

COMPORTAMIENTO DEL MODELO DE FISURA COHESIVA EN PROCESOS DE CARGA-DESCARGA

J. Zahr Viñuela y J. L. Pérez Castellanos

Departamento de Mecánica de Medios Continuos y Teoría de Estructuras.
Universidad Carlos III de Madrid. Escuela Politécnica Superior.
Avda. de la Universidad 30, 28911 Leganés (MADRID). E-mail: percaste@ing.uc3m.es

ABSTRACT

To estimate the component of work dissipated in damage, the evolution of Young's module with the strain must be known. By unloading-loading process in a tension test, a relation between Young model and strain can be obtained. A multiparticle model which incorporates the capacity to reflect the damage by decohesion between particle and matrix, is used to simulate tensile loading-unloading processes of particulate metal matrix composite. The macroscopic stress-strain curves under load for the composite under study, as well as those corresponding to the simulated unloads-loads processes are presented. These curves show a damage increase at the beginning of unload process. An explanation for the observed phenomena is suggested, including its possible connection with the *control method* of the simulation and a possible *lack of uniqueness* in the equilibrium solution of Damage Mechanics Models when used in unloading situations.

KEYWORDS: Damage, cohesive-crack model, loading-unloading process, particulate reinforced composites.

1 INTRODUCCIÓN.

Un método de análisis que puede ser utilizado para analizar el comportamiento mecánico de los materiales compuestos de matriz metálica y refuerzo cerámico (en lo que sigue, PMMC's) es el Análisis de Celdas [1,3] en el que una celda que contiene un cierto número de partículas es discretizada y analizada frente a distintos tipos de sollicitación mecánica mediante el M.E.F. Las celdas utilizadas en este tipo de análisis suelen ser geométricamente periódicas en la configuración *original*, a la vez que el uso de condiciones de contorno periódicas en las simulaciones garantiza la periodicidad geométrica y tenso-deformacional de la celda en la configuración *deformada*.

El daño por decohesión de las partículas respecto a la matriz circundante, puede ser analizado mediante técnicas basadas en el modelo de fisura cohesiva [2, 3], introduciendo elementos cohesivos en las interfaces matriz-partícula. El modelo de fisura cohesiva constituye una técnica eficiente que ha sido ampliamente utilizada para modelizar, entre otros procesos, el crecimiento progresivo de fisuras y la decohesión o delaminación en materiales compuestos.

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

El punto de iniciación del proceso de daño de la interfaz se define mediante un *criterio de iniciación de daño* que puede basarse en valores cuadráticos equivalentes de tensiones o de desplazamientos. El proceso de daño o ablandamiento está controlado por un parámetro escalar de daño, cuyo crecimiento desde 0 hasta 1 durante el ablandamiento degrada simultáneamente tanto la rigidez cohesiva como la tensión máxima que la interfaz es capaz de transmitir.

Dado que la ocurrencia de fenómenos de daño resulta en una disminución del módulo de Elasticidad del material, y que el daño aumenta progresivamente al aumentar la deformación macroscópica del compuesto, se planteó obtener la evolución (degradación) del Módulo de Elasticidad del compuesto con la deformación utilizando el método de celdas en conjunto con el modelo de fisura cohesiva, a través del método clásico de las descargas elásticas intermedias.

En este trabajo, se presenta simulaciones de los procesos de carga-descarga así como observaciones sobre aspectos insesgados del comportamiento del Modelo de Daño utilizado durante la descarga.

2 SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL PROCESO CARGA-DESCARGA

Para generar modelos numéricos multipartícula, se ha utilizado un algoritmo desarrollado por los autores [3] que produce distribuciones espaciales de partículas dentro de una celda de periodicidad geométrica. La celda contiene 40 partículas cúbicas (esbeltez constante $r = 1$) de igual tamaño y aleatoriamente orientadas (ver

fig. 3). La fracción volumétrica de partículas es del 12%.

Esta celda fue discretizada, dando origen a la correspondiente malla de elementos finitos. Para las fases sólidas (matriz y partículas) se utilizaron tetraedros cuadráticos modificados de la librería de elementos del código ABAQUS Standard [4]. Las interfaces matriz-partícula se han representado mediante los elementos cohesivos de la librería de ABAQUS, permitiendo así la modelación del daño por decohesión entre las fases sólidas, como se describió en [7].

Para la matriz se ha considerado un comportamiento elasto-plástico con endurecimiento isotrópico de tipo J_2 en una formulación incremental e independiente de la velocidad de deformación. Las constantes elásticas de la matriz fueron las siguientes: módulo de Young $E = 210$ GPa y coeficiente de Poisson $\nu = 0,3$; como ley de endurecimiento se consideró la ley Ramberg Osgood definida por una límite elástico al 0,2% de $\sigma_{0,2} = 400$ MPa y un exponente de endurecimiento $n = 10$.

Para las partículas del refuerzo se consideró un comportamiento lineal elástico de acuerdo con la ley Hooke siendo $E_p = 410$ GPa y $\nu_p = 0,16$, valores obtenidos de la literatura.

En el caso de las interfaces cohesivas, la matriz de rigidez cohesiva utilizada es de tipo desacoplado (y por lo tanto, diagonal). La rigidez cohesiva inicial es de $K_0 = 1,2 \cdot 10^9$ MPa/mm con independencia del modo de carga; con este valor la presencia de elementos cohesivos de interfaz no modifica la rigidez del compuesto [3] antes del inicio del daño. Se utilizó un criterio de iniciación de daño cuadrático en tensiones, con una resistencia cohesiva de $t^R = 600$ MPa (1,5 veces el límite elástico de la matriz) tanto para el modo de tracción pura como para los modos de cortadura. La curva de ablandamiento es de tipo lineal, con un valor de energía de fractura de $G^C = 50$ J/m².

Todas las simulaciones se realizaron utilizando condiciones de contorno periódicas a través de

$$\vec{U}_{Q_i} - \vec{U}_{P_i} = \vec{C}_i \quad (1)$$

donde P_i y Q_i son una pareja arbitraria de nodos situados en posiciones equivalentes en las dos caras opuestas de la celda que son perpendiculares al eje X ($i=1$), al Y ($i=2$) o al Z ($i=3$). La periodicidad queda impuesta cuando \vec{C}_i es un vector *constante* que relaciona los desplazamientos relativos para *todos* los pares de nodos en aquellas caras.

Los tres vectores constantes \vec{C}_i de las ecuaciones (1) se representan en la malla FEM mediante los vectores desplazamiento de 3 nodos de control, dando origen a un total de 9 componentes, algunas de las cuales son *datos de entrada* y otras son parte de la *solución* buscada, dependiendo del estado tensional en estudio.

Una simulación en *control de posición* implica prescribir un valor no nulo sobre la componente adecuada de desplazamiento, obteniendo como *resultante* del análisis el valor de su fuerza de reacción asociada. De manera análoga, una simulación en *control de fuerza* consiste en prescribir un valor no nulo para la componente adecuada, obteniendo como *resultante* el valor de la componente de desplazamiento.

Con el modelo de celda multipartícula descrito se simuló una sollicitación macroscópica de tracción uniaxial a lo largo del eje X . Para evitar dificultades de inestabilidad en el equilibrio macroscópico de fuerzas asociadas a la modelización del daño por decohesión, todas las simulaciones en *carga* se realizaron en control de posición. La deformación macroscópica total fue del 5%, obteniéndose como *resultante* el valor de la reacción. La tensión macroscópica se calcula como la fuerza de reacción dividida por el área transversal *actual*.

La presencia de fenómenos de daño degrada progresivamente la rigidez del material, de modo que justo antes de iniciar una descarga no se conoce exactamente la cuantía del retroceso elástico de la deformación macroscópica. Una prescripción excesiva para el retroceso elástico en una descarga en control de posición podría dar lugar a la entrada de la celda en compresión macroscópica.

Debido a esto, el método de control *natural* para una simulación del proceso de *descarga* es el control de fuerza. La metodología es la siguiente: se realiza una simulación previa del proceso de *carga* (en control de posición) hasta cierto valor de interés de la deformación macroscópica. Para llevar a cabo una descarga en control de fuerza se substituye en el nodo de control la fuerza de reacción (obtenida al final de la simulación en *carga*) por una fuerza puntual, de igual cuantía (para mantener el equilibrio al inicio de la descarga), fuerza que se hace disminuir progresivamente hasta cero.

Como método alternativo, para llevar a cabo una *descarga* en *control de posición* se prescribe, sobre la misma componente de desplazamiento del nodo de control que controlaba el previo proceso de carga, un valor de desplazamiento ligeramente inferior al que ese nodo tenía al iniciar la descarga; para asegurar que la descarga elástica no implica una entrada en compresión, como estimación del retroceso elástico puede usarse $\Delta c = -\rho (\sigma/E) L_0$ con ρ pequeño y, en todo caso, $0 < \rho < 1$ y donde σ es la tensión macroscópica al inicio de la descarga, E el módulo elástico macroscópico inicial y L_0 la longitud inicial de arista de la celda.

3 RESULTADOS

Se han considerado dos situaciones diferenciadas: para su uso como referencia, se consideró tanto un material indañable (con nodos compartidos en las interfaces) como un material con interfaces dañables de acuerdo a los parámetros cohesivos descritos en el apartado anterior.

Utilizando este modelo se han realizado simulaciones de un ensayo de tracción obteniéndose las gráficas σ - ϵ que se muestran en la figura 1; como se esperaba, la simulación que incorpora el efecto del daño produce una curva de endurecimiento progresivamente más baja que la curva del material indañable. Para el material dañable, se han realizado también simulaciones de ensayos de tracción con descargas (figura 1).

En primer lugar se simuló una descarga total, en control de fuerza, desde una deformación 0.213%; en la descarga se alcanzó una deformación de 0.05% verificándose elasticidad lineal durante todo el proceso. Seguidamente se simuló una descarga total, también en control de fuerza, desde una deformación 0.300%; en la descarga la deformación se redujo hasta un valor de 0.123%. A diferencia de la primera descarga, a su inicio se observó (figura 1 b) un ligero aumento de la macro deformación seguido de una pequeña incurvación, verificándose elasticidad lineal durante el resto del proceso de descarga. Finalmente se simuló una descarga total, en control de fuerza, para una deformación 0.399%; en la simulación se presentaron grandes dificultades de convergencia (llegándose a interrumpir la simulación) y aumentando la deformación con disminución de la carga.

La figura 1a muestra también valores para las pendientes de los caminos de descarga, obtenidos de rectas de regresión correspondientes a la zona elástica inicial (E_0) y a los tramos lineales de las dos descargas que sí pudieron completarse (E_1 y E_2). Como se esperaba, la pendiente de las líneas decrece cuando crece la deformación reflejando el aumento de daño macroscópicamente observable en el material compuesto.

El análisis de los resultados de las simulaciones realizadas conduce a las conclusiones iniciales siguientes. Cuando la descarga se inicia desde un relativamente bajo nivel de macro deformación, el camino de descarga es perfectamente lineal. Sin embargo, cuando la descarga se inicia desde valores más altos de la deformación, se observa una no linealidad muy marcada al comienzo del camino de descarga acompañada de aumentos locales de la variable de daño.

Como ejemplo, la figura 2 muestra el modelo multipartícula justo al inicio del proceso de descarga en control de fuerza desde la deformación de 0.3%, identificándose una partícula que había comenzado ya a decohesionar durante la etapa previa de carga. La figura 4, por su parte, muestra imágenes de la citada

partícula en tres instantes de la simulación de esta descarga.

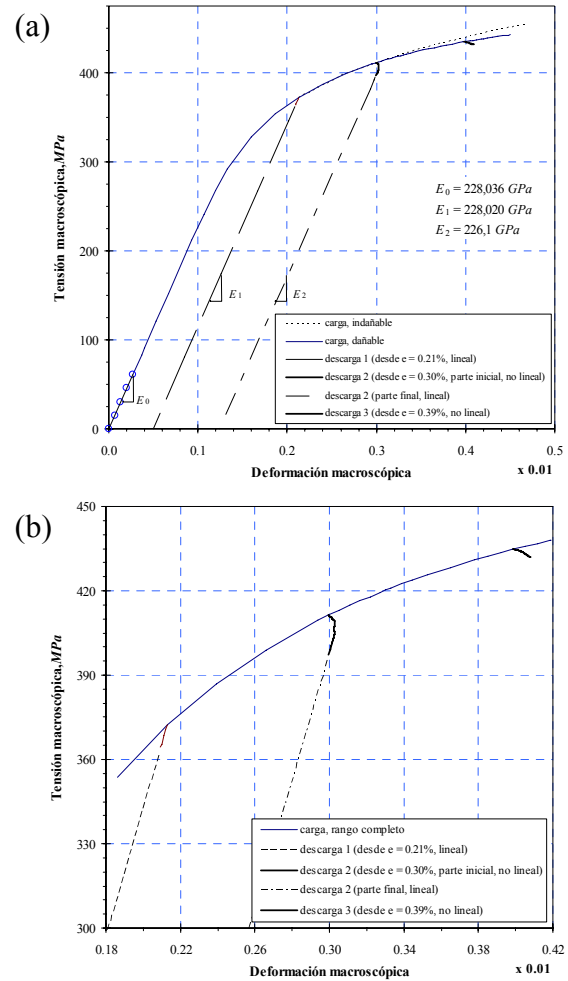


Figura 1. Curvas σ - ϵ incluyendo descargas. a) escala completa. b) zoom en la zona de inicio de las descargas.

Una inspección de los mapas de la distribución espacial del parámetro escalar de daño en esta figura reveló que incrementos locales de área dañada (interfaz decohesionada) tuvieron lugar durante la parte inicial no lineal de la descarga (desde $t = 0$ hasta $t = 0,03$); la decohesión no progresa durante el tramo final (desde $t = 0,03$ hasta $t = 1,0$). Las zonas oscuras denotan áreas totalmente decohesionadas, incapaces por tanto de transmitir tensión entre matriz y partícula.

Una vez finalizada esta no linealidad, caracterizada numéricamente por grandes dificultades de convergencia y por la necesidad de numerosas iteraciones de equilibrio, parece producirse un cierto “ordenamiento” en el campo tenso-deformacional interior del material, de tal modo que la línea de descarga pasa a ser recta hasta el final de la descarga, mejorando a la vez la convergencia de la simulación. Con el objeto de analizar las causas de la fuerte no linealidad detectada en el caso de la descarga que inicia en 0.399%, se llevaron a cabo, como **experimentos**

numéricos, otras dos simulaciones de esta descarga cuyas condiciones se describen a continuación (la figura 5 muestra un detalle de sus resultados).

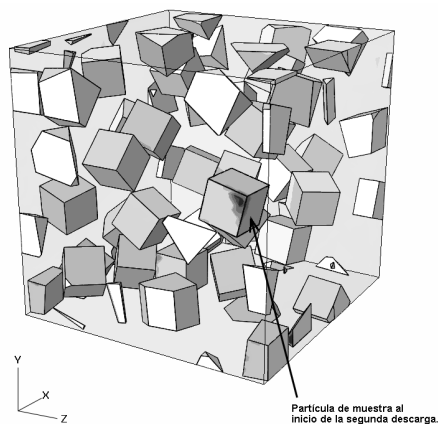


Figura 2. Celda multipartícula, al inicio de la simulación de la segunda descarga. Se representa el mapa del parámetro escalar de daño

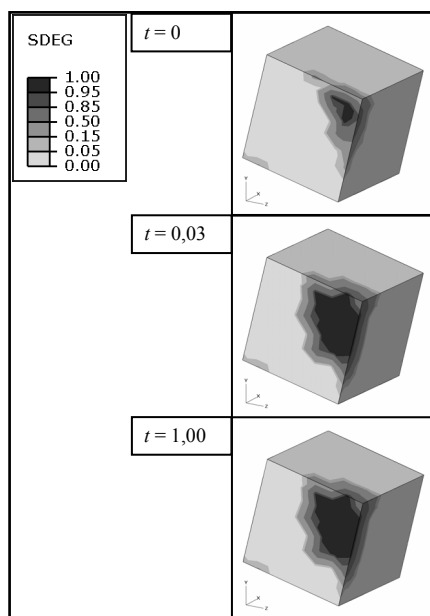


Figura 3. Evolución del parámetro de daño D , durante la segunda descarga. Las zonas más oscuras denotan interfaces totalmente dañadas.

En un **primer experimento** se analizó la posible influencia de la tolerancia utilizada en el proceso numérico de solución de las ecuaciones de equilibrio. Para ello, en la simulación se dividió el proceso de descarga en dos etapas. En la **primera etapa** se planteó un proceso de *estabilización* consistente en mantener fija la deformación macroscópica de la celda (inmovilizando el nodo de control en el valor de desplazamiento que éste tenía al final del proceso previo de *carga*), pero obligando al código de cálculo a realizar nuevas iteraciones de equilibrio, por la vía de restringir las tolerancias utilizadas por el código de cálculo en la solución del problema no lineal de

equilibrio (que el código ejecuta mediante un algoritmo full-Newton). En la **segunda etapa** se planteó el proceso de descarga en control de fuerza propiamente dicho, al modo descrito en apartados anteriores.

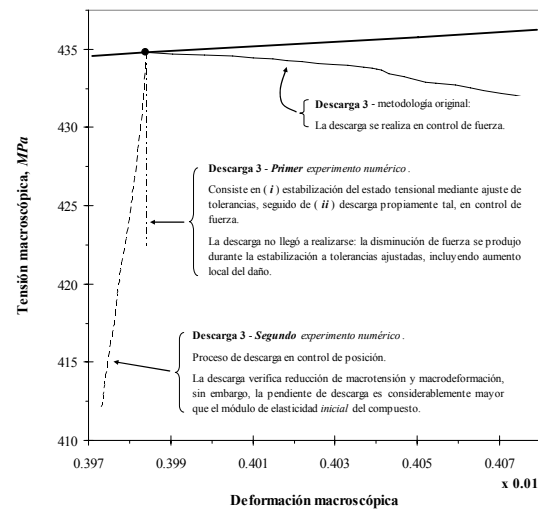


Figura 4. Detalle de la gráfica σ - ϵ incluyendo el proceso de descarga original en control de fuerza, así como los dos experimentos numéricos.

En ABAQUS, la tolerancia se define mediante comparación en cada iteración de la componente más grande del vector de residuos \vec{R} con un porcentaje de una fuerza nodal de referencia, $F_{t,av}$, es decir, $|\max(\vec{R})| \leq \alpha F_{t,av}$. Se refiere al lector a [4] para la definición de $F_{t,av}$. Para la etapa de estabilización en este experimento numérico se utilizó un valor de 0,02% (el valor usual es 0,5%). Este experimento estaba motivado en la idea intuitiva de “ordenación” del campo tenso-deformacional interior, algo que se lograría con la etapa de estabilización, previa a la descarga propiamente tal.

Durante la etapa de estabilización sin embargo, se observó que la fuerza de reacción en el nodo de control disminuyó en una cuantía no despreciable (segmento vertical en la figura 5). La segunda etapa del experimento no llegó a realizarse pues debió interrumpirse el proceso de estabilización, dados los valores muy pequeños de incrementos temporales encontrados por el algoritmo de incrementación automática de ABAQUS. Examinando los mapas de daño, se observaron incrementos locales de esta variable. Es decir, el daño aumentó durante la estabilización a macro-deformación constante, dando origen a un decremento en la macro-tensión soportada por la celda, desde 435 hasta 422 MPa.

El control de posición no es el método más natural en descargas pues se requiere conocer de antemano el retroceso máximo admisible. Sin embargo, y para analizar la influencia que el sistema de control pudiera tener en el proceso de descarga, se realizó un **segundo**

experimento numérico en el que se llevó a cabo una descarga en control de posición (utilizando las tolerancias que, por defecto, ofrece el código de cálculo). En este caso, la descarga resultó no lineal con una ligera incurvación inicial de la línea de descarga, acompañada de un aumento local del daño; la pendiente media del tramo recto de la línea de descarga resultó varias veces superior al valor del módulo de elasticidad inicial, E_0 . Lo que demuestra que la disminución registrada en la macro-tensión fue mucho mayor que la que correspondería al retroceso prescrito de la deformación macroscópica (incluso si no se estuviera en presencia de daño). Esto sólo se puede explicar por un aumento del daño *durante* esta descarga efectuada en control de posición.

4 MECÁNICA DE DAÑO EN DESCARGA.

A continuación se analiza el problema desde el punto de vista de la Mecánica del Daño estudiando la definición del Modelo Constitutivo Cohesivo usado en los elementos de interfaz.

El modelo cohesivo utilizado en todas las simulaciones previas consiste en una ley tracción-separación con una parte inicial lineal y elástica, un criterio de iniciación de daño definido en tensiones y una curva de ablandamiento lineal. Esta ley se representa en la figura 6 mediante la línea continua que une los puntos OAB . En ella, el punto A representa el criterio de iniciación de daño ($D_A = 0$), mientras que B representa una apertura totalmente dañada ($D_B = 1$). En la gráfica inferior se representa la evolución del parámetro de daño D en función de la apertura de la interfaz.

Sea P , en la figura 6, un punto al que se ha llegado a través del camino OAP , mediante aplicación de un proceso de carga monótonamente creciente en *control de posición* (esto es, con apertura *prescrita* de la interfaz cohesiva). El punto P representa un estado de equilibrio entre las tracciones externas ejercidas sobre la interfaz y las tensiones internas transmitidas por la interfaz cohesiva. Nótese que la apertura de interfaz en P ha superado la apertura de iniciación del daño, de modo que $0 < D_P < 1$. La rigidez de la interfaz se ha degradado en un factor $1-D_P$, como se indica en la figura 5.

Supóngase ahora que las tracciones externas disminuyen por alguna razón (control de fuerza), causando el decremento $\Delta t = t_Q - t_P$ en la tensión interna transmitida por la interfaz indicado en la fig.6. En una implementación práctica de este modelo cohesivo, frente a este decremento Δt el algoritmo que calcula la solución constitutiva debe ser capaz de obtener la nueva apertura de interfaz, así como la variación de las variables internas que el modelo considere, que mantienen el equilibrio de fuerzas.

Obsérvese que si en la solución constitutiva participan simultáneamente como incógnitas tanto la apertura de interfaz δ como el parámetro escalar de daño D , existen

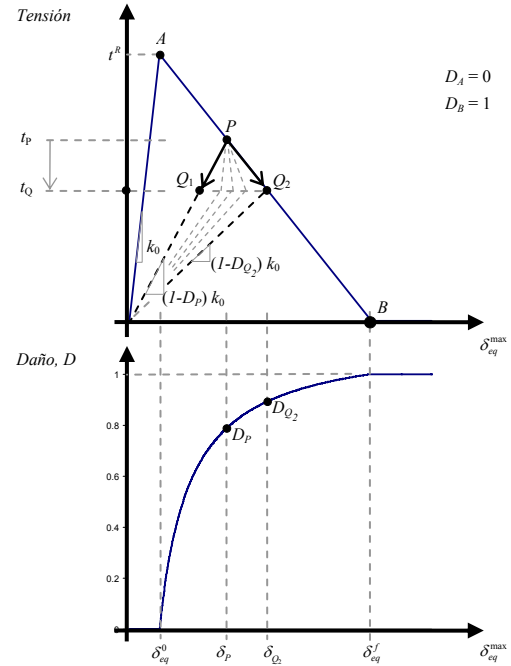


Figura 5. Ley tracción-separación (arriba) y su correspondiente ley de evolución del parámetro escalar de daño (abajo)

infinitas soluciones que garantizan el nuevo equilibrio de fuerzas. Corresponden a puntos del segmento horizontal *entre* los puntos Q_1 y Q_2 .

El camino de descarga PQ_1 ocurre con disminución de la apertura a daño constante, de modo que $D_{Q_1} = D_P$, siendo ésta la situación físicamente esperable. El camino PQ_2 en cambio, ocurre con un aumento tanto de la apertura como del parámetro de daño, de modo que $D_{Q_2} > D_P$, siendo ésta una situación que no tiene sentido físico, aunque es matemáticamente admisible si, como se dijo, ambas variables participan en las iteraciones constitutivas y el único criterio de solución es el equilibrio de fuerzas.

Si a partir del punto A se realiza un proceso de descarga macroscópico *en control de posición* (es decir, prescribiendo la apertura de la interfase) queda descartada una solución que implique aumento de la apertura de la interfaz. Por lo tanto, es claro que la solución, en este caso de descarga en control de posición, es única (punto C).

Para constatar estas observaciones, se consideró un modelo constituido por un único elemento cohesivo sobre el que actúan fuerzas iguales aplicadas sobre los cuatro vértices y normales al plano del elemento.

Con este modelo se llevó a cabo un conjunto de experimentos numéricos. Los análisis se realizaron con el código ABAQUS [4]. En la figura 6 se esquematizan los análisis realizados; el punto A representa el estado

tracción-separación del elemento cohesivo en el momento en el que se inicia la descarga. En todos los casos la carga se realizó en control de posición.

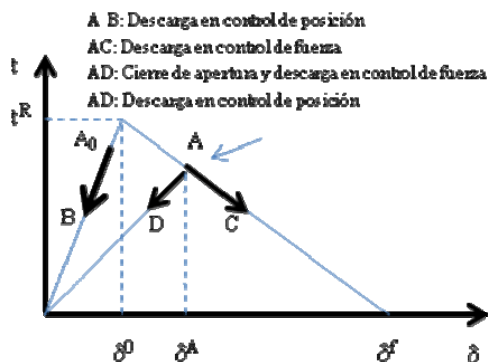


Figura 6.- Caminos de descarga

a) *Carga hasta un valor de apertura menor que el punto de iniciación de daño seguida de descarga en control de fuerza.*- La descarga se produjo, como era de esperar, por la rama elástica inicial (vector A_0B).

b) *Carga hasta un valor de apertura, δ_A , mayor que el punto de iniciación de daño, δ_0 , pero menor que el punto de interfaz totalmente dañada, δ_f , seguida de una descarga en control de fuerza.*- Se simulaban descargas desde diferentes valores de apertura en el intervalo (δ_0, δ_f) . En todos los casos la descarga dio lugar a un aumento de la apertura del elemento acompañado de un aumento en el parámetro de daño D (vector AC) correspondiente a una descarga hacia el punto B de la figura 6.

c) *Carga hasta un valor de apertura δ_A seguida de una descarga en control de posición.*- La descarga se produjo por una línea de descarga lineal-elástica cuya pendiente es la rigidez inicial reducida por el factor $1-D$, (vector AD).

d) *Carga hasta un valor de apertura δ_A seguida de una descarga en dos etapas.*- La **primera etapa** consistió en prescribir un pequeño cierre de la apertura (esto es, una pequeña descarga en control de posición). La **segunda etapa** consistió en una descarga en control de fuerza a partir del punto final de la descarga previa en control de posición. El camino de descarga en esta última etapa correspondió a un cierre de interfaz, sin aumento del daño, por una línea cuya pendiente es la rigidez inicial reducida por el factor $1-D$, (vector AD). Esto demuestra que el parámetro de daño no participó en las iteraciones de equilibrio cuando la descarga en control de fuerza se realiza desde un punto (final de la primera etapa) que no está en la curva de ablandamiento.

Observación.- Es de destacar que, en el caso de celdas multipartícula, aunque se esté llevando a cabo una descarga macroscópica en control de posición, los elementos cohesivos están embebidos en un entorno

(matriz-partícula) del que reciben únicamente una historia de tensiones, no de desplazamientos prescritos. Por lo tanto, en el caso de descarga macroscópica en control de posición, es de esperar, también, multiplicidad de soluciones.

5 CONCLUSIONES

Si se simula un proceso de descarga a partir de un valor relativamente bajo de macrodeformación, el camino de descarga en la gráfica tensión-deformación obtenida puede considerarse perfectamente lineal. Sin embargo, si el proceso de descarga se inicia para niveles más altos de deformación, el camino de descarga muestra una marcada no-linealidad inicial.

En un proceso de descarga puede haber soluciones múltiples de las ecuaciones de equilibrio cuando se modeliza $D(\epsilon)$. alguna de las soluciones puede corresponder a un camino de descarga no lineal con incremento de daño. El daño aumenta localmente durante las primeras etapas en las que el proceso de descarga muestra no-linealidad, tanto si se realiza en control de carga como en control de posición.

Para que un proceso numérico de descarga se produzca por un camino físicamente razonable (camino lineal sin incremento del daño), debería cumplirse que en las primeras iteraciones constitutivas no participara el parámetro de daño, D . Otra posibilidad es que la modelización constitutiva del elemento cohesivo incluyera, también, algún criterio de Mecánica de Fractura (integral J o K_{IC}) para controlar el eventual crecimiento de D .

6 REFERENCIAS

- [1] Segurado, J. and Llorca, J. "A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites". Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Volume 50, Issue 10, Pages 2107-2121 (2002)
- [2] Segurado, J. and Llorca, J. "A computational micromechanics study of the effect of interface decohesion on the mechanical behavior of composites". Acta Materialia Volume 53, Issue 18, pages 4931-4942 (2005)
- [3] J. Zahr Viñuela and J.L. Pérez Castellanos. "Modelo multipartícula para el análisis del comportamiento mecánico de materiales compuestos reforzados con partículas". Anales de Mecánica de la Fractura, Vol.: II, Pag. 482- 488 (2007)
- [4] ABAQUS, Version 6.8-2, Dassault Systèmes Simulia Corp. 2008.