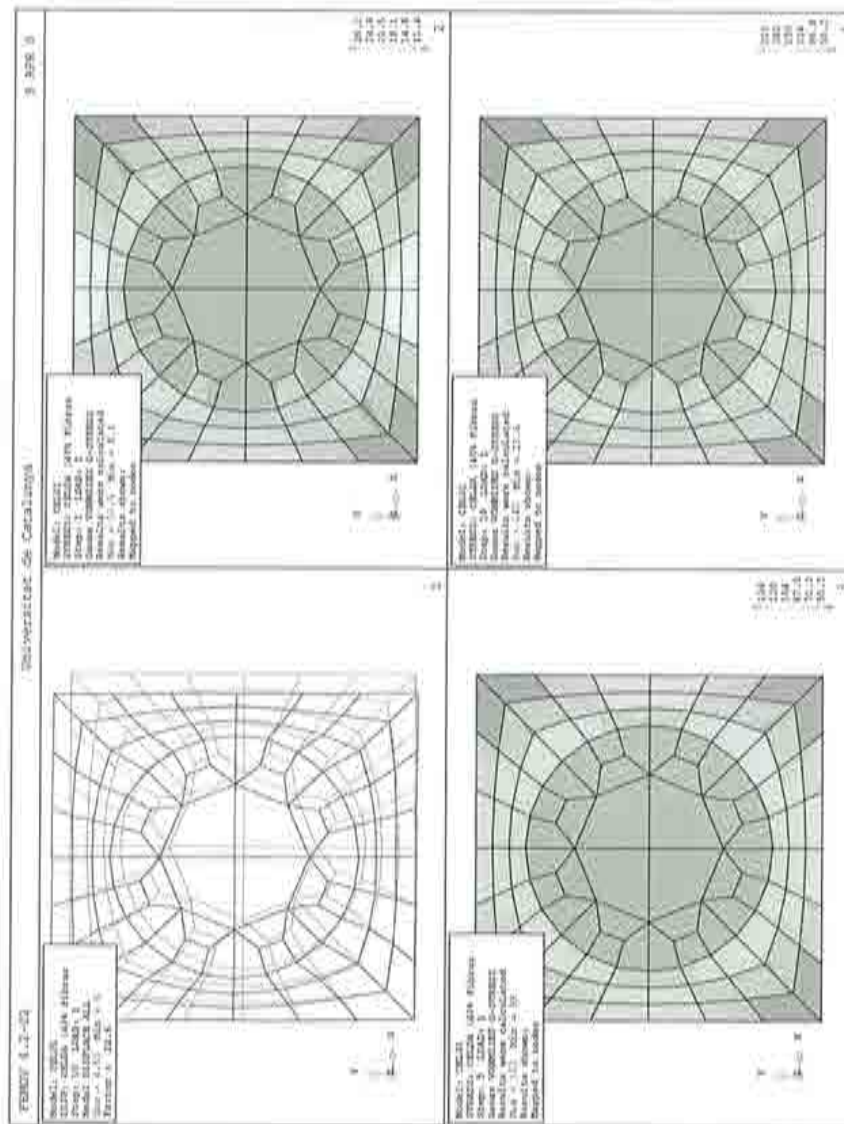


Figura 7.3: Resultados que corresponde al punto de Gauss 1 del elemento 1. Gráfico 1 Discretización y desplazamientos. Gráfico 2 Tensiones de von Mises (presión de 10 MPa). Gráfico 3 Tensiones de von Mises (presión de 50 MPa) y Gráfico 4 Tensiones de von Mises (presión de 100 MPa).

en el tubo cilíndrico cuando se ha aplicado la presión de 100 MPa. Estos resultados con los presentados en esta Monografía coinciden bastante bien, pese a las grandes diferencias que existe entre la formulación propuesta en esta Monografía y el *método multiescala de elementos finitos Voronoi*.

Como se indicó, para solucionar la macroestructura, se solucionan simultáneamente 240 celdas, éstas tienen una correspondencia biunívoca con los puntos de integración de dicha moestructura. En este caso, se presenta al igual que en la referencia (Ghosh *et al.*, 1996) los campos microscópicos obtenidos en el punto de Gauss 1 del elemento 1, dicho punto de integración se encuentra indicado en la Figura 7.1. Los resultados obtenidos para la celda que corresponde a este punto de integración se encuentran en la Figura 7.3. Los gráficos de esta figura se presentan de la misma forma que los gráficos de la macroestructura. Es decir, el Gráfico 1 indica la discretización de la celda y los desplazamientos de la malla cuando la sollicitación ha sido completamente aplicada. Los Gráficos 2, 3 y 4 representan el campo de tensiones a nivel microscópico de acuerdo al criterio de von Mises cuando la presión aplicada alcanza los 10, 50 y 100 MPa respectivamente. Naturalmente, a diferencia que el método de los elementos finitos Voronoi, en este caso existe información detallada de los campos microscópicos. Cabe aclarar que a nivel de la microestructura no se ha utilizado en ninguno de los ejemplos realizados *suavizado* entre elementos¹.

Si el tubo cilíndrico estudiado se encuentra formado por el material compuesto que tiene disposición hexagonal de fibras, el tensor constitutivo elástico homogeneizado determinado por el código resulta:

$$C^x = \begin{bmatrix} 152536 & 65697 & 0 \\ 65697 & 152338 & 0 \\ 0 & 0 & 43252 \end{bmatrix}$$

Los resultados obtenidos, cuando el compuesto corresponde a la disposición hexagonal, se encuentran en la Figura 7.4. Estos resultados se presentan de forma análoga que en la Figura 7.2. Como en el caso anterior, el compuesto dentro del rango elástico se comporta como un material isótropo (ver Figura 7.4, Gráfico 2), en cambio en el rango no lineal (ver Figura 7.4, Gráfico 4) nuevamente se hace patente una diferencia de comportamiento. Esto significa que el material con disposición hexagonal también presenta anisotropía dentro del rango no lineal. Este caso, en donde se utiliza el compuesto con

¹Si el *suavizado* no distingue entre elementos de diferente material, se introducirían fuertes errores de postproceso.

disposición hexagonal no se presenta en la referencia. Finalmente, los campos microscópicos obtenidos para el punto de Gauss 1 del elemento 1 se presentan en la Figura 7.5.

Como se puede ver, es posible solucionar el problema de los materiales compuestos determinando el campo de las variables a nivel macroscópico y microscópico. Obviamente, el costo computacional es considerablemente mayor con respecto a la solución de un problema de elementos finitos de material homogéneo o lo que es lo mismo un macromodelo. Pero, esto es una consecuencia natural de la complejidad del problema. En particular, este problema fue solucionado en 1 hora 15 minutos (tiempo real), utilizando tres procesadores en paralelo a nivel de la microestructura. Tómese en cuenta que el código en el cual se implementó este método es un código no optimizado y que además a nivel de materiales componentes, se utilizó únicamente el tensor constitutivo elástico para obtener convergencia, ya que no se implementó el tensor constitutivo algorítmico o consistente, este hecho genera un exceso de iteraciones a nivel microestructural.

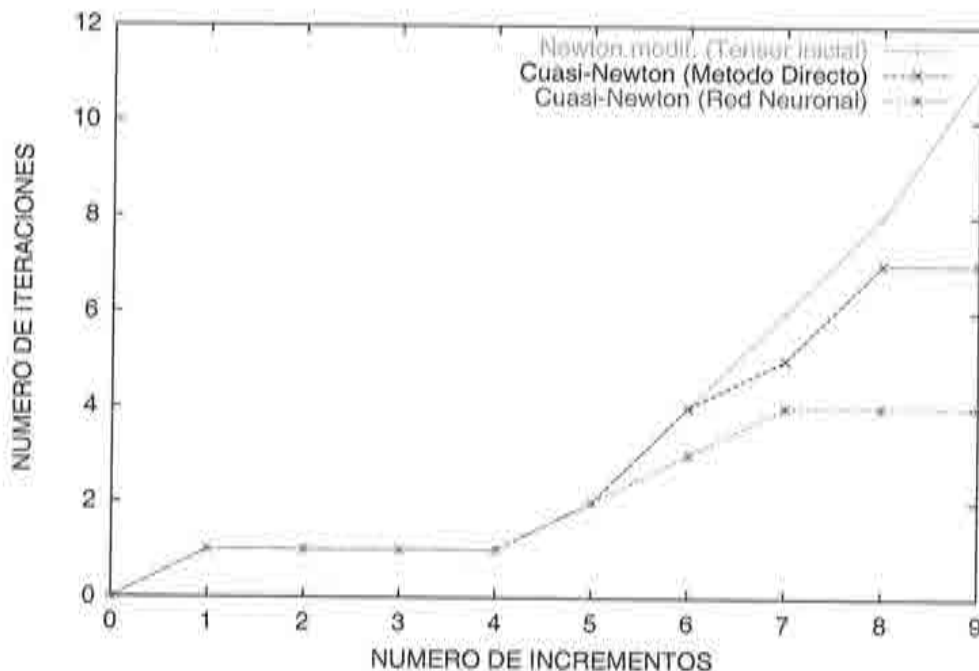


Figura 7.6: Comparación del número de iteraciones a nivel macroscópico mediante tres diferentes métodos.

En cambio, a nivel macroestructural el problema fue solucionado a través de tres diferentes estrategias de convergencia. En primer lugar se utilizó el *método de Newton modificado*, en donde se utiliza únicamente el tensor constitutivo homogeneizado inicial (elástico). Posteriormente se solucionó nuevamente el problema mediante el *método de cuasi-Newton* determinando un tensor secante en cada incremento mediante el método analítico indicado en el subapartado 4.4.2. Finalmente, se solucionó el problema utilizando como estrategia de convergencia el *método de cuasi-Newton*, pero con el tensor secante obtenido mediante una red neuronal, véase el subapartado 4.4.3. Con este último método se obtiene el menor número de iteraciones, tal como lo presenta la Figura 7.6.

7.2 PARED SOMETIDA A ESFUERZO CORTANTE

La mampostería es probablemente el primer material compuesto utilizado por el hombre. Sin embargo, pese a su simple fabricación, la representación correcta del comportamiento de esta clase de material presenta gran dificultad. De aquí, que muchos de los modelos que son utilizados para representar la mampostería lo caracterizan únicamente bajo comportamiento elástico lineal e incluso se lo considera como un material isótropo. Modelos más elaborados suponen el comportamiento de la mampostería como un material ortótropo, cuyas propiedades dependen, además de los materiales componentes (bloques y mortero), de la forma y dimensión de estos (forma del ladrillo, piedra, etc. y espesor de las juntas de mortero). Este problema se vuelve muy complejo, si además se considera el posible comportamiento no lineal de los constituyentes, o la falta de la adherencia entre los mismos. Dentro de la literatura acerca de la representación numérica de esta clase de material (Borrell, 1996) presenta una revisión de algunas de las técnicas más relevantes, en donde, además se puede constatar las dificultades y las limitaciones de los modelos existentes.

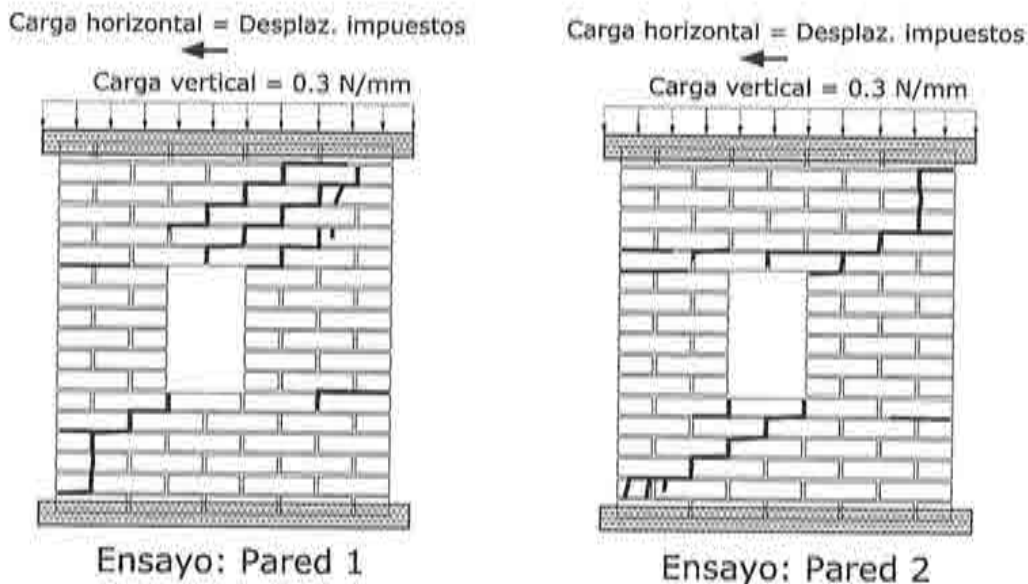


Figura 7.7: Falla en dos paredes ensayadas a cortante.

En este apartado se va a analizar el comportamiento de una pequeña pared sometida a esfuerzos de cortante. El ensayo de esta pared fue tomado de

las siguientes referencias (Lourenço, 1996) (van Zijl *et al.*, 1997), en donde dichos investigadores proponen un modelo numérico (el cual pertenece a los denominados *micromodelos*) para determinar el comportamiento de la mampostería. La referencia presenta los resultados de los ensayos de laboratorio realizados sobre dos paredes supuestamente idénticas, sometidas a esfuerzos de cortante. La falla producida en cada una de ellas se indica en la Figura 7.7. Como se puede ver, el grado de desviación o incertidumbre en el comportamiento de estos materiales es alto (ya que la falla no es exactamente igual), sin embargo nos da una clara idea de las zonas críticas y el tipo de falla de la pared. Las dimensiones de la pared son: 990 mm de base, por 1000 mm de altura, con una ventana en su interior. El ladrillo tiene las siguientes dimensiones: 210 × 52 × 100 mm. La unión de los ladrillos se realiza con mortero de cemento cuyo espesor es de 10 mm. El ensayo consiste en fijar la base de la pared, mientras que en la parte superior se aplica una carga vertical de 0.3 N/mm², luego se restringe el desplazamiento de la parte superior y se impone a través de control de desplazamientos un desplazamiento horizontal de forma incremental. Cabe agregar que se ha obtenido no solo el comportamiento de la pared dentro de la zona elástica e inicio de la falla de la pared, sino también se ha continuado aplicando la sollicitación hasta generar prácticamente el colapso total de la estructura. En este proceso, además de la aparición de nuevas fisuras y agrandamiento (o cierre) de otras fisuras ya existentes, se produce posteriormente a la fractura el deslizamiento friccional entre las partes o trozos resultantes.

Este ensayo realizado en laboratorio se pretende representar a través de la teoría de homogeneización. Pese a que en este caso, no hay una diferencia muy grande de magnitud entre las dimensiones de la célula (un ladrillo y la mitad del mortero que le cubre) con respecto a la macroestructura (pared). Este hecho puede afectar a la precisión del método, puesto que la suposición de periodicidad de los campos en la microestructura es una aproximación poco fina.

Los autores de la referencia realizaron una serie de ensayos sobre la mampostería, para determinar ciertos parámetros que son útiles únicamente en el modelo presentado en la referencia. En cambio, el método propuesto de la teoría de homogeneización, requiere conocer el comportamiento de cada uno de los materiales componentes. Las propiedades del ladrillo y el mortero están detalladas en la Tabla 7.2. Para representar el comportamiento de los materiales componentes se utilizó la ecuación constitutiva de degradación presentada en el Apéndice B. Se considera ablandamiento exponencial al sobrepasar el umbral de tensiones. Se realizaron dos modelos: En el prime-

Material Componente	Módulo Elástico	Coefficiente de Poisson	Umbral de degradación	Energía de Fractura
M_1 ó M_2	E_o [MPa]	ν	[MPa]	[N/mm]
Ladrillo (M1)	16700	0.15	$f_t = 2.00$; $f_c = 30.0$	$G_t = .80$
Mortero (M2)	780	0.20	$f_t = 0.30$; $f_c = 10.0$	$G_t = .18$

Tabla 7.2: Propiedades de los materiales componentes

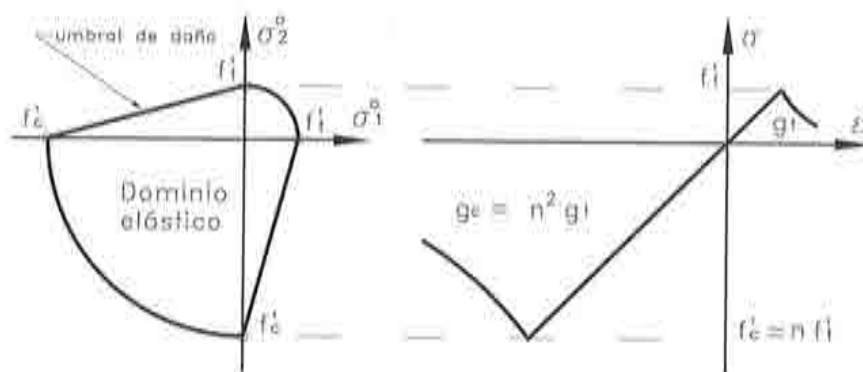


Figura 7.8: Ecuación constitutiva de daño

ro, el valor utilizado para la energía de fractura del mortero es un valor de 0.18 N/mm y para el ladrillo de 0.80 N/mm . En el segundo, se aumenta la energía de fractura del mortero, con el propósito de suplir de alguna manera la fricción que existe, luego de la falla de este material, por el deslizamiento relativo entre las partes de la mampostería resultantes; de esta forma la tensión no disminuye bruscamente, sino que mantiene cierta resistencia. En ambos casos, se considera adherencia perfecta entre los componentes y la hipótesis de tensión plana. La célula que caracteriza al compuesto está constituido por un ladrillo más una capa de mortero que le rodea, cuyo espesor es de 5 mm (la mitad de la junta).

La pared se divide en 66 elementos cuadriláteros de 4 nodos. Cada uno de estos elementos realiza la integración numérica en 4 puntos (2×2 puntos de Gauss). Es decir, para solucionar la macroestructura en cada uno de los incrementos de carga, se requiere obtener la solución de 264 células. Para este problema se utilizó un proceso para solucionar la pared y 4 procesos

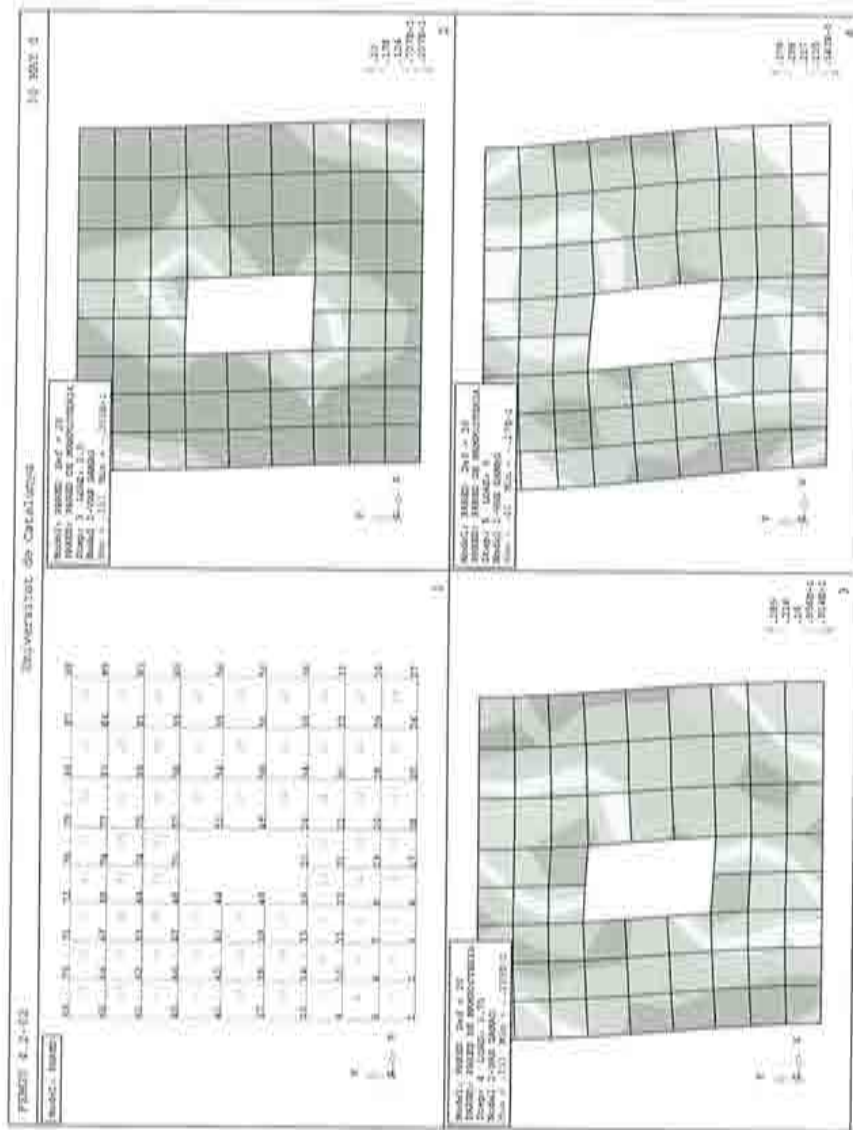


Figura 7.9: Ensayo a corte de una pared. Gráfico 1: discretización de la pared. Paralos siguientes Gráficos (2, 3 y 4) se presenta la degradación (sobre la malladeformada. Gráfico 2 cuando el desplazamiento impuesto es 1.50 mm, Gráfico 3 cuando el desplazamiento impuesto es 2.750 mm, Gráfico 4 cuando el desplazamiento impuesto es 4.00 mm

a nivel microestructural, cada uno de éstos obtiene el comportamiento del compuesto resolviendo 66 células.

El tensor constitutivo elástico homogeneizado determinado por el código es el siguiente:

$$C^{\sigma} = \begin{bmatrix} 8731.9 & 473.2 & 0.0 \\ 473.2 & 3965.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 1518.6 \end{bmatrix}$$

El resultado del problema a través de la teoría de homogeneización es la determinación de los campos de tensiones y deformaciones en cada una de las escalas. Sin embargo se prefirió ilustrar la degradación o daño que se produce en la pared, para lo cual se promedió en cada una de las células la variable de daño. Los resultados se presentan en la Figura 7.9. El primer Gráfico de esta figura presenta la discretización de la pared en 66 elementos cuadriláteros. En los Gráficos restantes (2, 3 y 4) se presenta la variable promedio de degradación. Nótese, que la solución se colocó sobre la malla que se encuentra deformada a consecuencia de la solicitación los desplazamientos que se generan en los nodos de la malla se encuentran multiplicados por un factor de 20). Entonces, el Gráfico 2 representa el daño cuando el desplazamiento horizontal impuesto en la parte superior de la pared es de 1.50 mm. Como se puede ver, la degradación de la pared inicia en dos esquinas de la ventana por esfuerzos de cortante, mientras en la parte inferior derecha y en la parte superior izquierda se produce daño por esfuerzos de tracción. El Gráfico 3 corresponde a un desplazamiento horizontal de la parte superior de la pared de 2.75 mm. En este caso, la degradación se ha desarrollado sensiblemente. En el Gráfico 4 el desplazamiento impuesto es de 4.0 mm. Obsérvese que inicia la falla por compresión en la parte inferior izquierda y en la parte superior derecha de la pared. En este ejemplo, la falla por tracción y cortante se produce preferentemente en el mortero por ser el componente más débil, mientras que la falla de compresión se produce en los dos materiales (ladrillo y mortero).

Gracias a que esta teoría soluciona el problema en las dos escalas se dispone además de gran cantidad de información a nivel micromecánico. Como se explicó, el comportamiento del compuesto es evaluado en cada punto de integración de la macroestructura a través de una célula. Por consiguiente, se obtiene el campo de las variables microscópicas en cada uno de estos puntos. Por ejemplo: en la Figura 7.10 se presenta cuatro gráficos de la célula del compuesto que corresponde al punto de integración 3 del elemento 14 de la macroestructura (véase la Figura 7.9), cuando el desplazamiento aplicado es

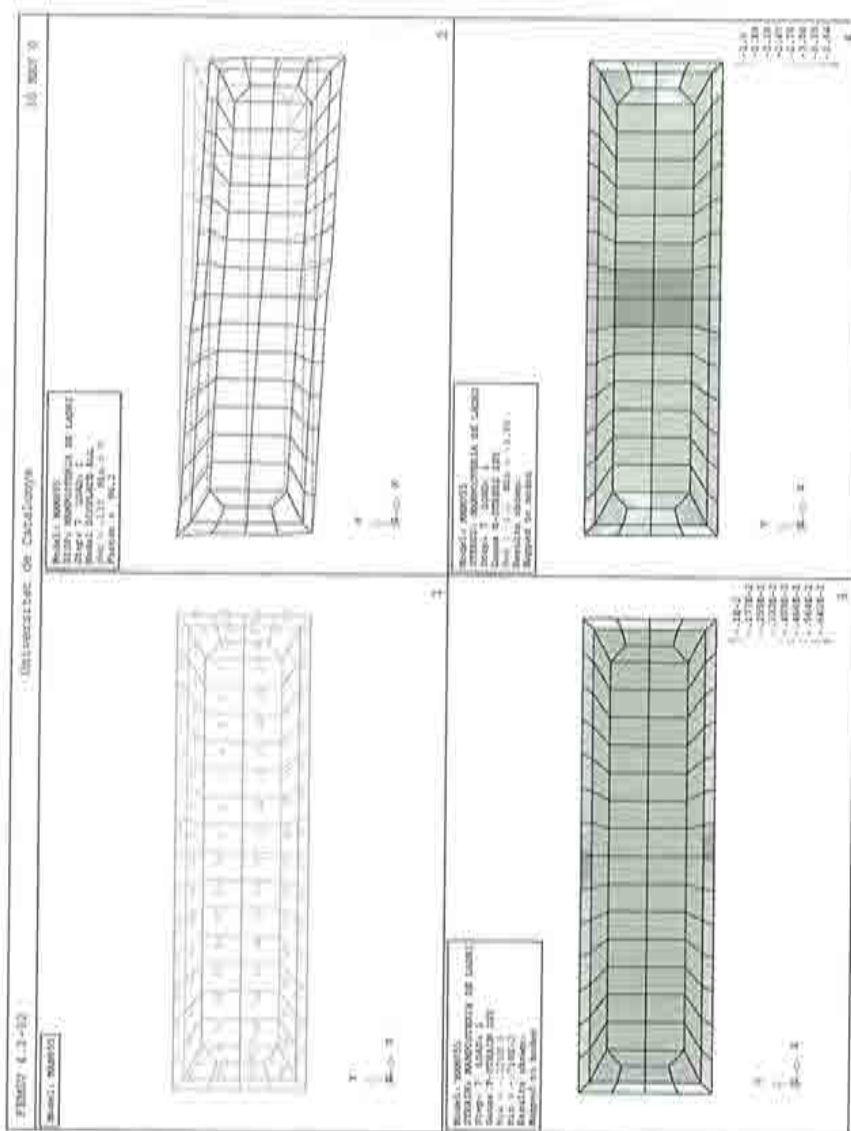


Figura 7.10: Resultados para el punto de integración 3 del elemento 14. Gráfico 1: discretización, Gráfico 2: desplazamiento de la malla, Gráfico 3: deformación cortante ($2\varepsilon_{xy}$), Gráfico 4: tensión cortante (σ_{xy}).

1.5 mm. El Gráfico 1 de la Figura 7.10 indica la discretización del dominio de la célula en 104 elementos cuadriláteros de 4 nodos. A continuación (Gráfico 2) se presenta el esquema de desplazamientos. El Gráfico 3 indica el campo de deformaciones cortantes en el dominio de la célula (el cual presenta que la deformación se concentra preferentemente en el mortero) y por último, el Gráfico 4 presenta el campo de tensiones cortantes.

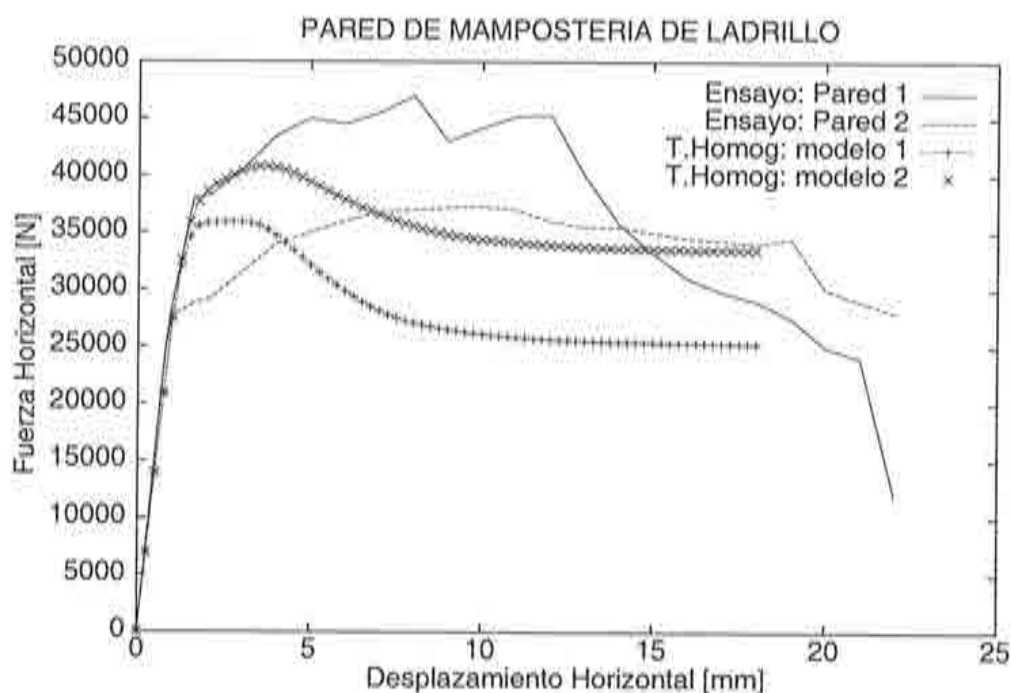


Figura 7.11: Resultados de los ensayos y de las simulaciones numéricas

La Figura 7.11 presenta las curvas de la fuerza horizontal medida en la base de la pared, con respecto al desplazamiento impuesto. Como es usual en esta clase de materiales, el resultado de los ensayos experimentales presentan claras diferencias. La respuesta del primer modelo numérico mediante la teoría de homogeneización coincide en el rango elástico, en el rango no lineal decae la resistencia por la rotura del mortero. En el segundo modelo numérico la solución se aproxima mejor, dentro del rango no lineal, a los resultados reales; como se indicó, en este caso se aumentó de la energía de fractura en el mortero para conseguir artificialmente el efecto de la fricción.

De los problemas solucionados, este problema es el de mayor costo com-

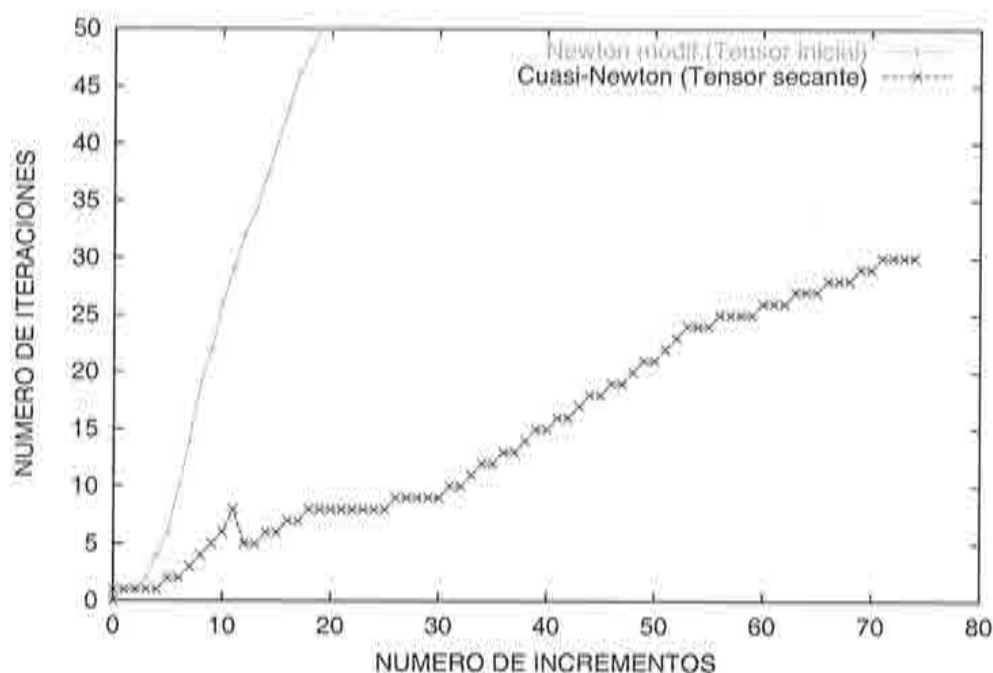


Figura 7.12: Resultados de los ensayos y de las simulaciones numéricas

putacional. Esto se debe a que casi la totalidad del problema se realiza dentro del rango no lineal y en este caso, la mayor parte de los incrementos requieren de un número alto de iteraciones. En la Figura 7.12 se presenta la comparación del número de iteraciones cuando se utiliza el método de Newton modificado con el tensor constitutivo inicial y cuando se utiliza el método de cuasi-Newton con el tensor constitutivo secante mediante la red neuronal. En el primer caso se supera el máximo número de iteraciones y el proceso se interrumpe. Con el método de cuasi-Newton se soluciona completamente el problema, pero por la fragilidad del material, el comportamiento del material puede variar bruscamente dificultando la convergencia a nivel de la macroestructura.

Para representar el comportamiento de la pared considerando el posterior deslizamiento entre las partes resultantes de la fractura (de la mampostería) se requiere incluir técnicas que consideren este fenómeno. Una de ellas es incluir *elementos junta* que permitan el deslizamiento friccional entre el ladrillo y el mortero. Otra posibilidad es abordar este problema mediante el método de *discontinuidades fuertes* (Manzoli *et al.*, 1998) o algún método

basado en la *mecánica de la fractura*. Estas técnicas caen fuera del objeto de estudio de este trabajo. Sin embargo, es importante observar que pueden ser implementadas dentro de la teoría de homogeneización para estudiar el fenómeno de la fractura de ciertos materiales.

7.3 ENSAYO DE UNA PROBETA DE CARBONO-EPOXI

La simulación numérica que se realiza a continuación reproduce un ensayo en laboratorio, cuyos datos y resultados fueron facilitados por la empresa *Casa-Aeronáutica*. El ensayo consiste en una prueba a tracción simple de una probeta de carbono-epoxi *T300/914C* (matriz reforzada con fibras continuas). La pieza ensayada se presenta en la Figura 7.13. La probeta tiene una longitud total de 380 mm, pero gran parte de la misma (sus dos extremos) se utiliza para fijar y transmitir la carga. De tal forma que, la zona donde se produce el ensayo (probeta) tiene una longitud de 160 mm, el ancho es 50 mm y el espesor 2 mm. Esta probeta presenta a cada lado de la parte central de la misma una entalla de 5 mm de profundidad. La carga se impone fijando uno de los extremos, mientras en el otro se impone desplazamientos en la dirección longitudinal a la probeta. Este ensayo tiene el propósito de reproducir tanto el comportamiento del material, como el tipo de falla que se genera en la probeta.

El compuesto está formado por una matriz epoxi reforzada con fibras continuas de carbono, las cuales se encuentran orientadas en la dirección longitudinal de la probeta (Eje xx), el diámetro de las fibras es de 5 μm y el porcentaje del refuerzo en volumen es 47.5%. La matriz epoxi, es un material isótropo que al sobrepasar el umbral de degradación presenta ablandamiento. En cambio, la fibra al sobrepasar el límite de fluencia presenta un cierto grado de endurecimiento. Las propiedades de los materiales componentes se indican en la Tabla 7.3

Material Componente	Módulo de elásticidad	Coefficiente de Poisson	Límite de fluencia	Energ. Fractura (G) Endurecimiento (H)
M_1 ó M_2	[MPa]	ν	[MPa]	(H [MPa]); (G [N/m])
MATRIZ (M1)	14715	0.325	43.323	G = 5
FIBRA (M2)	239551	0.000	300.0	H = 90000

Tabla 7.3: Propiedades de los materiales componentes

La representación numérica de este ensayo se presentó en el congreso de *Métodos numéricos en ingeniería* realizado en Sevilla (Car *et al.*, 1999). En el trabajo en referencia se utilizó dos métodos completamente diferentes: el primer método representa el ensayo mediante un *macromodelo* que combina la *teoría de mezclas* con la *téoría de mapeo de espacios*. En cambio, el se-

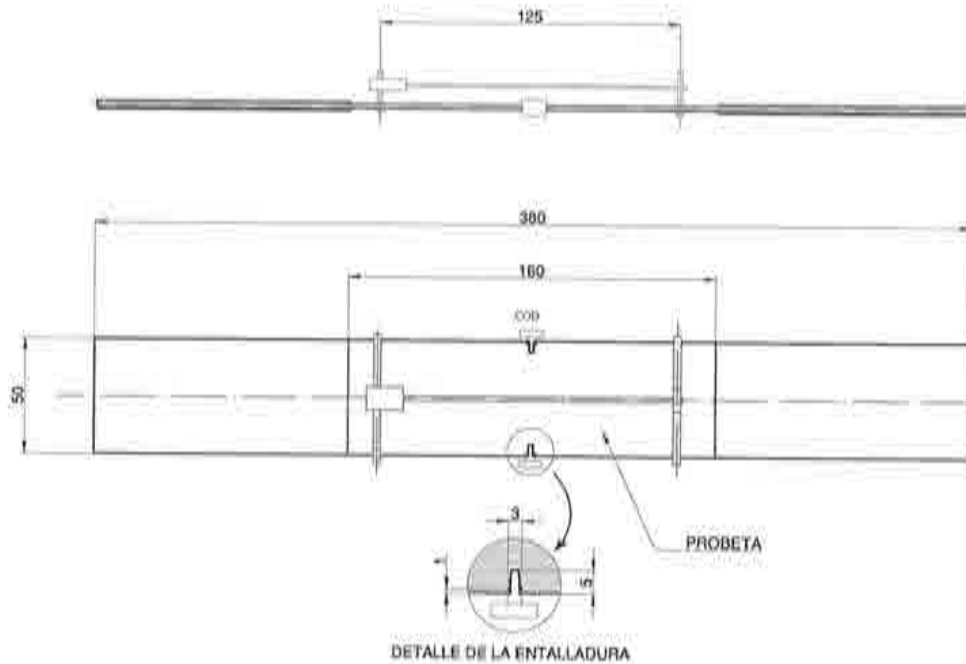


Figura 7.13: Probeta ensayada de un compuesto de fibras continuas (carbono-epoxi T300/914C). Dimensiones en *mm*.

gundo método utiliza la presente propuesta de la teoría de homogeneización. En ambos métodos se usa la misma discretización de la macroestructura, pero lo que diferencia sustancialmente a las dos simulaciones es la manera de obtener el comportamiento del compuesto. En el método que utilizó la teoría de mezclas, la anisotropía del compuesto se obtiene gracias a una parametrización con la teoría de mapeo de espacios. Mediante esta teoría se le otorga una alta anisotropía a la fibra, más detalles acerca de esta propuesta se puede encontrar en la Monografía Doctoral (Car, 2000). En cambio, en la teoría de homogeneización, la anisotropía del compuesto resulta de la interacción de los materiales componentes dentro de la celda.

En este caso, el compuesto se representa a nivel microestructural a través de una celda en cuyo interior se encuentra parte de la fibra, véase apartado 6.2. La idealización de esta clase de microestructura se realiza de acuerdo a las consideraciones presentadas en el subapartado 6.2.1. De tal forma que, la célula se reduce a un prisma de sección cuadrada que contiene únicamente una fibra y la matriz que le rodea, este dominio guarda las proporciones en

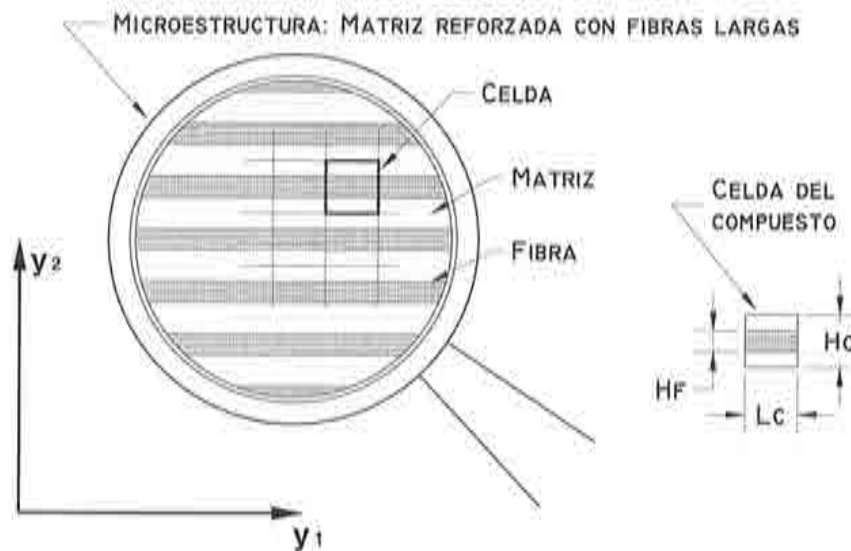


Figura 7.14: Representación de un compuesto reforzado con fibras continuas unidireccionales y su representación mediante una célula.

volumen de fibra y matriz. Obsérvese que en este caso la geometría de la célula es muy sencilla, tal como se indica en la Figura 7.14. La representación de este compuesto fue analizado con mayor detenimiento en el subapartado 6.2.2. Las dimensiones determinadas para la celda unidad se presentan en la Tabla 7.4. Este dominio se discretizó en 24 elementos finitos cuadriláteros

Coef. Vol. de fibra (c_f)	Coef. Vol. de matriz (c_m)	Díametro de la fibra (d_f) [μm]	Longitud de célula (l_c) [μm]	Alto de célula (h_c) [μm]	Alto equiv. de fibra (h_f) [μm]
0.475	0.525	5	8	6.429366	3.053949

Tabla 7.4: Dimensiones de la célula.

lineales. Para representar el comportamiento de la matriz se utiliza una ecuación constitutiva de daño con degradación exponencial, cuya formulación se encuentra detallada en el Apéndice B, mientras que el comportamiento de la fibra se caracterizó mediante una ecuación de plasticidad que sigue el criterio de von Mises con endurecimiento lineal cinemático, tal como lo indica el Apéndice C. En este caso se considera la hipótesis de tensión plana.

Por otra parte, a nivel macroscópico la probeta se discretiza en 548 elementos cuadriláteros lineales (isoparamétricos de 2×2 puntos de integración).

Por consiguiente, el comportamiento del material se evalúa en 2192 puntos de integración (548×4 puntos de Gauss). Esto quiere decir que en la escala microscópica se requiere solucionar 2192 células. La carga se aplica de la siguiente forma: se fija el extremo izquierdo de la probeta en las dos direcciones. A continuación se impone un desplazamiento en todos los nodos del extremo derecho de 0.005 mm en la dirección longitudinal de la probeta, por cada incremento (64 incrementos). El desplazamiento total es de 0.32 mm (0.16 mm si se considera únicamente el desplazamiento relativo de la mitad de la probeta). El problema global se soluciona con un proceso que resuelve la macroestructura y cuatro procesos en paralelo que resuelven las células (548 células cada proceso local).

El tensor constitutivo elástico homogeneizado determinado por el código es el siguiente:

$$C^H = \begin{bmatrix} 122371 & 5034 & 0 \\ 5034 & 29505 & 0 \\ 0 & 0 & 10151 \end{bmatrix}$$

En la Figura 7.15 se presenta los resultados obtenidos de la curva Fuerza-Desplazamiento, tanto del ensayo experimental, como en las dos simulaciones numéricas; con la teoría de homogeneización y la teoría de mezclas. Obsérvese, que ambas representaciones concuerdan muy bien con los resultados experimentales.

En la Figura 7.16 se presenta los contornos de los valores del campo de desplazamientos total. Nótese, que a pesar que el desplazamiento impuesto en el extremo derecho de la probeta es en la dirección longitudinal a la misma (Eje xx , también es la dirección de las fibras), los gradientes más altos se encuentran junto a la entalladura en dirección transversal a la probeta (Eje yy), lo cual refleja una localización que se propuce a raíz de la entalladura que sigue la dirección de la fibra. En la Figura 7.17 se presenta sobre la malla deformada (en donde se observa la abertura de la entalladura) el campo de la deformación ε_{xx}^x . En la Figura 7.18 se encuentra la deformación ε_{yy}^x . Finalmente, en la Figura 7.19 se presenta la deformación cortante $2\varepsilon_{xy}^x$; la localización de deformaciones inicia en la entalladura y conforme se incrementa la carga se extiende en dirección de la fibra (Eje xx), ésta producen la abertura de la entalladura de la probeta. Este gráfico refleja claramente el tipo de localización, el cual se observa además en el ensayo experimental. Cabe agregar que si el material fuera isotrópico, la localización se produciría (a partir de la entalladura) mateniendo una dirección de 45 grados.

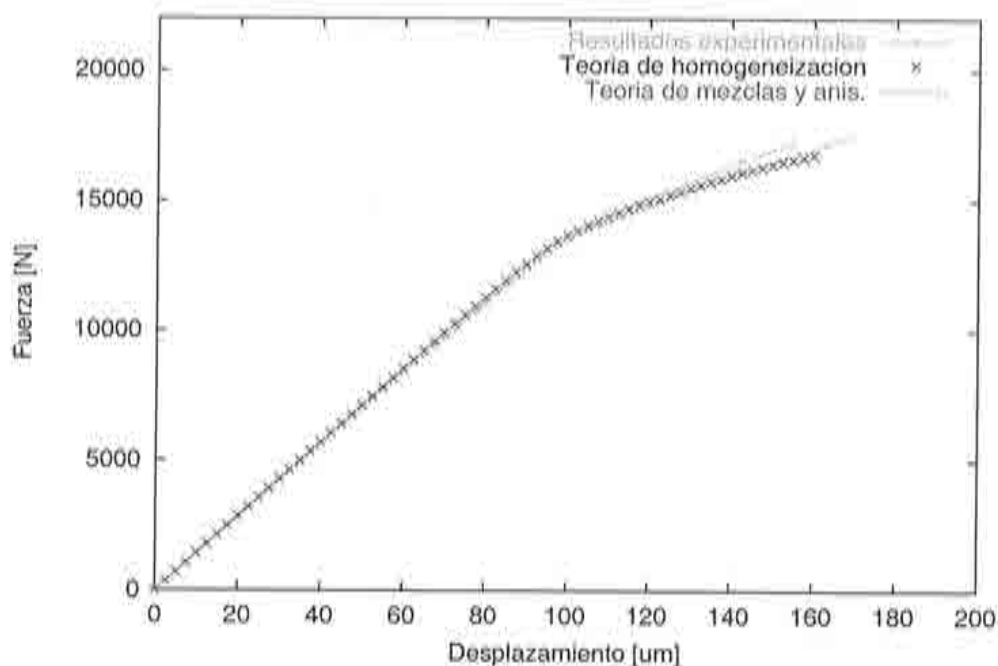


Figura 7.15: Curva Fuerza-Desplazamiento obtenido en el ensayo experimental y en los modelos numéricos, con la teoría de homogeneización y la teoría de mezclas.

En la Figura 7.20 se sobrepone sobre la malla deformada el campo de tensiones σ_{xx}^x . Nótese que a consecuencia de la localización que se produce en la probeta, los valores altos de tensión se generan a partir de la entalladura. En la Figura 7.21 se presenta el campo de tensiones σ_{yy}^x . En la figura se observa un comportamiento completamente distinto entre la zona donde se ha producido la localización y el resto de la probeta. En la Figura 7.22 se presenta el campo de tensiones cortantes σ_{xy}^x . Obsérvese que los valores altos de cortante se trasladan siguiendo el avance de la localización o falla de la probeta. En la Figura 7.23 se indica el estado de la variable de degradación de la matriz. Esto es, el promedio dentro del dominio de la célula de la variable interna de degradación. Este esquema indica el lugar donde se produce el desgarre o despegue entre la fibra y la matriz. Por otra parte, también se presenta en la figura 7.24, la curva que indica la abertura de la entalladura en relación a la carga aplicada.

Puesto que el método soluciona el problema en cada una de las dos esca-

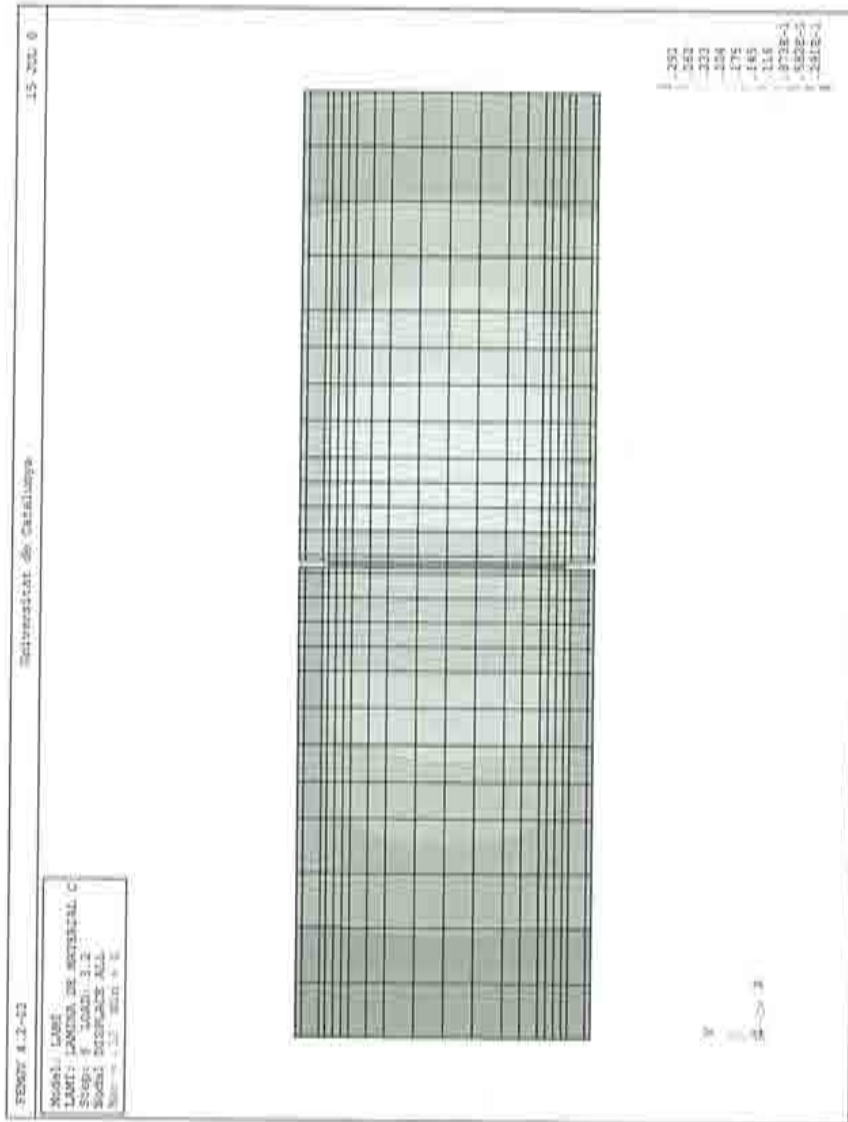


Figura 7.16: Ensayo a tracción simple de una probeta de matrix epoxi - fibras de carbono): Contorno de desplazamientos.

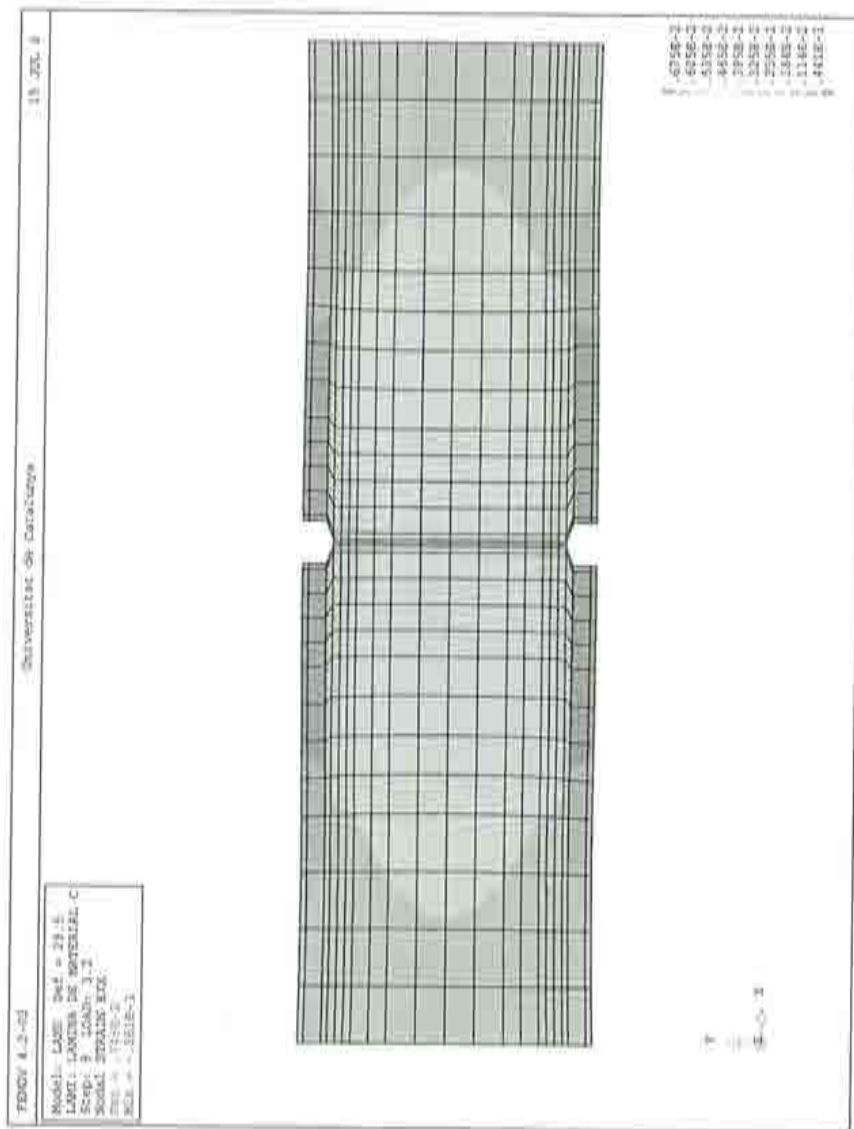


Figura 7.17: Ensayo a tracción simple de una probeta de matrix epoxi - fibras de carbono): Deformación ϵ_{xep}^d .

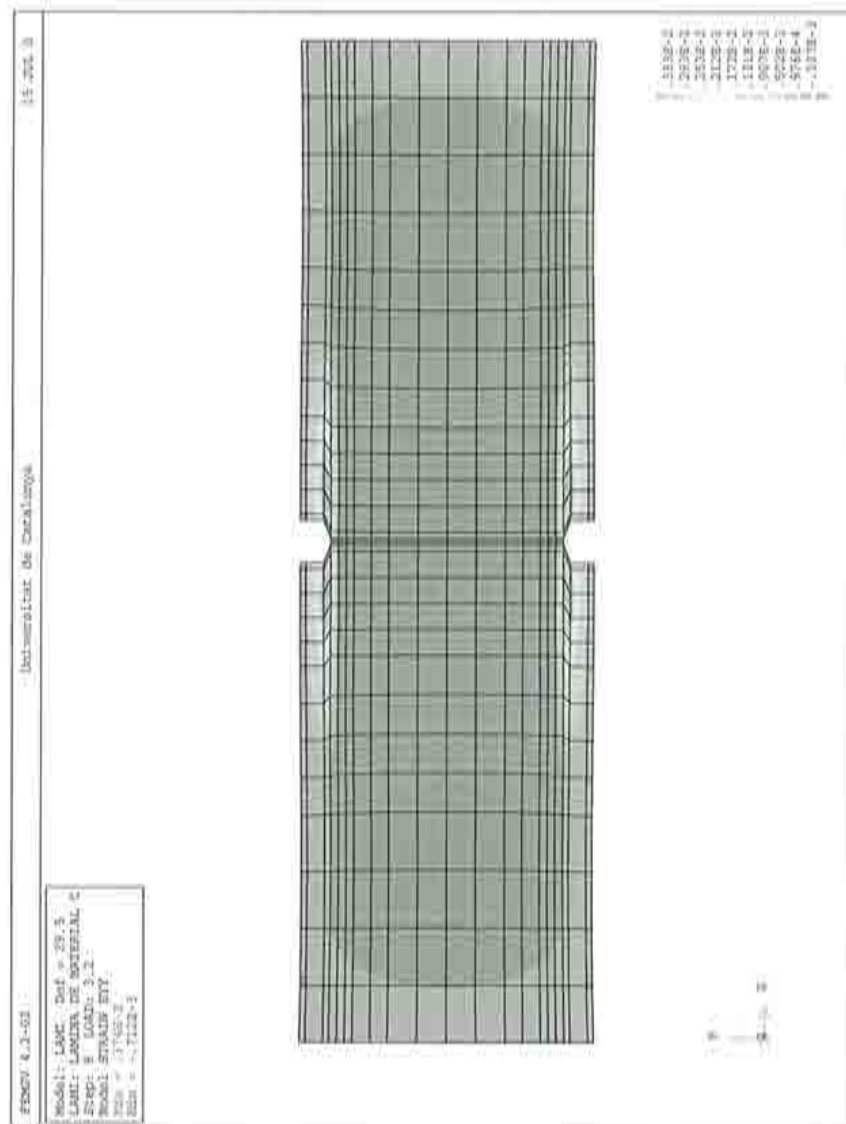


Figura 7.18: Ensayo a tracción simple de una probeta de matrix epoxy - fibras de carbono): Deformación ε_{yy}^x

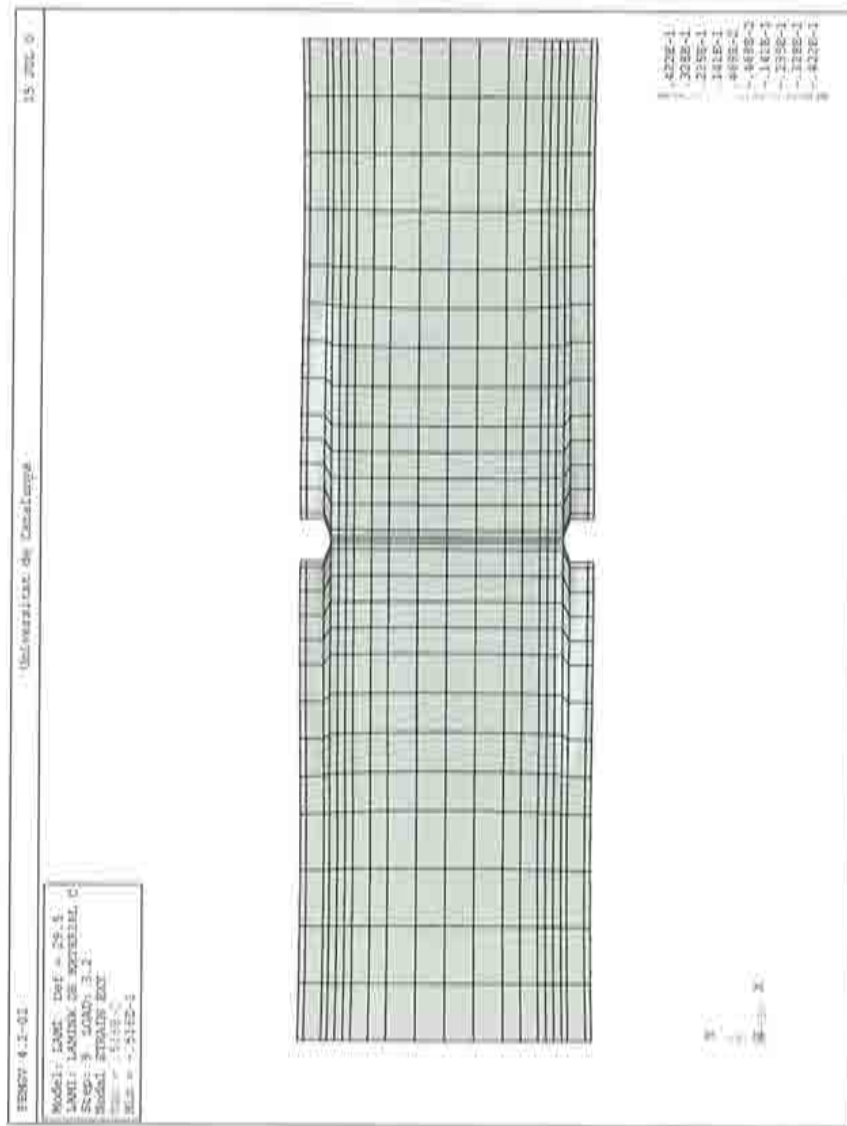


Figura 7.19: Ensayo a tracción simple de una probeta de matrix epoxi - fibras de carbono); Deformación ϵ_{xy}^x .

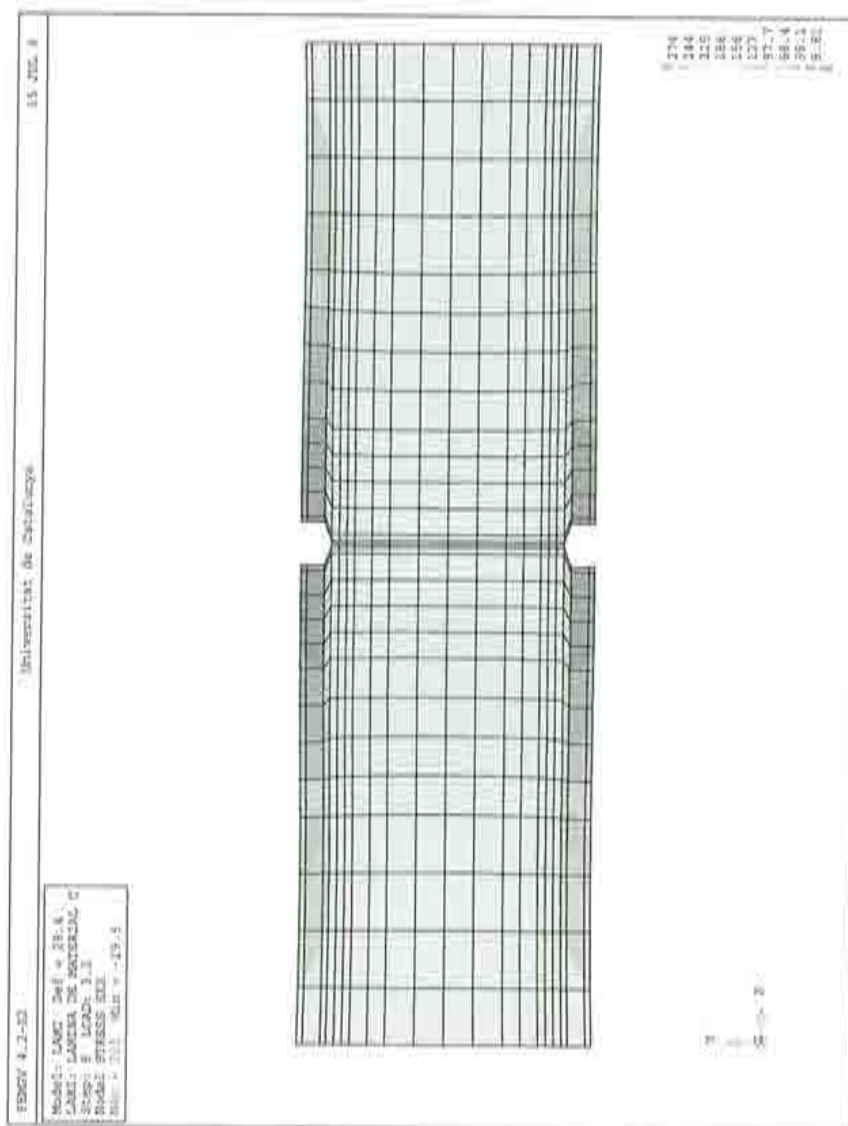


Figura 7.20: Ensayo a tracción simple de una probeta de matrix epoxy con fibras de carbono: Tensión σ_{xx}^p .

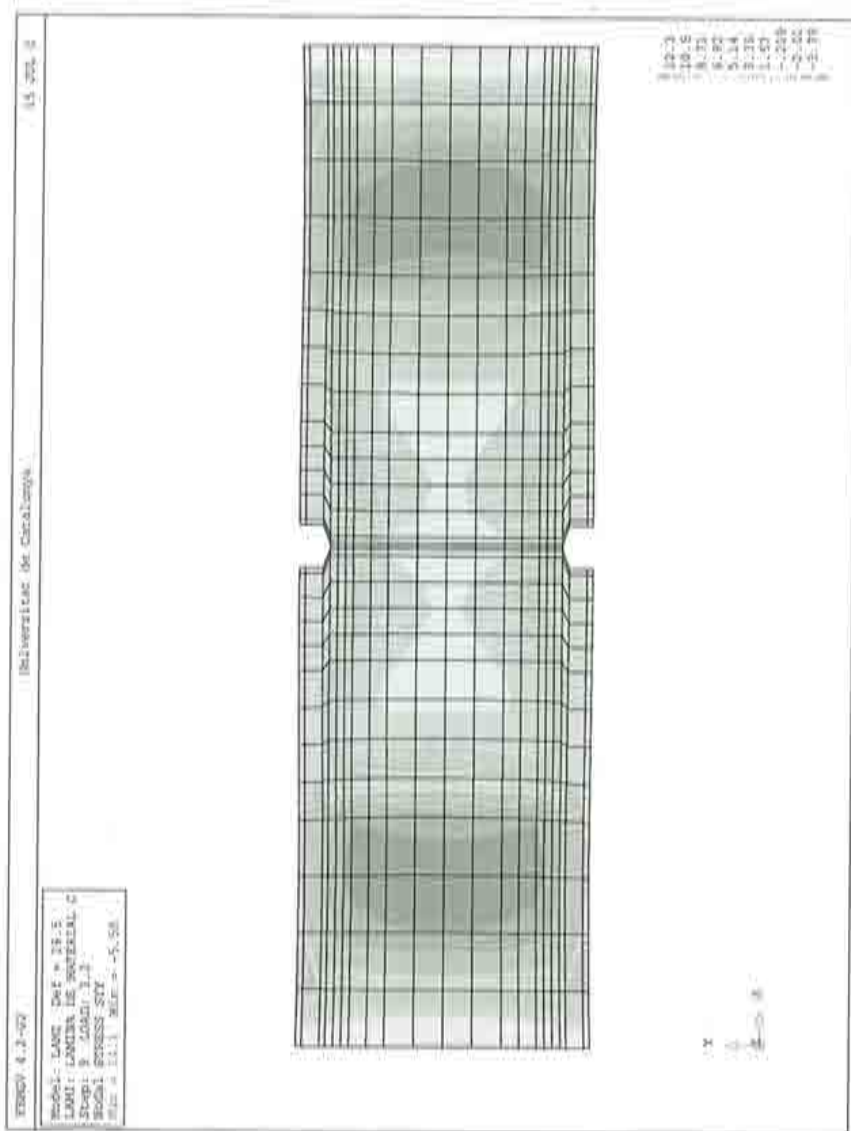


Figura 7.21: Ensayo a tracci3n simple de una probeta de matrix epoxy con fibras de carbono: Tensi3n σ_{yy} .

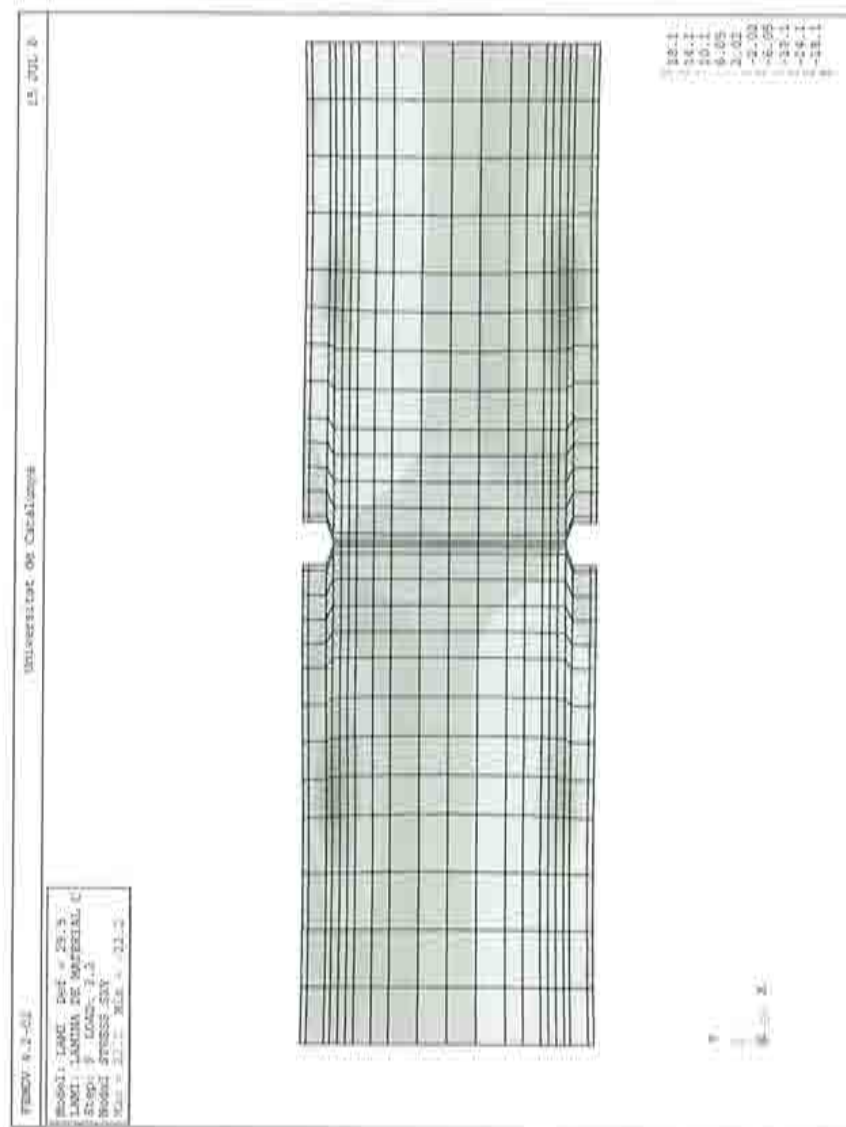


Figura 7.22: Ensayo a tracción simple de una probeta de matrix epoxi con fibras de carbono: Tensión σ_{xy}^x .

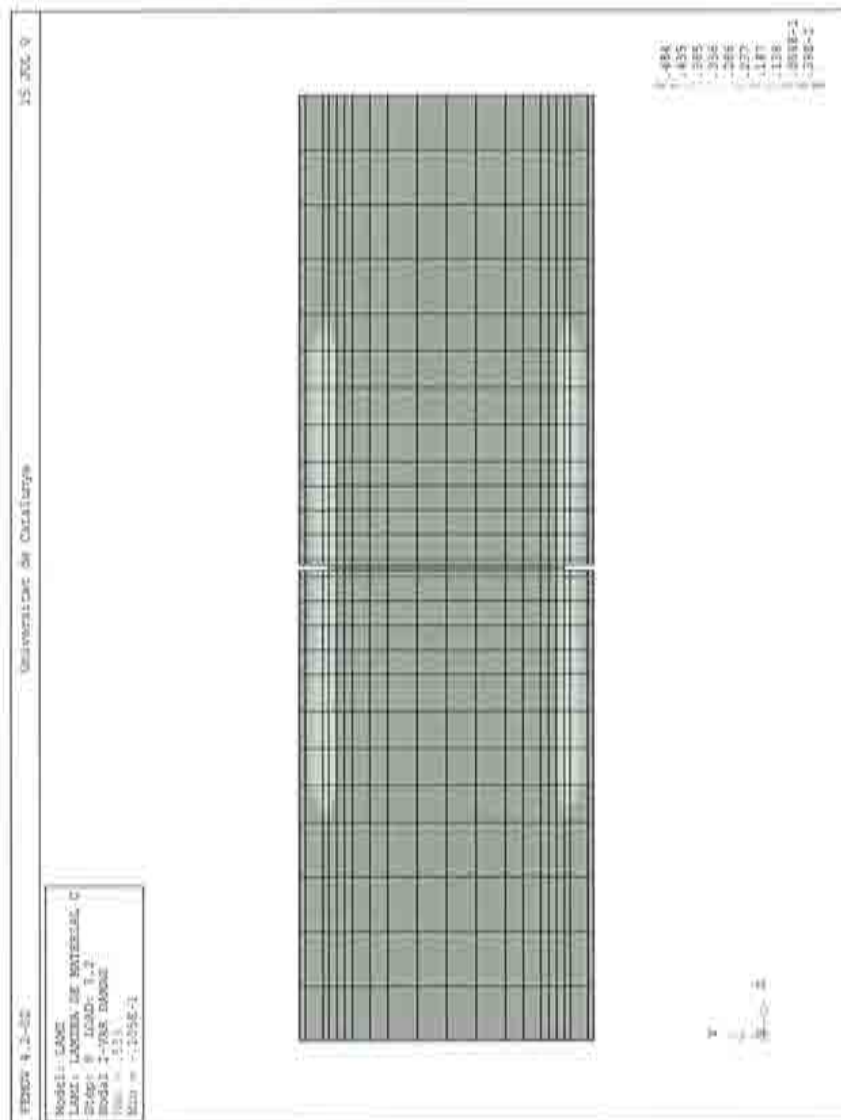


Figura 7.23: Ensayo a tracción simple de una probeta de matrix epoxi con fibras de carbono; Degradación de la matrix.

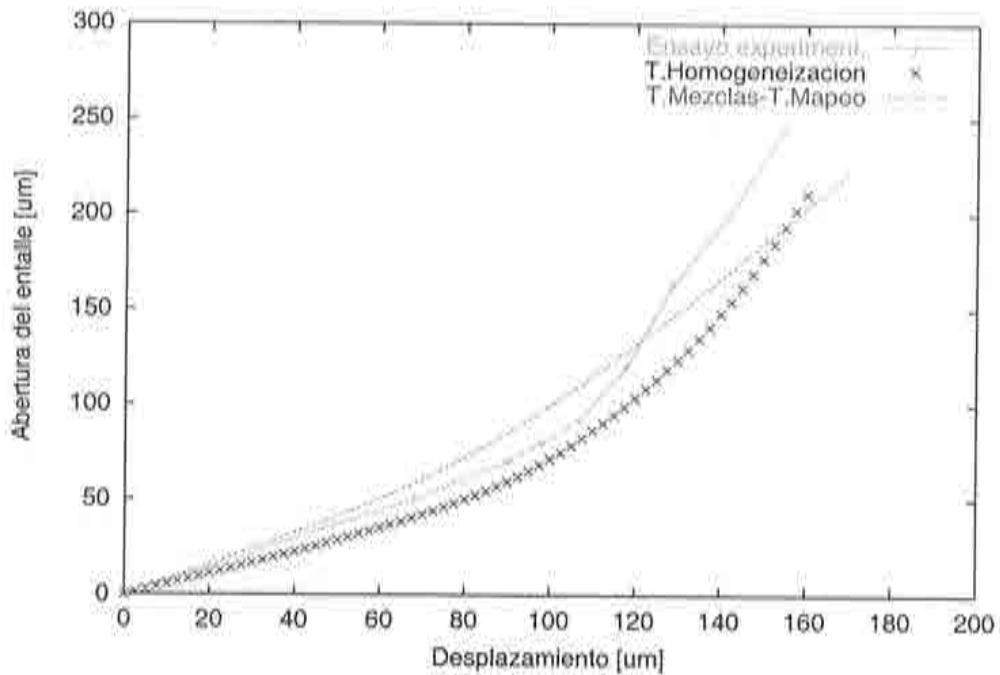


Figura 7.24: Curva Abertura-Desplazamiento.

las, se dispone además de información detallada a nivel de la microestructura. Es decir, se almacenan los campos que se generan en cada uno de los puntos de Gauss de la macroestructura, obtenidos a través de las células. Naturalmente, esta información es extensa, así que el código únicamente realiza el postproceso en los puntos de Gauss que se indica en el archivo de datos. En esta simulación se ha seleccionado algunos puntos de integración de la probeta, entre ellos se presenta uno que se encuentra prácticamente en el centro de la probeta y otro en la zona de localización. El primer punto escogido corresponde al punto de integración 1 del elemento 1, que está ubicado cerca del centro de la probeta y corresponde a la célula número 1. Los campos de las variables en esta célula para el incremento 64 se presentan en la Figura 7.25. Esta figura tiene cuatro gráficos en la parte superior y cuatro en la parte inferior. En la parte superior se indica (Gráfico 1) la discretización (de la célula) y la malla deformada a consecuencia del desplazamiento relativo que se produce en sus nodos. Los Gráficos 2, 3 y 4 representan los campos de deformaciones: ε_{xx} , ε_{yy} , y ε_{xy} . Como se observa, esta célula está sometida principalmente a esfuerzos de tracción en la dirección de la fibra, en consecuencia tanto la fibra como la matriz tienen la misma deformación ε_{xx} . Por

el contrario, las deformaciones en las otras direcciones ε_{yy} , y $2\varepsilon_{xy}$ (además de ser valores bajos) son diferentes entre los componentes. En la parte inferior de la Figura, el Gráfico 1 se coloca nuevamente la malla deformada. El Gráfico 2 representa la tensión σ_{xx} , en donde se observa una diferencia notable entre la tensión de la fibra y la matriz. El Gráfico 3 muestra la tensión σ_{yy} , en este caso aunque el postproceso pinta de colores diferentes a los componentes, los valores de la tensión se diferencia únicamente en los decimales. Finalmente, el Gráfico 4 indica la tensión cortante σ_{xy} .

El segundo punto escogido, corresponde al punto de Gauss 2 del elemento 236, este se encuentra justo en una de las bandas de localización, junto a la entalladura. A este punto de integración le corresponde la célula número 942. Los valores de las variables en esta célula se presentan en la Figura 7.26. De la misma forma que la figura anterior, en la parte superior se presentan cuatro gráficos. El Gráfico 1 se presenta la malla deformada. En el Gráfico 2 se presenta el campo de deformaciones ε_{xx} donde existe una deformación uniforme. En el Gráfico 3 el campo de deformaciones ε_{yy} y el Gráfico 4 ε_{xy} . En estos dos últimos gráficos se observa una fuerte localización en los elementos de la matriz que rodean a la fibra, sobre todo en las deformaciones cortantes. En la parte inferior de la figura, el Gráfico 1 se presenta la malla de elementos finitos en el espacio de referencia y los desplazamientos. En los Gráficos 2, 3 y 4 los campos de tensiones σ_{xx} , σ_{yy} y σ_{xy} respetivamente.

Este problema fue solucionado utilizando dos estrategias diferentes para la convergencia a nivel macroestructural. En la primera simulación, se utiliza el método de Newton modificado usando el tensor elástico homogeneizado como predictor en cada incremento. En la segunda simulación se utiliza el método de cuasi-Newton, en donde se obtiene un tensor secante para cada una de las celdas (mediante la red neuronal). Con este segundo método se obtuvo un número mucho menor de iteraciones, tal como se presenta en la Figura 7.27. Lo que implica un ahorro importante del coste numérico y tiempo de cálculo. El problema fue solucionado aproximadamente en 2 horas 45 minutos (tiempo real).

Como se puede ver, esta técnica obtiene los campos a nivel microscópico y mediante su evaluación determina el comportamiento de la macroestructura. El estudio de los fenómenos a nivel micromecánico le convierte a esta técnica como la herramienta más potente hasta ahora desarrollada para la solución de problemas de materiales compuestos. De la comparación de los resultados obtenidos en el presente trabajo con el proporcionado en los ensayo experimental, puede concluirse la bondad de la metodología propuesta.

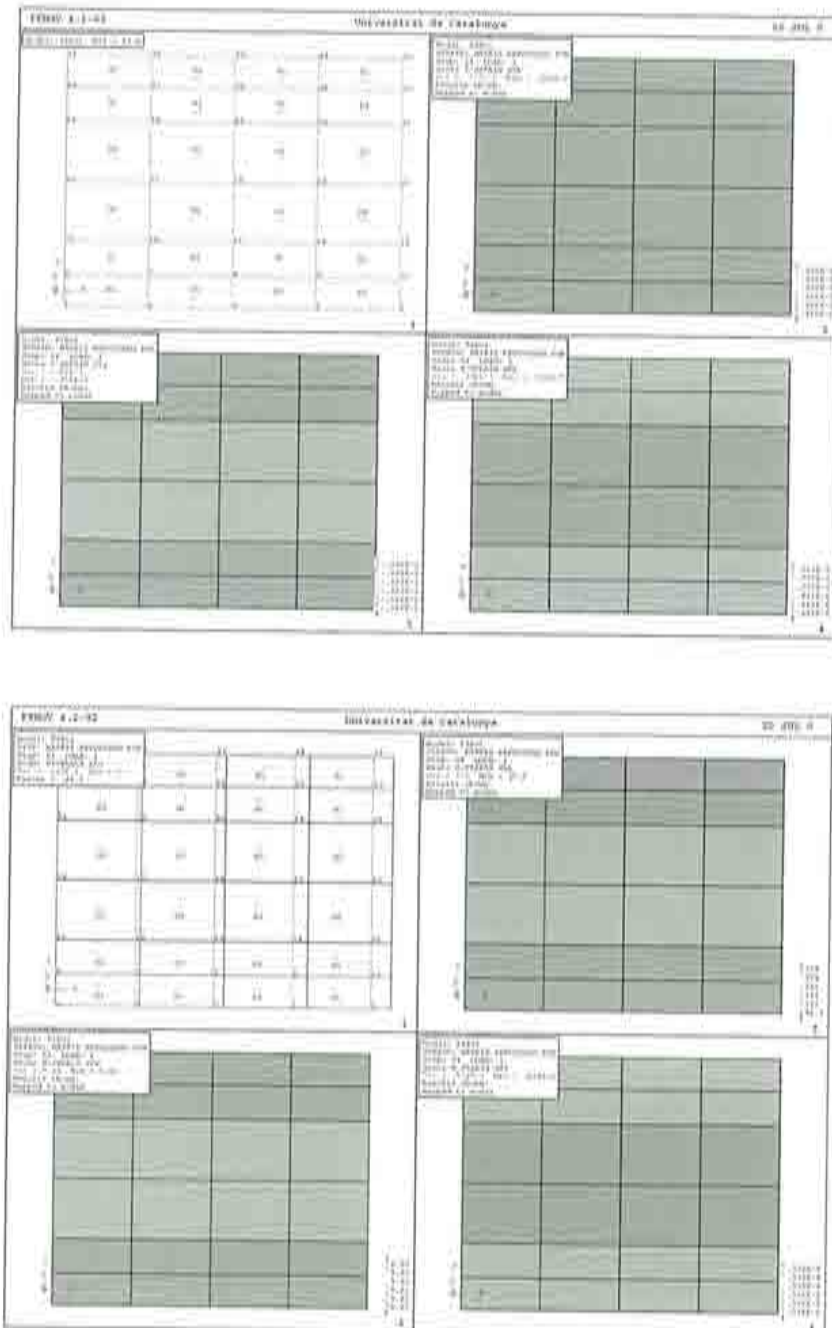


Figura 7.25: Célula 1 (incremento 64). Arriba: 1 Deformación de la malla, 2 Deformaciones ε_{xx} , 3 Deformaciones ε_{yy} y 4 Deformaciones $2\varepsilon_{xy}$. Abajo: 1 Discretización y desplazamientos, 2 Tensiones σ_{xx} , 3 Tensiones σ_{yy} y 4 Tensiones σ_{xy}

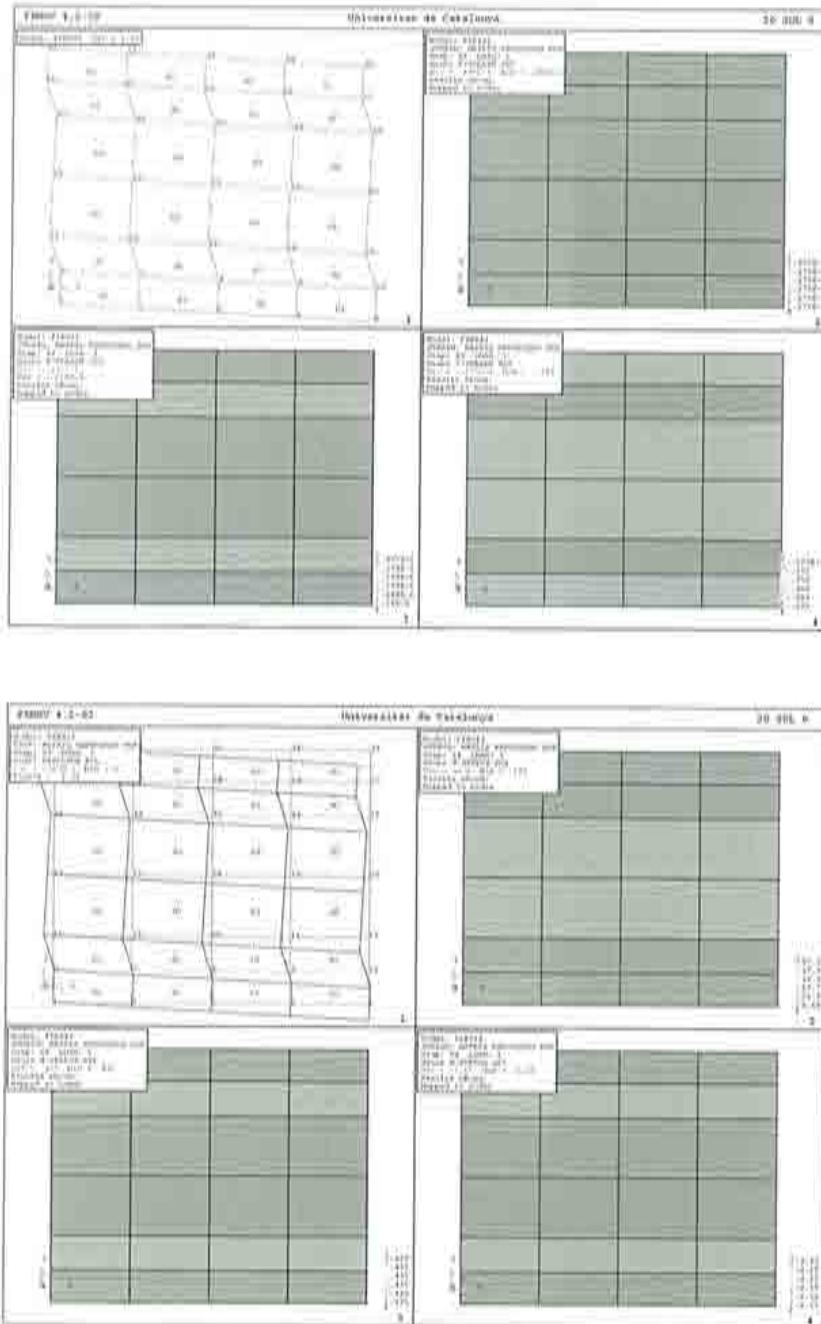


Figura 7.26: Célula 492 (incremento 64). Arriba: 1 Deformación de la malla, 2 Deformaciones ϵ_{xx} , 3 Deformaciones ϵ_{yy} y 4 Deformaciones $2\epsilon_{xy}$. Abajo: 1 Discretización y desplazamientos, 2 Tensiones σ_{xx} , 3 Tensiones σ_{yy} y 4 Tensiones σ_{xy}

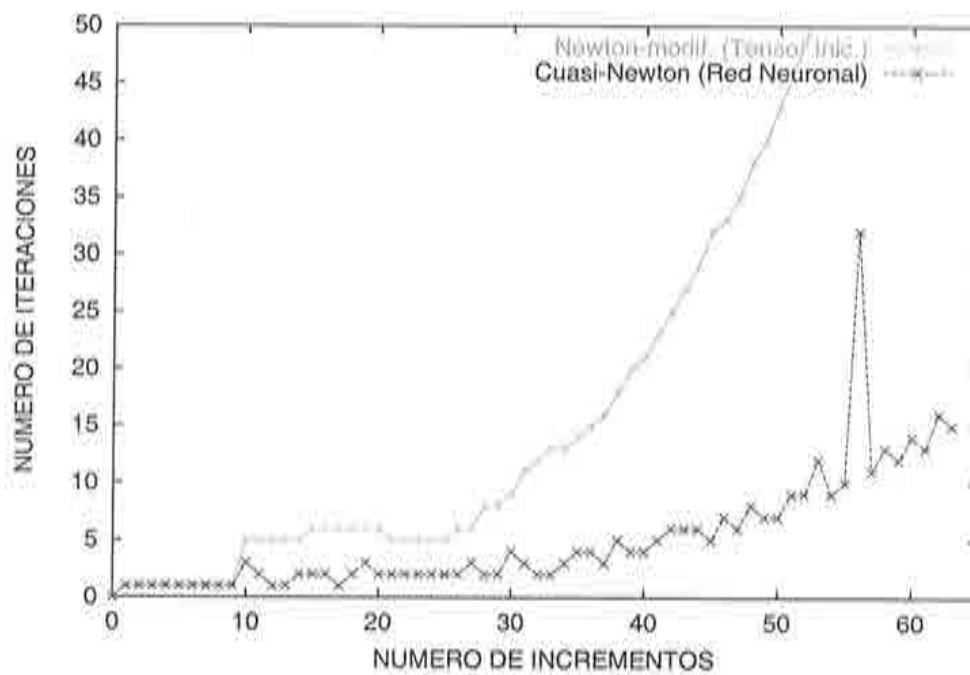


Figura 7.27: Convergencia a nivel macroestructural.

Capítulo 8

CONCLUSIONES Y FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

8.1 CONCLUSIONES

En el presente trabajo de investigación se ha revisado diferentes propuestas y contribuciones para solucionar el problema de los materiales compuestos en dos escalas. A partir de estas propuestas, que forman el contexto de la *teoría de homogeneización*, se ha desarrollado una formulación completa en donde se establecen las leyes que gobiernan el problema a nivel macroscópico y microscópico. Dicha formulación se ha implementado numéricamente en ordenador, obteniéndose como resultado una potente herramienta para solucionar diferentes problemas con materiales compuestos, tal como se ha presentado en las aplicaciones realizadas en esta Monografía. El método propuesto parte de la consideración que los constituyentes forman una fina estructura periódica. No obstante, es absolutamente general en cuanto a diferentes propiedades y formas de los materiales componentes. Su aplicación se extiende a problemas que caen dentro del rango no lineal. Esta técnica se realiza dentro de un contexto de doble escala, lo cual permite reproducir y analizar los diferentes fenómenos de carácter inelástico (tales como: degradación, plasticidad, etc.) que se generan a nivel de la microestructura. Así como también, predecir el cambio de comportamiento del compuesto a nivel macroscópico a partir de una modificación de propiedades, proporciones o forma de los materiales componentes. Obviamente, por la complejidad del problema el coste computacional es alto, pero sin duda este inconveniente será cada vez menos importante. De manera general, esta propuesta pre-

senta que la *teoría de homogeneización* es una técnica matemática en doble escala (o múltiples escalas) que permite representar el comportamiento de los materiales compuestos a través de los fenómenos que se producen a nivel de componentes. Esta técnica da como resultado el *Método de los Elementos Finitos en Dos Escalas*.

En el desarrollo de la propuesta se ha realizado diversas contribuciones dentro del contexto de la *teoría de homogeneización*. Aquí se resumen las principales:

Como se sabe, la *teoría de homogeneización* para materiales periódicos utiliza un dominio denominado celda unidad, el cual contiene toda la información microestructural del compuesto. No obstante, en los artículos revisados no se encontró mayor información acerca de las consecuencias que se derivan de la periodicidad de la microestructura y su división en unidades estructurales (*celdas unidad* o *células*), razón por la cual se analiza dichas estructuras para poder usar una celda unidad como puente entre las dos escalas. En este análisis se introduce ciertos conceptos a través de los cuales las células resultantes de una división de un espacio bidimensional o tridimensional pertenece a un número muy reducido de clases o grupos de dominios. Dentro del espacio bidimensional, que es en donde se enmarca este trabajo, los grupos de estas celdas son dos: las cuadriláteras y las hexagonales. Por consiguiente, el uso de cualquiera de éstas es válido, su elección o preferencia por alguna de ellas reside en la búsqueda de una celda de menor tamaño o facilidad de discretización.

Por otra parte, es de aceptación general que los campos macroscópicos de las tensiones y deformaciones corresponden al promedio de sus respectivos campos microscópicos. Sin embargo, dicho conocimiento puede ser insuficiente para conectar las dos escalas. En este trabajo se encuentra, en base a la *hipótesis de periodicidad local*, que el tensor de deformaciones macroscópico se relaciona a nivel de la microestructura con el cambio de los vectores de periodicidad. Además, a través de la ecuación de equilibrio estático a nivel de la microestructura y definiendo el tensor de tensiones homogeneizado, como el promedio de las fuerzas que se generan en el contorno de la célula, se determina la ecuación de gobierno bajo la escala macroscópica de forma rigurosa. Todo esto permite prescindir de la *teoría de la expansión asintótica* para los medios periódicos y establecer el problema en cada una de las escalas a través de conceptos ya establecidos dentro de la Mecánica de Medios Continuos.

Para establecer correctamente el problema de valores de contorno a nivel microscópico, es necesario introducir adecuadamente las condiciones de contorno de la celda. Dichas condiciones se obtienen de la hipótesis de periodicidad local. Tal como se había establecido en los métodos anteriores, se encuentra que las fuerzas del contorno en *puntos periódicos* tienen igual magnitud pero direcciones opuestas. Para el caso de los desplazamientos, la gran mayoría de formulaciones descomponen el desplazamiento en uno uniforme y otro periódico. En esta propuesta no se realiza tal descomposición, más bien se presenta que la deformación global de la célula genera una transformación de los vectores de periodicidad, que a su vez está relacionado con el desplazamiento relativo entre *puntos periódicos*. Dicha transformación se traduce en una condición de desplazamientos del contorno de la célula que mantiene la periodicidad local. La implementación de las condiciones de contorno se realiza mediante los multiplicadores de Lagrange (Anthoine & Pegon, 1996). Cabe puntualizar que esta imposición de las condiciones de contorno en la microestructura liga a la celda al estado local macroscópico a través del tensor de deformación homogeneizado. De esta manera el problema sobre la microestructura queda completamente definido. La extensión de la formulación a materiales que contienen agujeros o poros se realiza de forma directa. La formulación desarrollada permite encontrar el comportamiento del compuesto a través del análisis de una celda. Véase por ejemplo el capítulo 6, en el cual se obtiene el comportamiento de materiales reforzados con fibras bajo diferentes tipos de carga. Determinándose además, a través de los campos microscópicos, la interacción de los materiales componentes y por consiguiente, los fenómenos micromecánicos. Visto de otra manera, esto representa una forma de ecuación constitutiva para el compuesto, donde el comportamiento del material se establece a través de la información que contiene una célula. Esto es, de acuerdo a la forma, distribución y comportamiento de los materiales componentes. En este caso, la historia del material, que se registra a través de la información de las variables internas, corresponde al campo completo de las variables internas que se generan dentro de la celda. Pero, puesto que la solución de la célula se realiza de forma discreta, mediante el Método de los Elementos Finitos, el número de variables internas se reduce desde un número infinito a un número finito, el cual depende de la discretización de la celda y las ecuaciones constitutivas utilizadas para representar el comportamiento de los materiales componentes.

Posteriormente se aborda el problema en dos escalas. Para ello, se establece el problema de valores de contorno sobre la escala macroscópica y sobre la escala microscópica. El problema microscópico se encuentra acoplado con el macroscópico a través de la deformación global de la célula, mientras que

el problema macroscópico se liga al microscópico mediante la tensión homogeneizada. Dentro del contexto elástico lineal, el problema en dos escalas se soluciona de forma análoga a la metodología empleada en las propuestas de anteriores trabajos de investigación. Dicho procedimiento descompone el problema en cada una de las escalas, a partir del problema microscópico se determina las *constantes elásticas del compuesto*, a continuación se soluciona el problema macroscópico, finalmente las tensiones a nivel local de la microestructura se obtiene aplicando la deformación de un punto de la macroestructura a la celda. De los ejemplos de aplicación (véase capítulo 5) se encuentra que el método propuesto para obtener las constantes elásticas es equivalente al método que usa las funciones periódicas, que se utiliza tanto en la teoría de promedios (Suquet, 1982) como en los desarrollos asintóticos (Lene & Leguillon, 1982) (Bendsøe & Kikuchi, 1988).

Una de las principales aportaciones de esta Monografía es la forma de solucionar el problema no lineal en las dos escalas. En este sentido, la presente propuesta soluciona muchas de las limitaciones hasta ahora existentes para tratar con precisión los campos microscópicos. En esta Monografía se demuestra, a través de los ejemplos de aplicación del capítulo 7, que se puede abordar problemas en dos escalas con las capacidades actuales de los ordenadores. Para alcanzar este objetivo, se ideó una herramienta de gran potencia y flexibilidad. Esta corresponde a la implementación de un algoritmo paralelizado de elementos finitos que acopla las dos escalas. El programa resultante se adapta al problema del material compuesto, puesto que es capaz de solucionar la macroestructura y tantas células como se requiera. Al mismo tiempo, se adapta a la capacidad disponible de procesamiento a través de un software de paralelización que permite fraccionar el problema en partes de menor tamaño y solucionarlo en paralelo en un ordenador multiprocesador o una red de ordenadores. Obviamente, el coste computacional del problema de los materiales compuestos a través de la solución acoplada en las dos escalas es alto. Pero esto es una consecuencia natural de la complejidad del problema. Naturalmente, con la velocidad del desarrollo tecnológico en poco tiempo se podrá solucionar problemas de gran tamaño.

Para problemas no lineales se utiliza la estrategia de convergencia denominada *cuasi-Newton*. Pero no se utiliza la forma convencional del método de *cuasi-Newton*, más bien se ensaya, con resultados bastante satisfactorios, dos métodos que obtienen un tensor constitutivo secante. El primero lo realiza de forma directa y el segundo utiliza un algoritmo iterativo que corresponde al algoritmo de entrenamiento de una red neuronal. De los resultados obtenidos, el segundo método disminuyó en mayor medida el coste computacional.

No obstante, el tema de la convergencia requiere ser estudiado con mayor profundidad. Por otra parte, de la solución de los problemas de dos escalas (capítulo 7) se concluye que la hipótesis de periodicidad local de los campos no introduce errores apreciables cuando la célula es muy pequeña con respecto a la macroestructura. Finalmente, la simplicidad, claridad y directa extensión de conceptos ya establecidos de la Mecánica de Medios Continuos otorgan a esta formulación una gran ventaja con respecto a las otras formulaciones.

8.2 FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

A partir de este trabajo surgen varias futuras líneas de investigación que pueden ser desarrolladas:

- Este método requiere ser implementado dentro de un código de elementos finitos para problemas tridimensionales. Esto es fundamental para solucionar problemas que no pueden ser idealizados en dos dimensiones.
- Optimización del código del Método de Elementos Finitos en Dos Escalas. En dicha optimización, entre otras cosas, se puede conseguir una importante disminución de tiempo de cálculo a través de una reducción de los fallos de la memoria "cache".
- Se requiere implementar elementos de junta y de contacto para reproducir el despegue y el deslizamiento friccional entre materiales componentes. También se puede implementar técnicas para abordar *discontinuidades fuertes* (Oliver & Simo, 1994) (Manzoli *et al.*, 1998). De esta forma, se puede realizar estudios más rigurosos de la localización.
- Puesto que este método soluciona el problema a través del Método de los Elementos Finitos en cada una de las escalas, es recomendable el uso de un estimador de error y un posterior método adaptativo (Guedes & Kikuchi, 1990). Sin embargo este tema requiere ser investigado profundamente antes de ser implementado, por el aumento del coste computacional que implica. Actualmente existen interesantes propuestas que deben ser tomadas en cuenta (Peraire & Patera, 1997) (Ainsworth & Oden, 1997) (Sarrate *et al.*, 1999).
- Se requiere investigar con mayor profundidad la estrategia de convergencia a nivel macroscópico, ya que es posible que se desarrollen mejoras importantes. Se debe realizar además una comparación entre los métodos convencionales de la determinación una matriz de rigidez secante y las propuestas presentadas en esta Monografía.
- Sería interesante investigar e implementar los efectos térmicos y de humedad, ya que al ser el medio heterogéneo, dichos efectos pueden generar tensiones importantes y contribuir a un envejecimiento prematuro del material ante cargas cíclicas.
- También se debe buscar extender esta formulación para grandes deformaciones en cada una de las escalas. Dicha extensión comprende una

reformulación de todo el problema a nivel teórico, así como también su implementación numérica.

- Una interesante línea de investigación, que se encuentra ya abierta, es el intento de reproducir el comportamiento a nivel macroscópico de materiales homogéneos mediante la *teoría de homogeneización* a través de la representación del comportamiento a nivel de la red cristalina, véase por ejemplo (Mieche *et al.*, 1999) (Steinmann *et al.*, 1998).
- Finalmente, una línea de investigación, abierta hace más de una década (Bendsøe & Kikuchi, 1988), que requiere ser profundizada es la optimización de materiales compuestos mediante la teoría de homogeneización, véase por ejemplo las siguientes referencias (Silva *et al.*, 1999) (Theocaris & Stavroulakis, 1999).

Parte IV
APÉNDICE

Apéndice A

BASES TERMODINÁMICAS

A.1 Primera ley de la termodinámica

La *primera ley de la termodinámica* (Oller, 1989) (Lubliner, 1972), postula el balance de energía. Es decir, exige la conservación total de la energía interna del sistema, mediante la relación de la *potencia mecánica deformativa* \mathcal{P}_d y la *cantidad de calor propio* \mathcal{Q}_p existente en el sólido, con el cambio de energía interna global que éste experimenta. Considérese a V el volumen de un sólido y S la superficie que encierra dicho volumen. Entonces, existe una cantidad de calor \mathcal{Q}_p (Calor propio más transferencia global de calor), regida por leyes físicas bien definidas (Newton, Fourier); existe además una cantidad \mathcal{E} denominada *densidad de energía interna*, tal que:

$$\frac{d}{dt} \left(\int_V \rho \mathcal{E} dV \right) = \mathcal{Q}_p + \mathcal{P}_d \quad (\text{A.1})$$

Se define la *potencia mecánica introducida* \mathcal{P}_{in} para todo el sólido como:

$$\mathcal{P}_{in} = \int_S \mathbf{t} \mathbf{v} dS + \int_V \rho \mathbf{b} \mathbf{v} dV \quad (\text{A.2})$$

donde \mathbf{t} es el *vector de tracción* (siendo $t_i = T_{ij}n_j$, tal que T_{ij} es el tensor de tensiones de Cauchy y n_i el vector normal a la superficie S), \mathbf{b} la *fuerza de volumen por unidad de masa*, ρ la *densidad de masa* y \mathbf{v} el *campo de velocidades*. Aplicando el teorema de la divergencia a la ecuación anterior se obtiene la siguiente expresión para la potencia introducida:

$$\mathcal{P}_{in} = \int_V \left[v_i \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} + \rho b_i \right) + T_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right] dV \quad (\text{A.3})$$

al término que se encuentra entre paréntesis se conoce como *balance de la cantidad de movimiento* para el sólido, es decir:

$$\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} + \rho b_i = \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} \quad (\text{A.4})$$

obsérvese que si la aceleración es nula ($\partial v_i/\partial t = 0$), la ecuación anterior se convierte en la ecuación de *equilibrio estático*. La potencia introducida resulta:

$$\mathcal{P}_{in} = \int_V \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v_i v_i \right) dV + \int_V T_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} dV \quad (\text{A.5})$$

en donde la primera integral de la ecuación anterior se conoce como la *potencia cinética* $\dot{\mathcal{K}}$. La expresión de la potencia deformativa queda:

$$\mathcal{P}_d = \mathcal{P}_{in} - \dot{\mathcal{K}} = \int_V T_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} dV. \quad (\text{A.6})$$

La cantidad de calor propio (\mathcal{Q}_p , también conocido como potencia térmica) es igual a la cantidad calor distribuida en el interior del sólido más la que se introduce por las fronteras y puede expresarse como:

$$\mathcal{Q}_p = \int_V \rho r dV - \int_S q_i n_i dS \quad (\text{A.7})$$

donde q ($q = q_i n_i$) es el flujo de calor por conducción, introducido por las fronteras del sólido, q_i el campo vectorial del flujo de calor, n_i la normal saliente (en un punto) a la superficie que envuelve el sólido, r una fuente distribuida de calor por unidad de masa, denominada *radiación*. Naturalmente, el signo negativo del segundo término del lado derecho de la ecuación A.7 se refiere al calor que recibe el sólido a través de la superficie, puesto que el flujo positivo es hacia afuera del sólido.

A través de la definición de la potencia mecánica deformativa (ecuación A.6) y potencia térmica (ecuación A.7), la ecuación de la conservación de la energía (ecuación A.1) para problemas cuasi estáticos, se escribe

$$\int_V \rho \dot{\mathcal{E}} dV = \int_V \rho r dV - \int_S q_i n_i dS + \int_V T_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} dV. \quad (\text{A.8})$$

Transformado la integral de superficie en una de volumen, mediante el teorema de Green, y luego de algunas operaciones matemáticas, se obtiene la siguiente expresión local Euleriana de la primera ley de la termodinámica

$$\rho \dot{\mathcal{E}} = \rho r - \nabla q_i + T_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \quad (\text{A.9})$$

como: $\partial v_i / \partial x_j = L_{ij} = D_{ij} + \Omega_{ij}$, que multiplicado por el tensor simétrico de tensiones, se tiene

$$T_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = T_{ij} L_{ij} = T_{ij} D_{ij} + \underbrace{T_{ij} \Omega_{ij}}_{=0} \quad (\text{A.10})$$

entonces resulta la siguiente expresión para la primera ley de la termodinámica:

$$\rho \dot{\mathcal{E}} = (\rho r - \nabla q_i) + T_{ij} D_{ij} \quad (\text{A.11})$$

A.2 La segunda ley de la termodinámica

La *segunda ley de la termodinámica* (Oller, 1989) (Lubliner, 1972), postula el balance de la *entropía*. Se define como entropía por unidad de masa (o densidad de entropía) \mathcal{S} como una función de estado relacionada con el calor, tal que $\dot{\mathcal{S}} = 0$ en un proceso isentrópico y adiabático ($\rho r - \nabla q_i = 0$), y que para un proceso reversible puede expresarse como

$$\dot{\mathcal{S}} = \frac{1}{\theta} \dot{q} \quad \Rightarrow \quad \oint \dot{\mathcal{S}} dt = \left(\oint \frac{\dot{q}}{\theta} dt \right)_{rev} \quad (\text{A.12})$$

donde q es el flujo de calor por conducción y θ un campo escalar que representa la temperatura local absoluta. La entropía global del sólido vale

$$\mathcal{S}^{glob} \doteq \int_V \rho \mathcal{S} dV \quad (\text{A.13})$$

Existen muchas formas de presentar el segundo principio de la termodinámica, una de ellas es mediante la ecuación de *Clasius-Duhem*. Para ello se supone que existe un campo escalar θ y otro \mathcal{S} , ambos son funciones del estado local, tal que a partir de la ecuación A.7 se tiene

$$\mathcal{Q}_p = \int_V \rho r dV - \int_S q_i n_i dS = \dot{\mathcal{S}}_m^{glob} \theta \quad (\text{A.14})$$

o también, expresado de la siguiente forma

$$\dot{\mathcal{S}}_m^{glob} = \int_V \frac{\rho r}{\theta} dV - \int_S \frac{q_i}{\theta} n_i dS \quad (\text{A.15})$$

que representa, el cambio de entropía introducido por la transferencia de calor al sistema, en forma instantánea.

De acuerdo a la segunda ley de la termodinámica, en un proceso irreversible se cumple que el cambio de la producción interna de entropía es mayor o igual que el cambio de entropía introducida, es decir

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S^{glob} &\geq \dot{S}_{in}^{glob} \\ \frac{d}{dt} \int_V \rho S dV &\geq \int_V \frac{\rho r}{\theta} dV - \int_S \frac{q_i}{\theta} n_i dS \end{aligned} \quad (A.16)$$

esta ecuación se la conoce como desigualdad de Clausius-Duhem. Transformado la integral de superficie en integral de volumen (a través del teorema de Green), se obtienen las siguientes expresiones de forma local Euleriana:

$$\begin{aligned} \dot{S} - \frac{r}{\theta} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left(\frac{q_i}{\theta} \right) &\geq 0 \\ \rho \dot{S} - \rho \frac{r}{\theta} + \frac{1}{\theta} \nabla q_i - \frac{1}{\theta^2} q_i \nabla \theta &\geq 0 \\ \rho \theta \dot{S} - (\rho r - \nabla q_i) - \frac{1}{\theta} q_i \nabla \theta &\geq 0 \\ \mathcal{D} = \theta \dot{S} - (r - \frac{1}{\rho} \nabla q_i) - \frac{1}{\rho \theta} q_i \nabla \theta &\geq 0 \end{aligned} \quad (A.17)$$

combinando esta última con la forma local Euleriana del primer principio (ver ecuación A.11), resulta la disipación local por unidad de masa (o producción interna de entropía), dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{D} = \rho(\theta \dot{S} - \dot{\mathcal{E}}) + T_{ij} D_{ij} - \frac{1}{\theta} q_i \nabla \theta &\geq 0 \\ \mathcal{D} = \theta \dot{S} - \dot{\mathcal{E}} + \frac{1}{\rho} T_{ij} D_{ij} - \frac{1}{\rho \theta} q_i \nabla \theta &\geq 0 \end{aligned} \quad (A.18)$$

Para procesos termo-mecánico, donde el problema térmico es desacoplado del mecánico, se impone una condición derivada del método de Coleman, que transforma la desigualdad de Clausius-Duhem en dos desigualdades desacopladas, donde se puede exigir el cumplimiento de ambas de forma independiente. Así, la disipación mecánica y térmica se puede expresar como:

$$\mathcal{D}_m = \theta \dot{S} - \dot{\mathcal{E}} + \frac{1}{\rho} T_{ij} D_{ij} \geq 0 \quad (A.19)$$

$$\mathcal{D}_\theta = -q_i \nabla \theta \geq 0 \quad (A.20)$$

La ecuación A.19 se conoce como *desigualdad de Clausius-Planck*, y la ecuación A.20 expresa que necesariamente el calor fluye desde la zona de

mayor temperatura hacia la zona de menor temperatura.

Una forma conveniente de la expresión de la disipación se formula en base a la *energía libre de Helmholtz* Ψ (por unidad de volumen), ésta se define como:

$$\Psi = \mathcal{E} - S\theta \quad (\text{A.21})$$

y luego de algunas operaciones,

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \Psi - S\theta \\ \frac{d\mathcal{E}}{dt} &= \dot{\Psi} + S\dot{\theta} + \dot{S}\theta \\ \dot{S}\theta - \dot{\mathcal{E}} &= -\dot{\Psi} - S\dot{\theta} \end{aligned}$$

se obtiene una nueva expresión para la forma espacial o Euleriana de la disipación:

$$\mathcal{D}_m = -\rho(\dot{\Psi} + \dot{S}\theta) + T_{ij}D_{ij} \geq 0 \quad (\text{A.22})$$

Considerando deformaciones infinitesimales ($\sigma_{ij} = T_{ij}$; $\epsilon_{ij} = D_{ij}$), las expresiones para la disipación mecánica quedan como se indica en el siguiente cuadro:

En función de la densidad de energía interna:

$$\mathcal{D}_m = \rho\theta\dot{S} - \rho\dot{\mathcal{E}} + \sigma_{ij}\dot{\epsilon}_{ij} \geq 0 \quad (\text{A.23})$$

En función de la energía libre de Helmholtz:

$$\mathcal{D}_m = -\rho\dot{\Psi} + \rho\dot{S}\theta + \sigma_{ij}\dot{\epsilon}_{ij} \geq 0 \quad (\text{A.24})$$

Ahora bien, admítase la existencia de un estado local termodinámico único para el material, y que está determinado por el tensor de deformaciones ϵ , la entropía S por unidad de volumen y un grupo de variables internas α_i (donde α puede ser un escalar (o conjunto de escalares; $i=1, \dots, n$), un vector (o conjunto de vectores), etc.) las cuales pueden representar por ejemplo: deformaciones internas, densidad de dislocaciones, alcance de transformación de fase, reacción química, concentración de imperfecciones en la red cristalina, parámetros que representen el cambio de conformación molecular, talla del grano, endurecimiento, etc. De tal forma que, la energía interna es una

función del estado termodinámico, tal que la energía interna local por unidad de volumen es $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\mathcal{S}, \varepsilon, \alpha)$. Entonces, la disipación mecánica resulta

$$\mathcal{D} = \left(\theta - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathcal{S}} \right) \dot{\mathcal{S}} + \left(\frac{\sigma_{ij}}{\rho} - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varepsilon_{ij}} \right) \dot{\varepsilon}_{ij} - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \alpha_i} \dot{\alpha}_i \geq 0 \quad (\text{A.25})$$

Aplicando el método de Coleman (Lubliner, 1985) a la ecuación A.25 y admitiendo que $\dot{\mathcal{S}}$ y $\dot{\varepsilon}_{ij}$ representan las variaciones temporales de las variables libres, se tiene que para garantizar el cumplimiento de la desigualdad de Clausius-Planck, para un cierto estado termodinámico, los multiplicadores de estas variables libres deben ser idénticamente iguales a cero; resultando de aquí las siguientes relaciones termodinámicas:

$$\theta = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathcal{S}} \quad ; \quad \sigma_{ij} = \rho \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varepsilon_{ij}} \quad (\text{A.26})$$

entonces,

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \alpha_i} \dot{\alpha}_i \geq 0 \quad (\text{A.27})$$

es decir, los procesos internos reducen la energía interna.

O también, si se considera la energía libre de Helmholtz, la cual es función de un estado termodinámico, tal que $\Psi = \Psi(\varepsilon, \theta, \alpha)$, entonces la disipación mecánica resulta:

$$\mathcal{D} = \left(\frac{\sigma_{ij}}{\rho} - \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_{ij}} \right) \dot{\varepsilon}_{ij} - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \theta} + \mathcal{S} \right) \dot{\theta} - \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_i} \dot{\alpha}_i \geq 0 \quad (\text{A.28})$$

y aplicando el método de Coleman, se tiene

$$\mathcal{S} = -\frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \quad ; \quad \sigma_{ij} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_{ij}} \quad (\text{A.29})$$

y se debe cumplir que

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_i} \dot{\alpha}_i \geq 0 \quad (\text{A.30})$$

Apéndice B

DEGRADACIÓN DE RIGIDEZ

B.1 Bases del modelo de degradación

En este apéndice se presenta el modelo utilizado para representar el comportamiento de materiales tales como: hormigón, mortero de cemento, etc. Esta ley de comportamiento denominada de *daño* o *degradación* cumple con las leyes de la termodinámica y se basa en la modificación del *tensor constitutivo*. Existen diferentes formulaciones para caracterizar la degradación o daño del material. Entre estos, los modelos isotrópicos son relativamente sencillos y ampliamente aceptados para esta clase de materiales. La ecuación constitutiva implementada se fundamenta en las siguientes publicaciones (Oliver *et al.*, 1990) (Oller, 1988).

Al inicio del proceso de carga se considera que el material es un material elástico isótropo en perfecto estado. Conforme se incrementa la carga el material se acerca a un límite o umbral de tensiones que marca el inicio de la degradación, al sobrepasar este umbral el material se degrada, perdiendo rigidez. Este comportamiento se consigue utilizando una variable interna escalar d llamada de *degradación* o *daño*, que es la medida de la pérdida de rigidez y que varía dentro del rango de 0 a 1. La ecuación del modelo de daño isótropo se expresa como:

$$\sigma = (1 - d) \mathbf{C} : \varepsilon \quad (\text{B.1})$$

donde σ y ε son los tensores de tensiones y deformaciones, d la variable de daño, y \mathbf{C} es el tensor constitutivo elástico inicial. Esta ecuación revela algunas consecuencias básicas, estas son:

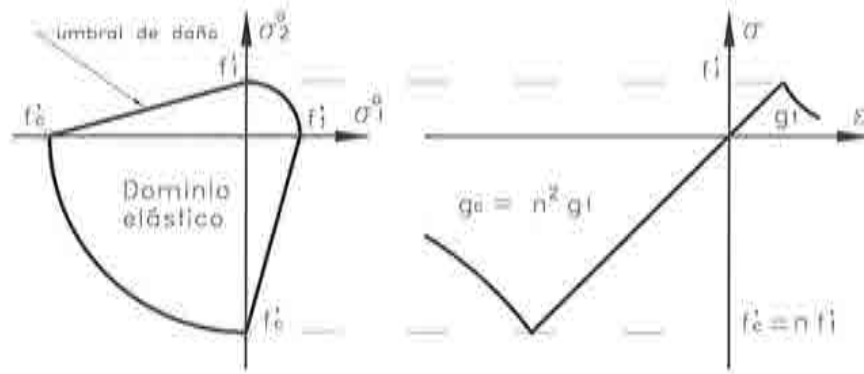


Figura B.1: Ecuación constitutiva de daño

1. Puesto que la rigidez se afecta únicamente por un valor escalar se mantiene la isotropía del material.
2. Se puede integrar de manera explícita la ecuación constitutiva, ya que en ella solo intervienen valores actuales de tensión y deformación.
3. La ecuación constitutiva cae dentro de los modelos estándar de descomposición de tensiones, dentro de una cuota elástica y otra inelástica, tal como se indica en la siguiente transformación:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} : \varepsilon_{kl} - d \cdot C_{ijkl} : \varepsilon_{kl} = \sigma_{ij}^a - \sigma_{ij}^i \quad (\text{B.2})$$

Naturalmente este modelo está completamente definido si se determina el valor de la variable interna d en cada instante durante el proceso de deformación.

La definición completa de la ecuación constitutiva requiere de:

1. Definición de las variables del problema:
 - Variable libre: ε
 - Variable interna: d
2. Establecimiento de un potencial, en este caso se define la energía libre como:

$$\Psi(\varepsilon, d) = (1 - d)\Psi^o(\varepsilon) \quad ; \quad \Psi^o(\varepsilon) = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\text{B.3})$$

3. Determinación de los requerimientos termomecánicos: a través de la inecuación de Clausius-Planck válida para problemas termo-mecánicos desacoplados, se tiene

$$\mathcal{D} = \left(\sigma_{ij} - \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_{ij}} \right) \dot{\varepsilon}_{ij} - \frac{\partial \Psi}{\partial d} \dot{d} \geq 0 \quad (\text{B.4})$$

mediante el método de Coleman (Lubliner, 1985), se tiene:

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_{kl}} = (1 - d) C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\text{B.5})$$

y

$$\mathcal{D} = \frac{\partial \Psi}{\partial d} \dot{d} \geq 0 \quad (\text{B.6})$$

y puesto que $\partial \Psi / \partial d = -\Psi^o$ de donde, la disipación es

$$\mathcal{D} = \Psi^o \dot{d} \quad (\text{B.7})$$

4. La definición de una norma τ , del tensor de deformaciones ε (o alternativamente del tensor de tensiones no dañado σ^o). Esta norma se le denomina también como *deformación equivalente*. Sirve para comparar diferentes estados del material, así es posible distinguir procesos de carga y descarga. A continuación se presentan algunas posibles alternativas:

Modelo elástico simétrico .- Para caracterizar un dominio elástico simétrico la norma se define en función de la energía elástica (Ψ^o). Este dominio elástico se representa por un elipsoide centrado en el origen en el espacio de deformaciones o tensiones.

$$\tau = \sqrt{2\Psi_0} = \sqrt{\varepsilon : C : \varepsilon} = \sqrt{\sigma : C : \sigma} = \sqrt{\sigma : \varepsilon} \quad (\text{B.8})$$

Modelo solo tracción .- Este modelo es útil cuando la degradación del material se produce únicamente por tracción. La norma se determina mediante la *función rumpa* ($\langle \cdot \rangle$), está toma únicamente los valores positivos del argumento, el cual corresponde a las tensiones principales.

$$\tau = \sqrt{\sigma : \langle \varepsilon \rangle} \quad (\text{B.9})$$

Modelo no simétrico : Este modelo puede ser utilizado para representar materiales que el dominio elástico en tracción difiere del dominio en compresión. Por ejemplo la resistencia a compresión del hormigón es aproximadamente 10 veces superior a la resistencia en tracción. Para caracterizar este dominio se utiliza la siguiente función:

$$\tau = \left(\zeta + \frac{1-\zeta}{n} \right) \sqrt{\sigma : \epsilon} \quad (\text{B.10})$$

donde ζ es un factor de peso que depende del estado de tensión σ^o , definido por

$$\zeta = \frac{\sum_{i=1}^3 \langle \sigma_i \rangle}{|\sigma_i|} \quad (\text{B.11})$$

y n es la relación de la resistencia a compresión sobre la resistencia a tracción. En el hormigón esta relación es alrededor de 10, tal como se expresa a continuación:

$$n = \frac{f'_c}{f'_t} \approx 10 \quad (\text{B.12})$$

5. Criterio de daño.- Se formula una función (F) que divide el espacio de tensiones admisibles, en un dominio elástico ($F < 0$) y un dominio de daño ($F = 0$). Este espacio tensional es función de la norma τ y un umbral de daño que se denomina r . Entonces, es posible expresar dicho espacio como:

$$F(\tau, r) = G(\tau^t) - G(r^t) \leq 0 \quad \text{para todo } t \geq 0 \quad (\text{B.13})$$

donde $G(\cdot)$ es una función escalar monótona. Esta función $F(\tau, r) \leq 0$ está definida en el espacio de deformaciones o tensiones no dañadas. La forma más simple de este criterio es:

$$F(\tau, r) = \tau^t - r^t \leq 0 \quad \text{para todo } t \geq 0 \quad (\text{B.14})$$

donde τ^t es la norma descrita anteriormente y r^t es el umbral de daño en el tiempo t . Si r^* es el valor inicial del umbral (propiedad del material), se debe cumplir que $r^t \geq r^o = r^*$. El daño ocurre cuando la norma τ excede el valor del actual umbral.

6. Leyes de evolución.- Se han definido las siguientes leyes de evolución para el umbral de daño y la variable de degradación:

$$\dot{r} = \dot{\mu} \quad (\text{B.15})$$

$$\dot{d} = \dot{\mu} \frac{\partial F(\tau, r)}{\partial \tau} = \dot{\mu} \frac{dG(\tau)}{d\tau} \quad (\text{B.16})$$

donde $\dot{\mu}$ es el parámetro de consistencia de daño que se utiliza para definir las condiciones de carga y descarga de acuerdo a las condiciones de Kuhn-Tucker:

$$F(\tau, r) \leq 0, \quad \dot{\mu} \geq 0, \quad \dot{\mu} \times F(\tau, r) = 0 \quad (\text{B.17})$$

La condición de consistencia establece que si $F(\tau, r) = 0$ necesariamente se cumple:

$$\mu \times \dot{F}(\tau, r) = 0 \quad (\text{B.18})$$

Finalmente la expresión de la disipación puede escribirse como (Simo & JU, 1987)

$$\mathcal{D} = \Psi^o \dot{d} = \Psi^o G'(r) \dot{r} \quad (\text{B.19})$$

La evolución de las variables internas puede ser integradas explícitamente tomando

$$r^t = \max\{r^o, \max(\tau^s)\} \quad 0 \leq s \leq t \quad (\text{B.20})$$

$$d^t = G(r^t) \quad (\text{B.21})$$

lo cual describe la evolución completa de las variables internas en una situación de carga y descarga. La función $G(r^t)$ que define la evolución del daño (desde 0 a 1) es (Oliver *et al.*, 1990):

$$G(r^t) = 1 - \frac{r^*}{r^t} \exp\left[A\left(1 - \frac{r^t}{r^*}\right)\right] \quad 0 < r^* \leq r^t \quad (\text{B.22})$$

donde,

$$r^* = \frac{f'_t}{\sqrt{E^o}} ; \quad E^o \text{ es Módulo elástico} \quad (\text{B.23})$$

La disipación total de energía específica por unidad de volumen para un proceso cualquiera es

$$g = \int_0^\infty \mathcal{D} dt = \int_0^\infty \Psi^o G'(r) \dot{r} dt \quad (\text{B.24})$$

En particular para el modelo con degradación en tracción y compresión es fácil ver que

$$\begin{aligned} \tau^2 &= 2\Psi^o && \text{en tensión uniaxial} \\ \tau^2 &= \frac{2}{n^2} \Psi^o && \text{en compresión uniaxial} \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

sustituyendo la expresión B.25 en B.24 y utilizando la función $G(\cdot)$ definida en B.22 e integrando resulta

$$\begin{aligned} g_t &= \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{A}\right)(r^*)^2 && \text{en tensión uniaxial} \\ g_c &= \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{A}\right)(nr^*)^2 && \text{en compresión uniaxial} \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

donde g_t y g_c son la energía específica disipada dentro de un proceso de tracción o compresión respectivamente. Obsérvese que desde esta última expresión resulta

$$g_c = n^2 g_t, \quad \text{donde: } n = \frac{f'_c}{f'_t} \quad (\text{B.27})$$

finalmente, es posible relacionar la energía específica g con la energía de fractura G_f por unidad de área (que usualmente se supone que es una propiedad del material), entonces

$$g_t = \frac{G_f}{l^*} \quad (\text{B.28})$$

donde l^* es la longitud característica del elemento finito. Utilizando la ecuación B.26, B.28 y B.23 se obtiene que

$$A = \left(\frac{G_f E^0}{l^* (f'_t)^2} - \frac{1}{2}\right)^{-1} \geq 0 \quad (\text{B.29})$$

El valor de A junto con el valor de n determina la forma de la curva uniaxial de tensión-deformación. Como A tiene que ser positivo, esta expresión también delimita el máximo tamaño del elemento que puede ser utilizado en la malla de elementos finitos.

Por otra parte, el tensor constitutivo tangente (C^d) se puede obtener de forma explícita. Nótese que el incremento de tensión vale

$$\begin{aligned} \dot{\sigma} &= C^d : \varepsilon \\ &= (1-d)C : \dot{\varepsilon} - \dot{d}C : \varepsilon \\ &= (1-d)C : \dot{\varepsilon} - \dot{d}\sigma \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

en régimen elástico

$$\dot{\sigma} = (1-d)C : \dot{\varepsilon}, \quad \dot{d} = 0$$

en cambio, en caso de carga

$$\dot{d} = \dot{G}(r) \bar{r}, \quad \dot{r} = \dot{r}$$

entonces, el incremento de tensión puede escribirse como

$$\begin{aligned} \dot{\sigma} &= (1-d)\mathbf{C} : \dot{\varepsilon} - \frac{\dot{G}(r)}{\tau} \boldsymbol{\sigma} \otimes \boldsymbol{\sigma} : \dot{\varepsilon} \\ \dot{\sigma} &= \left[(1-d)\mathbf{C} - \frac{\dot{G}(r)}{\tau} \boldsymbol{\sigma} \otimes \boldsymbol{\sigma} \right] : \dot{\varepsilon} \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

y el tensor tangente queda

$$\mathbf{C}^d = (1-d)\mathbf{C} - \frac{\dot{G}(r)}{\tau} \boldsymbol{\sigma} \otimes \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{B.32})$$

B.2 Algoritmo de implementación

El algoritmo de esta ecuación constitutiva de degradación se presenta en el siguiente cuadro, en donde se considera el modelo no simétrico.

<p>DATOS INICIALES (Instante $t + \Delta t$): Propiedades del Material: f'_t, n, E_o, μ, G_f Valores actuales: $\epsilon^{t+\Delta t}, d^t, r^t$</p>
<p>1) DETERMINACIÓN DE LA NORMA EN ESTADO NO DAÑADO: Si $t=0$ entonces el valor inicial de $r^o = r^*$ Determinación del parámetro A: $A = \left(\frac{G_f E_o}{r^* (f'_t)^2} - \frac{1}{2} \right)^{-1}$ Tensor de tensiones en el estado no dañado: $\sigma^{t+\Delta t} = C : \epsilon^{t+\Delta t}$ Evaluación de la norma $\tau^{t+\Delta t}$ (modelo no simétrico): $\tau = \left(\zeta + \frac{1-\zeta}{n} \right) \sqrt{\sigma^{t+\Delta t} : \epsilon^{t+\Delta t}}$ donde ζ es: $\zeta = \frac{\sum_{i=1}^3 (\sigma_i^{t+\Delta t})}{ \sigma^{t+\Delta t} }$</p> <p>2) SI EL ESTADO ES ELÁSTICO (Si $\tau^{t+\Delta t} < \tau^t$) ENTONCES: Valor del umbral de daño: $r^{t+\Delta t} = r^t, \quad \dot{r} = 0$ Valor de la degradación: $d^{t+\Delta t} = d^t = G(r^{t+\Delta t}), \quad \dot{d} = 0$ Cálculo del tensor de tensiones: $\sigma^{t+\Delta t} = (1 - d^{t+\Delta t}) C : \epsilon^{t+\Delta t}$ SALIR.</p> <p>3) SI SE PRODUCE DEGRADACIÓN (Si $\tau^{t+\Delta t} \geq \tau^t$) ENTONCES: Valor del umbral de daño: $r^{t+\Delta t} = \tau^{t+\Delta t}, \quad \dot{r} = \dot{\tau}$ Valor de la degradación: $d^{t+\Delta t} = G(r^{t+\Delta t})$ Cálculo del tensor de tensiones: $\sigma^{t+\Delta t} = (1 - d^{t+\Delta t}) C : \epsilon^{t+\Delta t}$</p> <p>4) DETERMINACIÓN DEL TENSOR CONSTITUTIVO TANGENTE: $C^d = (1 - d) C - \frac{\dot{G}(r^{t+\Delta t})}{\dot{r}} \sigma^{t+\Delta t} \otimes \sigma^{t+\Delta t}$</p>

Apéndice C

PLASTICIDAD

En este apéndice se presenta la formulación de la ecuación constitutiva implementada para representar el comportamiento lineal y no lineal de ciertos materiales como los metales. Es decir, bajo cierto estado tensional provocado por fuerzas externas, el comportamiento de estos materiales presenta una relación tensión-deformación lineal hasta alcanzar un umbral de tensiones, a partir del cual dicha relación cambia significativamente, generándose comportamientos como: plasticidad perfecta, endurecimiento o ablandamiento. Simultáneamente se producen deformaciones permanentes o plásticas.

C.1 Bases de la ecuación constitutiva

La presentación de esta ley de comportamiento (formulada en el espacio de tensiones) así como la implementación están basados en (Simo & Hughes, 1998). Se realizan las siguientes consideraciones:

1. Descomposición aditiva de las deformaciones. Es decir, se acepta que la deformación total está formada por una parte elástica y otra inelástica

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^p \quad (\text{C.1})$$

donde $\boldsymbol{\varepsilon}$ se guarda como una variable independiente y la evolución de $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ está definida a través de una *regla de flujo* (presentada más adelante).

2. Relación tensión-deformación capaz de describir el comportamiento elástico del material. En este caso, el tensor de tensiones $\boldsymbol{\sigma}$ está relacionado a la deformación elástica $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ mediante la función de energía almacenada W , de acuerdo a la siguiente relación (hiperelástica)

$$\boldsymbol{\sigma}(x, t) = \frac{\partial W(x, \boldsymbol{\varepsilon}^e)}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e(x, t)} \quad (\text{C.2})$$

donde W presenta una forma cuadrática de la deformación elástica ($W = (1/2)\boldsymbol{\varepsilon}^e \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}^e$), y \mathbf{C} es el tensor constitutivo elástico, el cual se considera constante. Entonces

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}(\boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^p) \quad (\text{C.3})$$

3. *Espacio de tensiones y condición de fluencia*: Se define una función f llamada *criterio de fluencia*, el cual restringe el estado $\{\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}\}$ (donde \mathbf{q} representa el endurecimiento) a un espacio de tensiones admisibles \mathbb{E}_σ , definido como

$$\mathbb{E}_\sigma = \{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R} \mid f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) \leq 0\}, \quad (\text{C.4})$$

por lo tanto, si el estado de $(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q})$ cae dentro de este espacio, se considera que no hay cambio en las variables internas $(\boldsymbol{\varepsilon}^p, \dot{\mathbf{q}})$, esto es

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = 0 \text{ y } \dot{\mathbf{q}} = 0 \text{ si } f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) < 0, \quad (\text{C.5})$$

por consiguiente, la respuesta es elástica

$$f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) < 0 \Rightarrow \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (\text{C.6})$$

Entonces, el *rango elástico* es un espacio abierto que puede ser descrito de la siguiente forma

$$\text{int}(\mathbb{E}_\sigma) = \{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R} \mid f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) < 0\} \quad (\text{C.7})$$

y la *superficie de fluencia* es el contorno del espacio de tensiones $\partial\mathbb{E}_\sigma$ definido como

$$\partial\mathbb{E}_\sigma = \{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R} \mid f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) = 0\} \quad (\text{C.8})$$

de tal forma que

$$\mathbb{E}_\sigma = \text{int}(\mathbb{E}_\sigma) \cup \partial\mathbb{E}_\sigma \quad (\text{C.9})$$

4. Una *regla de flujo* y una *ley de endurecimiento* que dan lugar a la irreversibilidad del flujo plástico. Se considera que un cambio sobre $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$ y $\dot{\mathbf{q}}$ toma lugar únicamente cuando $f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) = 0$ y dicho cambio puede ser descrito de la siguiente manera

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \gamma \mathbf{r}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}), \quad (\text{C.10})$$

$$\dot{\mathbf{q}} = \gamma \mathbf{h}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}). \quad (\text{C.11})$$

donde \mathbf{r} y \mathbf{h} son funciones que definen la dirección del flujo plástico y el tipo de endurecimiento. El parámetro $\gamma \geq 0$ es una función no negativa, llamado *parámetro de consistencia*, el cual obedece unas condiciones complementarias denominadas de *Kuhn-Tucker*.

5. *Condiciones complementarias de Kuhn-Tucker o condiciones carga-descarga.* Obsérvese que el estado de $(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q})$ tiene que ser admisible y al mismo tiempo γ no negativo, es decir

$$f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) \leq 0 \quad \text{y} \quad \gamma \geq 0 \quad (\text{C.12})$$

y puesto que, si

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) < 0 &\Rightarrow \gamma = 0 \\ \gamma > 0 &\Rightarrow f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) = 0. \end{aligned}$$

para cumplir que las tensiones sean admisibles y el incremento de deformación plástica se produzca únicamente en la superficie de fluencia, se requiere que

$$\gamma f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) = 0. \quad (\text{C.13})$$

6. *Condición de consistencia,* considérese (en un tiempo t) que el estado de $(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q})$ esta sobre la superficie de fluencia, esto es

$$[\boldsymbol{\sigma}(t), \mathbf{q}(t)] \in \partial \mathbb{E}_\sigma \iff f[\boldsymbol{\sigma}(t), \mathbf{q}(t)] = 0$$

entonces, para que la tensión siga manteniéndose dentro del espacio admisible de tensiones, debe cumplirse

$$\begin{aligned} \gamma > 0 &\Rightarrow f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) = 0. \\ f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) < 0 &\Rightarrow \gamma = 0 \end{aligned}$$

por lo tanto, se tiene la siguiente condición adicional

$$\gamma f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) = 0 \quad (\text{C.14})$$

esta condición también se la conoce como *condición de persistencia*.

Ahora bien, utilizando la regla de la cadena, se tiene

$$\begin{aligned} \dot{f}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) &= \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} \cdot \dot{\mathbf{q}} \\ &= \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \mathbf{C} : (\dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p) + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} \cdot \dot{\mathbf{q}} \\ &= \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \mathbf{C} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \gamma \left(\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \mathbf{C} : \mathbf{r} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} \cdot \mathbf{h} \right) \leq 0 \quad (\text{C.15}) \end{aligned}$$

y puesto que $\gamma > 0 \Rightarrow \dot{f}(\sigma, q) = 0$, resulta

$$\gamma = \frac{\frac{\partial f}{\partial \sigma} : \mathbf{C} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}{\frac{\partial f}{\partial \sigma} : \mathbf{C} : \mathbf{r} + \frac{\partial f}{\partial q} \cdot \mathbf{h}} \quad (\text{C.16})$$

Finalmente,

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C} : (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p) = \mathbf{C} : (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \gamma \mathbf{r}) \quad (\text{C.17})$$

sustituyendo la ecuación C.16 en la ecuación C.17, se puede escribir

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}^{ep} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \quad (\text{C.18})$$

donde, \mathbf{C}^{ep} es el *tensor constitutivo elásto-plástico* dado por la siguiente expresión

$$\mathbf{C}^{ep} \gamma = \mathbf{C} \quad \text{si } \gamma = 0 \quad (\text{C.19})$$

$$\mathbf{C}^{ep} \gamma = \mathbf{C} - \frac{\mathbf{C} : \mathbf{r} \otimes \mathbf{C} : \frac{\partial f}{\partial \sigma}}{\frac{\partial f}{\partial \sigma} : \mathbf{C} : \mathbf{r} + \frac{\partial f}{\partial q} \cdot \mathbf{h}} \quad \text{si } \gamma > 0 \quad (\text{C.20})$$

Obsérvese que en general \mathbf{C}^{ep} puede ser no simétrico, excepto en el caso en que

$$\mathbf{r}(\sigma, q) = \frac{\partial f(\sigma, q)}{\partial \sigma} \quad (\text{C.21})$$

lo cual se conoce como una *regla de flujo asociada*.

C.2 Modelo J2 con endurecimiento isótropo y cinemático

En este caso las variables internas de plasticidad son $\mathbf{q} := \{\alpha, \tilde{\beta}\}$, donde α es la *deformación plástica equivalente* que define el *endurecimiento isótropo*¹ de la superficie de fluencia de von Mises y $\tilde{\beta}$ define el centro de dicha superficie dentro del espacio de tensiones desviadoras. Entonces, el modelo de plasticidad J2 resulta de las siguiente condición de fluencia, regla de flujo y ley de endurecimiento:

$$\boldsymbol{\eta} := \text{dev}[\boldsymbol{\sigma}] - \tilde{\beta}, \quad \text{tr}[\tilde{\beta}] := 0, \quad (\text{C.22})$$

$$f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{q}) = \|\boldsymbol{\eta}\| - \sqrt{\frac{2}{3}}K(\alpha), \quad (\text{C.23})$$

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p = \gamma \frac{\boldsymbol{\eta}}{\|\boldsymbol{\eta}\|}, \quad (\text{C.24})$$

$$\dot{\tilde{\beta}} = \gamma \frac{2}{3} H'(\alpha) \frac{\boldsymbol{\eta}}{\|\boldsymbol{\eta}\|}, \quad (\text{C.25})$$

$$\dot{\alpha} = \gamma \sqrt{\frac{2}{3}}. \quad (\text{C.26})$$

donde, $\boldsymbol{\eta}$ es el vector normal a la superficie de von Mises, $\text{dev}[\cdot]$ representa el tensor desviador y $\text{tr}[\cdot]$ la traza. Las funciones $K'(\alpha)$ y $H'(\alpha)$ se conocen como *módulo de endurecimiento isótropo* y *cinemático*, respectivamente. Siendo $\|\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p\| = \gamma$, y la relación C.26 implica que

$$\alpha(t) = \int_0^t \sqrt{\frac{2}{3}} \|\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p(\tau)\| d\tau \quad (\text{C.27})$$

lo cual coincide con la usual definición de deformación plástica equivalente.

La función de endurecimiento utilizada está formada por un endurecimiento cinemático lineal y otra que corresponde a un endurecimiento isótropo no lineal, el cual corresponde a un endurecimiento de saturación del tipo exponencial, es decir,

$$K(\alpha) = \sigma_Y + \tilde{H}\alpha + (\sigma_\infty - \sigma_Y)[1 - \exp(-\delta\alpha)], \quad (\text{C.28})$$

donde $\tilde{H} \geq 0$, $\sigma_\infty \geq \sigma_Y > 0$, $\delta \geq 0$ son constantes del material.

¹Se entiende por *endurecimiento isótropo*, una expansión del espacio de tensiones admisibles \mathbb{E}_σ . En cambio, el *endurecimiento cinemático* se caracteriza por el traslado de este espacio de tensiones.

Ahora, el parámetro de consistencia presentado en la ecuación C.16 se escribe como

$$\gamma = \frac{\langle \mathbf{n} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle}{1 + \frac{H' + K'}{3\mu}}, \quad (\text{C.29})$$

donde

$$\mathbf{n} = \frac{\boldsymbol{\eta}}{\|\boldsymbol{\eta}\|}, \quad (\text{C.30})$$

note que $\text{tr}[\mathbf{n}] = 0$, de aquí que $\mathbf{n} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \equiv \mathbf{n} : \text{dev}[\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}]$.

Finalmente, en régimen de carga el tensor constitutivo tangente se obtiene como

$$\mathbf{C}^{ep} = k\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2\mu \left[\mathbf{I} - \frac{1}{3}\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} - \frac{\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}}{1 + \frac{H' + K'}{3\mu}} \right], \quad \text{para } \gamma > 0, \quad (\text{C.31})$$

donde, $\mathbf{1}$ representa el tensor identidad de segundo orden y \mathbf{I} el tensor identidad de cuarto orden.

C.2.1 Algoritmo de implementación

Algoritmo de retorno radial (con endurecimiento isótropico y cinemático):

1) CÁLCULO DEL ESTADO INICIAL (*trial*):

Tensor desviador de deformaciones

$$\mathbf{e}_{n+1} = \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} - \frac{1}{3}(\text{tr}[\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}])\mathbf{1}$$

Tensor desviador de tensiones

$$\mathbf{s}_{n+1}^{trial} = 2\mu(\mathbf{e}_{n+1} - \mathbf{e}_n^p)$$

Tensiones relativas

$$\boldsymbol{\xi}_{n+1}^{trial} = \mathbf{s}_{n+1}^{trial} - \beta_n$$

2) VERIFICACIÓN DE LA CONDICIÓN DE FLUENCIA:

$$f_{n+1}^{trial} := \|\boldsymbol{\xi}_{n+1}^{trial}\| - \sqrt{\frac{2}{3}}K(\alpha_n)$$

IF $f_{n+1}^{trial} \leq 0$ THEN:

Set $(\bullet)_{n+1} = (\bullet)_{n+1}^{trial}$

SALIR

ENDIF.

3) DETERMINACIÓN: n_{n+1} , $\Delta\gamma$:

Vector normal a la superficie de fluencia

$$\mathbf{n}_{n+1}^{trial} := \frac{\boldsymbol{\xi}_{n+1}^{trial}}{\|\boldsymbol{\xi}_{n+1}^{trial}\|}$$

Deformación plástica equivalente

$$\alpha_{n+1} := \alpha_n + \sqrt{\frac{2}{3}}\Delta\gamma$$

4) ACTUALIZACIÓN DE LAS VARIABLES:

Tensión de retorno

$$\beta_{n+1} = \beta_n + \sqrt{\frac{2}{3}}[H(\alpha_{n+1}) - H(\alpha_n)]\mathbf{n}_{n+1}$$

Deformación plástica

$$\mathbf{e}_{n+1}^p = \mathbf{e}_n^p + \Delta\gamma\mathbf{n}_{n+1}$$

Tensor de tensiones

$$\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = k \text{tr}[\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}]\mathbf{1} + \mathbf{s}_{n+1}^{trial} - 2\mu\Delta\gamma\mathbf{n}_{n+1}$$

5) CÁLCULO DEL TENSOR CONSTITUTIVO CONSISTENTE:

$$\mathbf{C}^{ep} = k \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2\mu\zeta_{n+1} \left[\mathbf{I} - \frac{1}{3}\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \right] - 2\mu\tilde{\zeta}_{n+1}\mathbf{n}_{n+1} \otimes \mathbf{n}_{n+1}$$

$$\zeta_{n+1} := 1 - \frac{2\mu\Delta\gamma}{\|\boldsymbol{\xi}_{n+1}^{trial}\|}$$

$$\tilde{\zeta}_{n+1} := \frac{1}{1 + \frac{|H' + K'|_{n+1}}{\mu}} - (1 - \zeta_{n+1})$$

(Simo & Hughes, 1998) (pag 124).

Bibliografía

- Ainsworth, M. & Oden, J. T. (1997). A posteriori error estimation in finite element analysis. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 65, 23–50.
- Anthoine, A. (1995). Derivation of the in-plane characteristics of masonry through homogenization theory. *Int. J. Solids Structures*, 32(2), 137–163.
- Anthoine, A. & Pegon, P. (1996). *Numerical Analysis and Modelling of Composite Materials*, chapter Numerical analysis and modelling of the damage and softening of brick masonry, (pp. 152–184). Blackie academic and professional.
- Aravas, N., Cheng, C., & Castañeda, P. P. (1995). Steady-state creep of fiber-reinforced composites: Constitutive equations and computational issues. *Solids Structures*, 32(15), 2219–2244.
- Balaguru, P. & Shah, S. (1995). *Fiber Reinforced Cement Composites*. McGraw-Hill.
- Banthia, N., Moncef, A., Chokri, K., & j. Sheng (1995). Uniaxial tensile response of microfibre reinforced cement composites. *Materials and Structures*, 28, 507–517.
- Barragy, E. & Carey, G. F. (1988). A parallel element-by-element solution scheme. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 26, 2367–2382.
- Bathe, K. J. (1982). *Finite Element Procedures in Engineering Analysis*. Prentice-Hall.
- Bendsøe, M. P. & Kikuchi, N. (1988). Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method. *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, 71, 197–224.
- Bensoussan, A., Lions, J., & Papanicolaou, G. (1978). *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*. North-Holland, Amsterdam.

- Betten, J. (1981). Creep theory of anisotropic solid. *J. Rheol.*, 25, 556–581.
- Betten, J. (1988). Application of tensor functions to the formulation of yield criteria for anisotropic materials. *International Journal of Plasticity*, 4, 29–46.
- Borrell, C. M. (1996). *Structural analysis of historical constructions*. CIMNE, Barcelona.
- Budiansky, B. (1965). On the elastic moduli of heterogeneous materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 13, 223–227.
- Car, E. (2000). *Modelo Constitutivo Continuo para el Estudio del Comportamiento Mecánico de los Materiales Compuestos*. PhD thesis, Universidad Politécnica de Cataluña.
- Car, E., Zalamea, F., Oller, S., Canet, J. M., & Oñate, E. (1999). Simulación numérica de materiales compuestos reforzados con fibras. In *IV Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería*.
- Christensen, R. M. (1979). *Mechanics of composites materials*. New York: Wiley.
- Cole, J. D. & Kevorkian (1980). *Perturbation Methods in Applied Mathematics*. New York: Springer.
- Crisfield, M. (1991). *Non-linear finite element analysis of solids and structures*. John Wiley & Sons Ltd.
- Dennis, J. E. & More, J. J. (1977). Quasi-newton methods, motivation and theory. *SIAM Review*.
- Devries, F., Dumontet, H., Duvaut, G., & Lene, F. (1989). Homogenization and damage for composite structures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 27, 285–298.
- Drucker, D. C. (1959). *Nonhomogeneity in Elasticity and Plasticity*, chapter On minimum weight design and strength of nonhomogeneous plastic bodies. Ed. Olszak: Pergamon Press.
- Dumontet, H. (1986). *Local Effects in the Analysis of Structures*, chapter Boundary layers stresses in elastic composites. Elsevier: Amsterdam.
- Duvaut, G. (1976). Analyse fonctionnelle et mécanique des milieux continus. In W. Koiter (Ed.), *Th. Appl. Mech.* (pp. 119–132). Nord Holland.

- Duvaut, G. & Lions, J. L. (1972). *Les Inéquations en Mécanique et en Physique*. Paris: Dunod.
- Dvorak, G. J. (1991). *Metal Matrix composites: Mechanics and Properties*, chapter Plasticity theories for fibrous composite materials. Academic Press.
- Dvorak, G. J. (1992). Transformation field analysis of inelastic composite materials. *Proc. R. Soc. Lond.*, (pp. 311–327).
- Dvorak, G. J., Bahei-El-Din, Y. A., & Wafa, A. M. (1994). Implementation of the transformation field analysis for inelastic composite materials. *Computational Mechanics*, 14, 201–228.
- Eshelby, J. D. (1958). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proc. R. Soc. London*, 241, 376–396.
- Fish, J. & Belsky, V. (1995a). Multi-grid method for periodic heterogeneous media, par 1: Convergence studies for one-dimensional case. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 126, 1–16.
- Fish, J. & Belsky, V. (1995b). Multi-grid method for periodic heterogeneous media, par 2: Multiscale modeling and quality control in multidimensional case. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 126, 17–38.
- Fish, J. & Markolefas, S. (1993). Adaptive s-method for linear elastostatics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 104, 363–396.
- Fish, J., Markolefas, S., Guttal, R., & Nayak, P. (1994a). On adaptive multilevel superposition of finite element meshes for linear elastostatics. *Applied Numerical Mathematics*, 14, 135–164.
- Fish, J., Nayak, P., & Holmes, M. H. (1994b). Microscale reduction error indicators and estimators for a periodic heterogeneous medium. *Computation Mechanics*, 14, 323–338.
- Fish, J. & Shek, K. (1999). Finite deformation for composite structures: Computational models and adaptive strategies. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 172, 145–174.
- Fish, J., Shek, K., Pandheeradi, M., & Shephard, M. (1997). Computational plasticity for composite structures based on mathematical homogenization: Theory and practice. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 148, 53–73.

- Fish, J. & Wagiman, A. (1993). Multiscale finite element method for a locally nonperiodic heterogeneous medium. *Computational Mechanics*, 12, 164–180.
- Funahashi, K. I. (1989). On the approximate realization of continuous mappings by neural networks. *Neural Networks*, 2, 183–192.
- Geist, A., Beguelin, A., Dongarra, J., Jiang, W., Manchek, R., & Sunderam, V. (1994). *Paralle Virtual Machine - A Users' Guide and Tutorial for Networked Parallel Computing*. Massachusetts Institute Technology.
- Ghosh, S., Lee, K., & Moorthy, S. (1995). Multiple scale analysis of heterogeneous elastic structures using homogenization theory and Voronoi cell finite element method. *Solids Structures*, 32(1), 27–62.
- Ghosh, S., Lee, K., & Moorthy, S. (1996). Two scale analysis of heterogeneous elastic-plastic materials with asymptotic homogenization and Voronoi cell finite element model. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 132, 63–116.
- Ghosh, S. & Mukhopadhyays, S.Ñ. (1991). A two-dimensional automatic mesh generator for finite element analysis of randomly dispersed composites. *Computers Struct.*, 41, 245–256.
- Ghosh, S. & Mukhopadhyays, S.Ñ. (1993). A materials based finite element analysis of heterogeneous media involving dirichlet tessellations. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, 104, 211–247.
- Glowinski, R., Kusnetsov, Y. A., Meurant, G., Périaux, J., & Widlund, O. (1991). *Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*. SIAM.
- Green, A. & P., N. (1965). A dynamical theory of interacting continua. *Int. J. Engrg. Sci.*, 3, 231.
- Griffith, A. A. (1920). The phenomena of rupture and flow in solid. In *Philosophical Transactions Royal Society of London* (pp. 163–198).
- Guedes, J. M. & Kikuchi, N. (1990). Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element method. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 83, 143–198.
- Hashin, Z. (1962). The elastic moduli of heterogeneous materials. *J. Appl. Mech.*, 29, 143–150.

- Hashin, Z. (1970). *Mechanics of composite materials*, chapter Theory of composite materials. Pergamon: Oxford.
- Hashin, Z. (1983). Analysis of composite materials: a survey. *J. Appl. Mech.*, 50, 481-505.
- Hecht-Nielsen, R. (1990). *Neurocomputing*. Addison Wesley.
- Hill, R. (1948). A theory of the yielding and plastic flow of anisotropic metals. *Proc. Roy. Soc. London*, 193, 281-297.
- Hill, R. (1963). Elastic properties of reinforced solid: Some theoretical principles. *J. Mech. Phys. Solids*, 11, 357-372.
- Hill, R. (1965). A self-consistent mechanics of composite materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 13, 213-222.
- Hill, R. (1967). The essential structure of constitutive laws for metal composites and polycrystals. *J. Mech. Phys. Solid*, 15, 79-95.
- Hitchon, J. W. & Phillips, D. C. (1979). The dependence of the strength of carbon fibers on length. *Fibre Sci. Technol.*, 12, 217-233.
- Hornik, K., Stichcombe, M., & White, H. (1989). Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks*, 2, 359-366.
- Houget, V., Ambroise, J., & Pera, J. (1995). Propriétés mécaniques de composites ciment-fibres organiques. *Materials and Structures*, 28, 220-229.
- Hughes, T. (1987). *The Finite Element Method*. Prentice-Hall.
- Hull, D. (1987). *Materiales Compuestos*. España: Editorial Reverté.
- Jansson, S. (1992). Homogenized nonlinear constitutive properties and local stress concentrations for composites with periodic internal structure. *Int. J. Solids Structures*, 29(17), 2181-2200.
- Jun, Z. & Stang, H. (1998). Fatigue performance in flexure of fiber reinforced concrete. *ACI Materials Journal*, 95(1), 58-67.
- King, R. B. & Somnad, V. (1987). Implementation of an elemental-by-elemental solution algorithm for the finite element method on a coarsely-grained parallel computer. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 65, 47-59.

- Lee, K., Moorthy, S., & Ghosh (1999). Multiple scale computational model for damage in composite materials. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 172, 175-201.
- Lene, F. (1986). Damage constitutive relations for composite materials. *Engng. Fract. Mech.*, 25, 713-728.
- Lene, F. & Duvaut, G. (1981). Résultats d'isotropie pour des milieux homogénéisés. In *Comptes Rendus*, volume 293 of II (pp. 477-480). Acad. Sci. Paris.
- Lene, F. & Leguillon, D. (1982). Homogenized constitutive law for a partially cohesive composite. *Int. J. Solids Structures*, 18, 443-458.
- Levi, T. (1987). *Homogenization Techniques for Composite Media*, chapter Fluids in Porous Media and Suspensions. Springer-Verlag.
- Li, V. C., Mishra, D. K., & Wu, H. (1995). Matrix design for pseudo-strain-hardening fibre reinforced cementitious composites. *Materials and Structures*, 28, 586-595.
- Li, V. C. & Wu, H. C. (1992). Conditions for pseudo strain-hardening in fiber reinforced brittle matrix composite. *J. Applied Mechanics Review*, 45(8), 390-398.
- Li, Z., Li, F., Chang, T. P., & Mai, Y. (1998). Uniaxial tensile behavior of concrete reinforced with randomly distributed short fibers. *ACI Materials Journal*, 95(5), 564-574.
- Lourenço, P. (1996). *Computational Strategies for Masonry Structures*. Delft University Press.
- Lubliner, J. (1972). On the thermodynamic foundations of non-linear solid mechanics. *Int. J. Non-Linear Mechanics*, 7, 237-254.
- Lubliner, J. (1985). *Thermomechanics of deformable bodies*. Technical report, Department of Civil Engineering University of California, Berkeley USA.
- Lubliner, J. (1990). *Plasticity Theory*. U.S.A: Macmillan Publishing.
- Luciano, R. & Barbero, E. J. (1994). Formulas for the stiffness of composites with periodic microstructure. *Int. J. Solids Structures*, 31(21), 2933-2944.

- Maier, G., Nappi, A., & Papa, E. (1991). *Constitutive Laws for Engineering Materials*, chapter Damage models for masonry as a composite material: a numerical and experimental analysis, (pp. 427–432). ASME: New York.
- Malvern, L. E. (1969). *Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium*. Prentice-Hall.
- Mandel, J. (1972). *Plasticité classique et viscoplasticité*. Number 97 in CISM Lecture Notes. Springer-Verlag.
- Manzoli, O., Oliver, X., & Cervera, M. (1998). *Localización de Deformaciones: Análisis y Simulación Numérica de Discontinuidades en Mecánica de Sólidos*. Number 44 in Monografía CIMNE. Barcelona-España: CIMNE.
- Marini, D. J. & Quarteroni, A. (1989). A relaxation procedure for domain decomposition methods using finite element. *Num. Math.*, 55, 575–598.
- Martín del Brío, B. (1997). *Redes Neuronales y Sistemas Borrosos*. Madrid: Ra-Ma Editorial.
- Mc Laughtlin, P. V. (1970). Limit behavior of fibrous materials. *Int. J. Solids Structures*, 6, 1357–1376.
- Meguid, S. A. & Kalamkarov, A. L. (1994). Asymptotic homogenization of elastic composite material with a regular structure. *Int. J. Solids Structures*, 31(3), 303–316.
- Michel, J. C. (1984). *Homogénéisation de matériaux élastoplastiques avec cavités*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6.
- Michel, J. C., Moulinec, H., & Suquet, P. (1999). Effective properties of composite materials with periodic microstructure: a computational approach. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 172, 109–143.
- Mieche, C., Schröder, J., & Schotte, J. (1999). Computational homogenization analysis in finite plasticity simulation of texture development in polycrystalline materials. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 171, 387–418.
- Mitchell, D., Abrishami, H. H., & Mindess, S. (1996). The effect of steel fibers and epoxy-coated reinforcement on tension stiffening and cracking of reinforced concrete. *ACI Materials Journal*, 93(1), 61–68.

- Moes, N., Oden, J. T., & Zohdi, T. I. (1998). Investigation of the interaction between the numerical and the modeling errors in the homogenized Dirichlet projection method. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 159, 79-101.
- Mori, T. & Tanaka, K. (1973). Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metall*, 21, 571-574.
- Naaman, A. & Reinhardt, H., Eds. (1996). *High Performance Fiber Reinforced Cement Composites 2*. Proceedings of the Second International RILEM Workshop.
- Naaman, A. E. (1987). High performance fiber reinforced cement composites. In *Proceedings of the IABSE Symposium on Concrete Structures for the Future* (pp. 371-376). Paris-France.
- Obraztsov, I. F. & Vasilev, V. V. (1982). *Mechanics of Composites*. Moscow: MIR Publishers.
- Oden, J. T., Vemaganti, K., & Moes, N. (1999). Hierarchical modeling of heterogeneous solids. *Comput Methods Appl. Mech. Engrg.*, 172, 3-25.
- Oleinik, O. A., Shamaev, A. S., & Yosifian, G. A. (1992). *Mathematical Problems in Elasticity and Homogenization*, volume 26 of *Studies in mathematics and its applications*. North-Holland: Elsevier Science Publishers B. V.
- Oliver, J., Cervera, M., Oller, S., & Lubliner, J. (1990). Isotropic damage models and smeared crack analysis of concrete. In *Second International Conference on Analysis and Design of Concrete Structures*, volume 2 (pp. 945-958).
- Oliver, J. & Simo, J. (1994). Modelling strong discontinuities by means of strain softening constitutive equation. In *Proc. EURO-C 1994 Computer Modeling of concrete structures* (pp. 363-372). Swansea: Pineridge Press.
- Oller, S. (1988). *Un Modelo de Daño Continuo para Materiales Friccionales*. PhD thesis, Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona - España.
- Oller, S. (1989). *Nuevos Materiales Estructurales, Cerámicos en Ingeniería*. Technical report, Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería, Barcelona.

- Oller, S., Botello, S., Canet, J. M., & Oñate, E. (1995a). An anisotropic elastoplastic model based on an isotropic formulation. *Engineering Computations*, 3, 245–262.
- Oller, S., Neamtu, L., & Oñate, E. (1995b). Una generalización de la teoría de mezclas clásica para el tratamiento de compuestos en serie/paralelo. In *Congreso Nacional de Materiales Compuestos* (pp. 433–438).
- Oñate, E. (1992). *Cálculo de Estructuras por el Método de Elementos Finitos*. CIMNE.
- Oñate, E., Oller, S., Botello, S., & Canet, J. M. (1991). *Métodos Avanzados de Cálculo de Estructuras de Materiales Compuestos*. Technical Report 3, CIMNE, Barcelona.
- Ortega, J. M. (1989). *Introduction to Parallel and Vector Solution of Linear Systems*. Plenum.
- Ortiz, M. & Popov, E. P. (1982a). *Mechanics of Materials*, chapter Plain Concret as a Composite Material. North Holland Publishing Company.
- Ortiz, M. & Popov, E. P. (1982b). A physical model for the inelasticity of concrete. *Proc. Roy. Soc. Lond.*, A 383, 101–125.
- Pande, G.N., Liang, J. X., & Middleton, J. (1989). Equivalent elastic moduli for brick masonry. *Computers Geotech*, 8(5), 243–265.
- Pávlov, P. V. & Jojlov, A. F. (1987). *Física del estado sólido*. Editorial Mir Moscú.
- Peraire, J. & Patera, A. T. (1997). Bounds for linear-functional outputs of coercive partial differential equations: Local indicators and adaptive refinement. In *Proceedings of the Workshop On New Advances in Adaptive Computational Methods in Mechanics*: Elsevier.
- Pian, T. (1964). Derivation of element stiffness matrices by assumed stress distribution. *AIAA J.*, 2, 1333–1336.
- Pietruszczak, S. & Niu, X. (1992). A mathematical description of macroscopic behaviour of brick masonry. *Int. J. Solids Estructures*, 29(5), 531–546.
- Rice, J. R. (1970). On the structure of stress-strain relations for time dependent plastic deformations in metals. *J. Appl. Mech.*, 37, 728–737.

- Rumelhart, D. E. & McClelland, J. L., Eds. (1986). *Parallel Distributed Processing*. MIT Press.
- Sanchez-Hubert, J. & Sanchez-Palencia, E. (1992). *Introduction aux méthodes asymptotiques et à l'homogénéisation*. Masson.
- Sanchez-Palencia (1987). *Homogenization Techniques for Composite Media*, chapter Boundary Layers and Edge Effects in Composites, (pp. 121–192). Springer-Verlag, Berlin.
- Sanchez-Palencia, E. (1974). Comportement local et macroscopique d'un type de milieux physiques hétérogènes. *Int. J. Eng. Sc.*, 12, 331–351.
- Sanchez-Palencia, E. (1980). *Lecture Notes in Physics*, volume 127, chapter Non-homogeneous media and vibration theory. Springer-Verlag, Berlin.
- Sarrate, J., Peraire, J., & Patera, A. (1999). A posteriori finite element error bounds for nonlinear outputs of the helmholtz equation. *Int. J. Numer. Meth. in Fluids*.
- Shu, L. S. & Rosen, B. W. (1967). Strength of fiber reinforced composites by limit analysis method. *J. Composite Mat.*, 1, 366–381.
- Silva, E., Nishiwaki, S., Fonseca, J., & Kikuchi, N. (1999). Optimization methods applied to material and flexensional actuator design using the homogenization method. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 172, 241–271.
- Simo, J. C. & Hughes, T. J. R. (1998). *Computational Inelasticity*. New York: Springer-Verlag.
- Simo, J. C. & Ju, J. W. (1987). Strain-and-stress based continuum damage models - ii. computational aspects. *International Journal Solids Structures*, 23, 821–840.
- Simo, J. C., Taylor, R. L., & Pister, K. S. (1985). Variational and projection methods for the volume constraint in finite deformation elasto-plasticity. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 51, 177–208.
- Steinmann, P., Kuhl, E., & Stein, E. (1998). Aspects of non-associated single crystal plasticity: influence of non-schmid effects and localization analysis. *Int. J. Solids Structures*, 35, 4437–4456.
- Suquet, P. (1982). *Plasticité et Homogénéisation*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6.

- Suquet, P. (1987). *Homogenization Techniques for Composite Media*, chapter Elements of homogenization for inelastic solid mechanics, (pp. 193-279). Springer-Verlag, Berlin.
- Swan, C. C. (1994). Techniques for stress- and strain-controlled homogenization of inelastic periodic composites. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 117, 249-267.
- Taerwe, L. & Gysel, A. V. (1996). Influence of steel fiber on design stress-strain curve for high-strength concrete. *Journal of Engineering Mechanics*, 122(8), 695-704.
- Theocaris, P. & Stavroulakis, G. (1999). Optimal material design in composites: An iterative approach based on homogenized cells. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 169, 31-42.
- Tjiptoroto, P. & Hansen, W. (1993). Tensile strain hardening and multiple cracking in high-performance cement based composites. *ACI Materials Journal*, 90(1).
- Trudell, C. & Toupin, R. (1960). *The Classical Field Theories*. Handbuch der Physik III/I. Berlin: Springer Verlag.
- Tsai, S. W. (1974). *Structural behaviour of composite materials*. Technical Report Contract Report CR-71, NASA.
- Tsai, S. W. & Wu, E. M. (1971). A general theory of strength for anisotropic materials. *J. Comp. Mat.*, 5, 58.
- Valverde, Q. (1995). Desarrollo del elemento B-bar cuadrilátero bilineal de deformación plana en el marco de una formulación variacional mixta. Master's thesis, Universidad Politécnica de Cataluña.
- van Zijl, G., Lourenço, P., & Rots, J. (1997). Non-associated plasticity formulation for masonry interface behaviour. *Computational Plasticity*, (pp. 1586-1593).
- Zalamea, F., Canet, J. M., & Oller, S. (1998). Treatment of composite materials based on the homogenization method. In CIMNE (Ed.), *Proceedings of the Fourth World Congress on Computational Mechanics*.
- Zalamea, F., Canet, J. M., & Oller, S. (1999a). Teoría de homogeneización para el análisis de materiales compuestos con estructura interna periódica. In SEMNI (Ed.), *Proceedings del IV Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería*.

- Zalamea, F., Canet, J. M., & Oller, S. (1999b). Un método en doble escala para la simulación de materiales compuestos. In *Proceedings del III Congreso Nacional de Materiales Compuestos MATCOMP 99*.
- Zalamea, F., Canet, J. M., & Oller, S. (2000). A double scale method for simulating of periodic composite materials. In SEMNI (Ed.), *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*.
- Zienkiewicz, O. C. & Taylor, R. L. (1994a). *El método de los Elementos Finitos: formulación básica y problemas lineales*, volume 1. Barcelona: CIMNE, McGraw-Hill, cuarta edition.
- Zienkiewicz, O. C. & Taylor, R. L. (1994b). *El método de los Elementos Finitos: mecánica de sólidos y fluidos, dinámica y no linealidad*, volume 2. Barcelona: CIMNE, McGraw-Hill, cuarta edition.
- Zohdi, T. I., Oden, J. T., & Rodin, G. J. (1996). Hierarchical modeling of heterogeneous bodies. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 138, 273-298.