UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA ESCOLA TÈCNICA SUPERIOR D'ENGINYERS DE CAMINS, CANALS I PORTS

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE PROCESOS DE

COMPACTACIÓN DE PULVIMATERIALES.

APLICACIÓN DE TÉCNICAS DE CÁLCULO PARALELO

TESIS DOCTORAL

Presentada por: JUAN CARLOS CANTE TERÁN

DIRIGIDA POR LOS PROFESORES: DR. JAVIER OLIVER OLIVELLA Y

DR. SERGIO OLLER MARTÍNEZ

BARCELONA - ABRIL DE 1995.



2

.

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA ESCOLA TÈCNICA SUPERIOR D'ENGINYERS DE CAMINS, CANALS I PORTS

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE PROCESOS DE

COMPACTACIÓN DE PULVIMATERIALES.

APLICACIÓN DE TÉCNICAS DE CÁLCULO PARALELO

5. g

TESIS DOCTORAL

Presentada por: JUAN CARLOS CANTE TERÁN

DIRIGIDA POR LOS PROFESORES: DR. JAVIER OLIVER OLIVELLA Y

DR. SERGIO OLLER MARTÍNEZ

BARCELONA - ABRIL DE 1995.

A mis padres y a mi hermano

AGRADECIMIENTOS

Quiero aprovechar esta oportunidad para agradecer a toda la gente que con su soporte y estímulo han hecho que el trabajo desarrollado en esta tesis llegara a buen fin. Agradezco muy especialmente a mis tutores Dr. Javier Oliver y Dr. Sergio Oller por sus sugerencias, comentarios, dedicación y apoyo en todos los momentos difíciles. Al Dr. Eugenio Oñate quien me brindó la oportunidad de realizar el Doctorado en esta Universidad.

Deseo también agradecer a muchos de mis colegas y amigos por su ayuda: Dr. Didier Joannas y Emmanuel Ilpide a quienes debo gran parte del trabajo realizado en el capítulo 5, a los Drs. Mario Galindo y Diego Celentano por su ayuda y valiosos consejos, a los Sres. Francesc Bassas y Miguel A. de Riera por su continua ayuda en la parte informática y en general a todos mis grandes amigos del Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería (CIMNE) con quienes he tenido la oportunidad de compartir muy gratos momentos. A los profesores José R. Toro y Alberto Sarria de la Universidad de los Andes, quienes me impulsaron y me brindaron su apoyo en las etapas iniciales del Doctorado. Por último agradezco al Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería (CIMNE) y a la Universidad Politécnica de Cataluña (UPC) por la ayuda económica a la que tuve derecho durante la realización de esta tesis.

i

ÍNDICE

			<u>pag.</u>				
	Agr	adecimientos	i				
	Índi	ce	iii				
	Intr	oducción y objetivos	vii				
1.	Des	cripción fenomenológica del proceso de Compactación	1				
	1.1	La pulvimetalurgia y el proceso de compactación	1				
	1.2	Propiedades y producción de materiales metálicos en polvo	7				
		1.2.1 Composición	7				
		1.2.2 Forma, tamaño y superficie específica de las partículas	7				
		1.2.3 Flujo y densidad aparente	9				
		1.2.4 Densidad y otras propiedades del material en verde	11				
		1.2.5 Manufactura de polvos metálicos	11				
	1.3	Proceso de compactación en frío	13				
		1.3.1 Compactación uniaxial en frío	14				
		1.3.2 Diseño del Proceso de compactación	18				
		1.3.3 Limitaciones en el Diseño	21				
2.	Esta	do del arte de los modelos constitutivos del pulvimaterial	23				
	2.1	Generalidades	23				
	2.2	Clasificación de los diferentes modelos constitutivos	25				
	2.3	3 Descripción de los diferentes modelos					
		2.3.1 Modelos a partir del comportamiento de los materiales					
		friccionales	27				
		2.3.2 Modelos a partir de materiales porosos	31				
		2.3.3 Modelo para la extracción del compacto	37				
	2.4	Formulación del problema global	38				
	2.5	Consideraciones finales	40				

r	1.
	dica
111	uice.

r'

3.	Forn com	nulaci pactao	ón matemática del modelo propuesto para la ción de pulvimetales	41					
	3.1	Intro	lucción	41					
	3.2	Eleme	entos básicos del modelo de compactación	43					
	3.3	Mode	lo constitutivo	46					
		3.3.1	Cinemática	46					
		3.3.2	Formulación de las ecuaciones constitutivas	49					
		3.3.3	Integración de la ecuación constitutiva	58					
	3.4	Tratamiento del contorno: contacto							
		3.4.1	El problema de contacto	67					
		3.4.2	Método de Penalización	73					
		3.4.3	Método de los multiplicadores de Lagrange aplicado al Contacto	77					
	,	3.4.4	Lagrangiano Aumentado aplicado al problema del Contacto	79					
	3.5	Tratamiento del contorno: fricción							
		3.5.1	El problema de la fricción	85					
		3.5.2	Modelo de fricción: Método de penalización	86					
		3.5.3	Integración del modelo de fricción	89					
		3.5.4	Fricción : Multiplicadores de Lagrange	93					
		3.5.5	Método del Lagrangiano Aumentado aplicado a la fricción	96					
A	l Cál	culo d	el tensor constitutivo tangente	101					
	A1.1	Tenso	r constitutivo tangente: fluio no asociado	101					
	A1.2	Tenso	r constitutivo tangente: fluio asociado	109					
A1.3 Tensor constitutivo tangente contunuo									
A2 Contribución a la matriz tangente debido al contacto y a la									
	nice	юп		110					
	A2.1	Cálcu	lo de la matriz tangente global	115					
	A2.2	Contr	ibución debida al contacto y a la fricción	117					
			v						
A	B Dise	cretiza	ación e implementación por elementos finitos	125					
A 4	l Ope	erador	es de transformación y derivada de Lie	131					

iv

			Índice	v								
4.	Ejer	nplos	de validación y simulación numérica	135								
	4.1	Intro	ducción	135								
	4.2	Ejem	plos de validación	136								
		4.2.1	Comparación entre la regla de flujo asociada y una no									
		100	asociada	136								
		4.2.2	Validación de la regla de flujo asociada	140								
	1 2	4.2.3	Validación del estado tensional	144								
	4.3	Ljemj	Influencie de la espeltari efecte de la frigción	100								
		4.3.1 4.3.2	Efecto de las diferentes velocidades relativas de los	100								
			punzones en el proceso de compactación	161								
		4.3.3	Compactación de una pieza a varios niveles	167								
		4.3.4	Consideraciones finales	185								
-	T T 4 • 1 •	• • • •										
5.	5. Utilización de ordenadores paralelos en cálculos por elementos finitos											
	eien	ientos	linitos	107								
	5.1	Motiv	ación para el uso de ordenadores paralelos	187								
	5.2	Descr	ipción del algoritmo general	189								
		5.2.1	Cálculo de las fuerzas internas	190								
		5.2.2	Cálculo de las fuerzas externas	190								
		5.2.3	Cálculo de la matriz tangente	192								
		5.2.4 Solución del sistema lineal										
	5.3	Descr	ipción de las diferentes arquitecturas paralelas	193								
		5.3.1	Clasificación de los ordenadores paralelos	193								
		5.3.2	Ordenadores del tipo SIMD: Connection Machine CM- 200	195								
		5.3.3	Ordenadores del tipo MIMD	197								
	5.4	Estra	tegias de implementación de un problema cuasiestático de									
		E.F. ε	en ordenadores paralelos	198								
		5.4.1	Implementación sobre un ordenador masivamente									
			paralelo	198								
			5.4.1.1 Análisis de diferentes métodos de solución del	100								
•			5412 Estructura de datos sobre un ordenador	199								
			masivamente naralelo	205								
		542	Implementación sobre un ordenador de baja granularidad	200								
		0.1.2	5.4.2.1 Método del complemento de Schur	210								
			5.4.2.2 Implementación del complemento de Schur	211								
			5.4.2.3 Implementación sobre un ordenador MIMD	212								
			5.4.2.4 Paralelismo de grano fino	216								
	5.5	Result	ados comparativos	217								

Índice

.

		5.5.1	Los	diferent	es c	ordenad	ores	у	sus	\mathbf{resp}	ectivas	
			imple	ementacio	nes							217
		5.5.2	Desci	cipción de	l ejem	nplo de j	prueba	ì				217
		5.5.3	Resul	ltados so	bre 1	in orde	enador	sec	cuenci	al:	Silicon	
			Grap	hics Indig	ço							218
		5.5.4	Resul	ltados sol	ore or	lenador	es SIM	1D: (CM-20	0уС	M-5	219
		5.5.5	Resul	ltados so	obre	un ord	lenado	or d	e gra	no g	grueso:	
			CON	VEX C34	80							220
	5.6	Concl	usione	s								222
6.	Con	clusion	nes y	líneas fu	ituras	s de inv	vestig	ació	n			225
	Bibl	iografi	ía									229

1

INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

MOTIVACIÓN

Los procesos de compactación de pulvimateriales forman parte de la tecnología de conformado de polvos cuyas aplicaciones están destinadas a la fabricación de materiales metálicos y/o cerámicos de alta calidad y a la manufactura de muchos de los componentes que se requieren en la industria automotriz, aeronáutica, eléctrica, electrónica, en la fabricación de máquinas herramienta, etc. La materia prima, que consiste en un polvo con un diámetro medio entre $20\mu m$ y $200\mu m$, se compacta dentro de un molde, mediante la acción de un conjunto de punzones que se desplazan en distintos sentidos y en general con diferentes velocidades relativas. Después de la compactación, la densidad final puede ser 2 o 3 veces la densidad inicial y por encima del 90% de la densidad teórica del polvo constituyente. El producto final es una pieza compactada (compacto) con la forma de la pieza deseada, que tiene la resistencia suficiente para que pueda ser trasladada sin que se fracture, pero que en ningún caso se puede utilizar en una aplicación en ingeniería. El valor óptimo de las propiedades mecánicas del compacto se alcanza en la etapa de sinterización, que consiste en introducir el compacto en un horno y someterlo a la acción del calor dentro de una atmósfera controlada. En esta etapa, las partículas se sueldan entre sí, por difusión atómica y se obtiene la resistencia requerida. La temperatura a la que está sometido el compacto durante esta etapa, se conoce como temperatura de sinterización y se encuentra por debajo del punto de fusión de los elementos constituyentes del polvo metálico.

Entre las principales razones que conducen a utilizar los procesos de compactación y la tecnología de conformado en general, están aquellas puramente técnicas, otras económicas y otras que permiten incursionar nuevas vías de desarrollo que antes eran inexploradas. Mediante esta tecnología se pueden fabricar materiales compuestos por elementos de altísimo y muy diversos puntos de fusión cuya incompatibilidad hacía imposible la aleación de ciertos compuestos como: W-Cu-Ni. Existe también la posibilidad de desarrollar micro-estructuras muy particulares, como la porosidad en los materiales para filtros metálicos, o piezas anticorrosivas, o la obtención de estructuras muy finas para disminuir la fricción entre piezas. etc. Los procesos de compactación en particular ofrecen entre otras, dos ventajas que justifican su utilización. La primera, es el ahorro de materia prima que se obtiene respecto a otros procedimientos de manufactura (mecanizado, fundición, forja) y la segunda, que es en gran parte responsable de la primera, es que el compacto final está muy cerca de tener las dimensiones finales deseadas.

La bondad del proceso de compactación depende entonces del costo de la manufactura y de las propiedades finales requeridas. La fabricación de un nuevo componente, requiere el diseño de todo el proceso de compactación, que se especifica mediante las distintas variables que intervienen en el diseño tales como: el tipo de pulvimaterial, la forma y tamaño del molde, la secuencia y velocidad de los punzones, el procedimiento de extracción, etc.

Los métodos actuales para diseñar los procesos de compactación se basan principalmente en la propia experiencia y en la prueba de un gran número de prototipos de diseño, que son costosos en tiempo y dinero. El diseño de un proceso típico requiere varias semanas para diseñar los ensayos, para modificar los moldes, los punzones, la secuencia de movimientos, etc, todo con el fin de obtener un compacto con una apropiada distribución de densidades.

Los métodos computacionales para simular los procesos de compactación, basados en las teorías de la mecánica de sólidos, aparecen como unas herramientas prometedoras, para reducir el costo tanto de tiempo como de dinero, que se requiere durante las etapas de diseño del proceso de compactación. Dichas herramientas (programas de ordenador) también proporcionan nuevas interpretaciones acerca de los cambios físicos que ocurren durante la compactación. Esto permitirá analizar nuevos procesos que permitan construir componentes más complicados.

Desafortunadamente, el tiempo de ejecución de un programa numérico desarrollado en un ordenador secuencial requiere tiempos de cálculo todavía muy elevados para que pueda reemplazar eficazmente a las metodologías del diseño tradicionales. Ésta es una de las razones por las que la supercomputación en general y el cálculo paralelo en particular, emergen como un camino posible para conseguir que este tipo de nuevas metodologías de diseño, se conviertan en herramientas de uso diario.

viii

OBJETIVOS

El objetivo global de la tesis es la simulación numérica de la fase de compactación de pulvimetales, con el ánimo de facilitar y mejorar el diseño de los procesos de fabricación por compactación de polvos metálicos. Este objetivo se inscribe dentro de unas líneas de investigación de más largo alcance que por un lado consideran la simulación de todo el proceso de fabricación y su incidencia en las propiedades del material resultante, y por otro, la aplicabilidad de las técnicas del cálculo paralelo que permitan obtener tiempos de respuesta razonables.

Dicho objetivo global puede descomponerse en los siguientes objetivos concretos:

a) Desarrollo de un modelo numérico, con capacidad de simular los siguientes fenómenos que se producen durante la fase de compactación:

- el transporte de material de unas zonas a otras en el interior del molde
- la densificación del aglomerado de polvo en el rango que va desde el estado de la materia prima en polvo, hasta valores del 80-90% de la densidad del producto totalmente homogéneo
- el rozamiento de las partículas con las paredes del molde y sus efectos sobre la densificación de las zonas cercanas
- el estado tensional que se produce durante el proceso de compactación y especialmente el estado de tensiones residuales que tiene el producto al final del mismo
- la fuerza de extracción requerida para expulsar el compacto del molde
- la recuperación elástica (*spring-back*) que se produce después de la etapa de extracción

En esencia, el modelo deberá ser capaz de proporcionar una respuesta, en términos de la distribución de densidades y el estado tensional durante el proceso de compactación, en función de los siguientes parámetros:

- la geometría del molde
- las propiedades físicas del compacto
- cualquier diseño del proceso de compactación, establecido en términos del nivel de las fuerzas de compresión, la secuencia de actuación de los punzones, los tiempos de actuación de los mismos, etc.

b) Calibración de los parámetros del modelo numérico y de la metodología de simulación, por comparación entre los resultados numéricos y experimentales.

c) Implementación del modelo numérico aplicando las técnicas del cálculo paralelo. Primero estudiando las diferentes arquitecturas paralelas disponibles y después eligiendo la estructura de datos, que mejor se ajuste a la máquina, con el fin de obtener altas eficiencias.

CONTENIDO DE LA TESIS

Esta tesis presenta un modelo numérico para simular la fase de compactación de pulvimateriales y su implementación en ordenadores de cálculo paralelo. La tesis consta de cinco capítulos. En el capítulo 1, se lleva a cabo una breve descripción fenomenológica del proceso de compactación, se estudian las principales propiedades y métodos de producción del material en polvo y su efecto sobre las propiedades finales del compacto. Se analizan cada una de las operaciones que intervienen en el proceso y se estudian las modificaciones de las propiedades físicas a medida que avanza la compactación. El capítulo 2 corresponde al estado del arte de los modelos constitutivos empleados hasta ahora para la modelización del pulvimaterial, también se describen algunas de las estrategias numéricas empleadas para la solución del sistema de ecuaciones asociado a la modelización.

En el capítulo 3, se presenta la formulación matemática del modelo numérico que se propone en esta tesis. En la sección 3.2 se describen las variables básicas del modelo y su interpretación física. Se analizan también los alcances y limitaciones del modelo. En la sección 3.3 se formulan las ecuaciones básicas necesarias para la simulación numérica: ecuaciones cinemáticas, ecuación constitutiva, función de fluencia, reglas de flujo y disipación. En las secciones 3.4 y 3.5 se describen los modelos de contacto y de fricción que se estudian en esta tesis para modelar el efecto que producen las paredes tanto del molde como de los punzones, sobre el material en polvo y en general sobre las propiedades mecánicas finales del compacto. El capítulo se completa con cuatro anexos que contienen los cálculos necesarios para la formulación del modelo numérico. En el anexo A1, se realiza el cálculo del tensor constitutivo tangente, que se necesita para garantizar la convergencia cuadrática del problema global. En el anexo A2 se calculan las contribuciones a la matriz tangente global debidas a los términos de contacto y fricción. En el anexo A3, se describen brevemente algunos aspectos técnicos que se deben tener en cuenta a la hora de realizar la discretización e implementación por elementos finitos y se describe la forma como se calculan en esta tesis los términos de fricción y contacto. El anexo A4, contiene un resumen de las operaciones (pull back, push forward) de transformación de tensores entre las dos configuraciones: material y espacial.

En el capítulo 4, se estudia el comportamiento del modelo numérico propuesto. El capítulo se divide en dos secciones, en la seccion 4.2 se describen una serie de ejemplos que permiten evaluar la herramienta numérica comparando los resultados numéricos frente a una campaña de resultados experimentales. En la seccion 4.3, se describen una serie de ejemplos que tienen por objeto mostrar la utilidad de la herramienta numérica en los diseños de los procesos de compactación de piezas complejas.

En el capítulo 5 se presentan los resultados obtenidos a partir de la aplicación las técnicas del cálculo paralelo a un programa cuasi-estático de elementos finitos, que en este caso es el programa de simulación desarrollado en esta tesis. En la sección 5.2 se analiza cuidadosamente el algoritmo general del problema no lineal y se destacan las operaciones principales que deben tenerse en cuenta en el momento de paralelizar el programa. En la sección 5.3 se decriben brevemente las diferentes clasificaciones de ordenadores paralelos. En la sección 5.4 se presentan las diferentes estructuras de datos que se proponen dependiendo del tipo de ordenador y por último en la sección 5.4 se comparan los tiempos de ejecución que se obtienen sobre las diferentes arquitecturas, se analizan las ventajas y desventajas de cada arquitectura y los problemas de comunicación que se generan en cada una de ellas.

CAPÍTULO 1

DESCRIPCIÓN FENOMENOLÓGICA DEL PROCESO DE COMPACTACIÓN

1.1 LA PULVIMETALURGIA Y EL PROCESO DE COM-PACTACIÓN

La pulvimetalurgia o metalurgia de polvos, es una parte de la Ingeniería Metalúrgica de carácter pluridisciplinar que da lugar a la técnica de fabricación de piezas mediante compactación y sinterización de polvos o mezclas de polvos metálicos y lubricantes, obteniendo un producto final con una porosidad controlada[4]. La primera fabricación de un grupo considerable de piezas metálicas provenientes de polvos metálicos fue llevada a cabo al menos hace cinco siglos [6] y se producía mediante este proceso ya que era imposible con los antiguos hornos calentar el material hasta el punto de fusión. Entre los primeros metales, que se produjeron de esta manera figuran el hierro y el cobre. El método general consistía en reducir el mineral por medio del carbón, el resultado era un metal esponjoso que luego se consolidaba golpeando la masa caliente. Más tarde, la fabricación de piezas a partir de polvo metálico fue desplazada por los métodos de fusión, aunque el polvo metálico se seguía empleando en la producción de metales refractarios (se denominan como refractarios a una serie de metales como el Wolframio, molibdeno y tántalo de elevado punto de fusión, que en servicio resisten elevadas temperaturas). Al comienzo del siglo diecinueve, Wollaston logró producir platino sin necesidad de calentar el material hasta su fase líquida, consiguiendo así la primera sinterización de la que se tiene constancia. Los detalles del método se publicaron en 1829 donde se pueden apreciar los primeros análisis, teniendo ya en cuenta factores tan importantes como el tamaño de las partículas y la alta densidad del material macizo. En la segunda mitad del siglo, el método de Wollaston fue reemplazado por procesos de fusión para la producción del platino. Pero seguía existiendo una gran demanda de materiales con un mayor punto de fusión, que sólo podían ser consolidados a partir de metales en polvo. La preparación de lingotes, a partir de polvo metálico, para fabricar metales tales como el tungsteno, molibdeno, tántalo y niobo se emplea todavía a escala comercial. Debido a que no existe ningún metal, que no se pueda fundir, entonces el uso de la pulvimetalurgia para la producción de metales se vió restringido sólo para la fabricación de aquellos donde la fusión es una parte indeseable en la producción [6][2]. Existía entonces un gran vínculo entre

Capítulo 1

la producción de materiales refractarios y el empleo de la pulvimetalurgia, pero fuera de ésta, se generaron nuevas líneas que determinaron las aplicaciones actuales de la pulvimetalurgia. Entre las primeras nuevas aplicaciones, apareció la producción de carburos cementados (aleaciones también conocidas como metal duro), que resultaron de la necesidad de producir matrices resistentes al desgaste. El desarrollo de carburos cementados se inicio con los trabajos de Krupp en 1914 [6], la producción se extendió a la producción de tugnsteno cementado y aleaciones de molibdeno para contactos eléctricos. En la década de los años veinte aparecieron los primeros cojinetes autolubricados mediante la impregnación del aceite en el material poroso. Se inició así una nueva etapa, la producción de metales porosos. Los métodos convencionales de conformado no sólo no son capaces de fabricar piezas con porosidad controlada prevista, sino que la porosidad normalmente aparece de forma incontrolada como defecto de la técnica de moldeo. Las aleaciones porosas tienen interés práctico, porque se pueden llenar los poros de aceite, que actúa de lubricante cuando la pieza se utiliza como cojinete, o se puede utilizar como filtro, en las operaciones de filtrado, o como absorbentes de ruido [6][2]. Pero el desarrollo más importante que tuvo la pulvimetalurgia se encontró en la producción de ciertas piezas de formas complejas que en algunos casos se pueden fabricar más baratas que mediante las técnicas tradicionales del moldeo, forjado, o mecanizado. Se inició entonces una gran expansión de la industria de componentes sinterizados, siendo hoy uno de las ramas más importantes de la pulvimetalurgia. En la actualidad, la industria del automóvil es una de las más afectadas por la pulvimetalurgia. Los punzones y las guías de los amortiguadores son piezas sinterizadas. Otras aplicaciones típicas incluyen partes de los cierres de las puertas, el rotor de la bomba de aceite, engranajes, anillos de bloqueo, partes del embrague, anillos de los punzones, asiento de las válvulas, etc. Se fabrican también bastantes componentes que requieren una alta precisión, como los sistemas hidráulicos. Los avances en la Ingeniería nuclear también han influenciado el empleo de la pulvimetalurgia, debido a la necesidad de producir nuevos materiales que provienen de la mezcla entre metales y no metales, conduciendo a que las fronteras entre los pulvimetales y los cerámicos ya no sea tan marcada.

El proceso de fabricación

Cuando se desea construir una pieza a partir de polvos metálicos, es necesario dar al polvo metálico la forma deseada y luego producir un enlace entre las partículas que la convierta en una pieza maciza con buenas propiedades mecánicas. En general, al final de la etapa de conformado, la pieza sólo tiene la resistencia suficiente para facilitar la manipulación de ésta. La resistencia final se obtiene en la segunda etapa, que se conoce como sinterizado. Éste es un proceso físico-químico que consiste en calentar la pieza (por debajo de la temperatura de fusión de sus componentes) en un horno en atmósfera controlada, de tal forma que la pieza adquiere consistencia mecánica por recristalización y soldadura intergranular de las partículas de polvo. El material pasa de ser un material muy frágil a convertirse en un material con buenas propiedades mecánicas.

Entre las formas más conocidas de conformado se encuentran: (1) conformado sin presión, (2) conformado con presión en frío, (3) conformado con presión en caliente.

Conformado sin presión

Los métodos de conformado sin presión son aquellos en los que no se aplican fuerzas externas, excepto las restricciones que ofrece el molde, la gravedad y la presión atmosférica. Entre los métodos más conocidos en este grupo se encuentran la sinterización floja o sin cohesión, que se emplea ampliamente para manufacturar materiales altamente porosos. Básicamente el metal es vertido en el molde el cual se calienta a la temperatura de sinterizado. La geometrías que se pueden hacer por este método están limitadas a la capacidad que tenga el polvo para fluir y la forma del molde. Otra limitante es la contracción que ocurre como resultado de la sinterización, que puede fracturar la pieza. Una cuidadosa elección de la distribución y tamaño de las partículas puede llevar en algunos casos a densidades del 80% de la densidad teórica [6].

Conformado en frío

La etapa del conformado en frío se conoce también como compactación en frío, o prensado en frío y consiste básicamente en la aplicación de presión sobre una masa de material en polvo, que se encuentra dentro de una matriz, que es el negativo de la pieza que se desea construir. La compactación se realiza mediante prensas verticales mecánicas, hidráulicas o mixtas y la velocidad de prensado está comprendida entre 400 y 1400 piezas por hora [4].

Entre las etapas precedentes a la compactación en frío, que influyen en las características de la pieza final, se encuentran, la producción y el mezclado del material en polvo. La producción del material en polvo, se lleva a cabo por diversos métodos, que van desde los puramente mecánicos como la trituración, hasta los métodos más sofisticados como la reducción o la atomización. Como se explicará más adelante, las diferentes características del polvo como su grado de pureza, tamaño y forma del grano, etc, dependen fuertemente del tipo de método empleado. El mezclado consiste en repartir homogéneamente las partículas que conformarán el material diseñado, añadiendo además un lubricante que es imprescindible en la etapa de compactación. En general, el mezclado se lleva a cabo en un mezclador bicónico que se hace girar durante un determinado tiempo, luego la mezcla final se descarga en tolvas que suministran el material a la matriz. El proceso de compactación en frío a su vez, se puede dividir en tres etapas [6][2][5]: el llenado (figuras 1.1.1, 1.1.2, 1.1.3), que consiste

Capítulo 1

en depositar el material de las tolvas en la matriz. Esta primera etapa es esencial para garantizar la homogeneidad de la pieza, ya que todas las zonas de la matriz deben llenarse de forma similar para evitar variaciones en la densidad al final del proceso. La siguiente etapa, es la compactación o aplicación de la presión externa (figura 1.1.4) mediante el uso de punzones que se desplazan a una velocidad determinada, o que transmiten una presión determinada. En esta etapa, se produce un aumento en la densidad y en general, un aumento en las propiedades mecánicas de la pieza. El movimiento de los punzones se sincroniza de tal forma, que la distribución de la densidad en el interior de la pieza sea lo más homogénea posible. Luego de aplicada la carga, viene la etapa de extracción y retirada de la pieza (figuras 1.1.5, 1.1.6, 1.1.7). La extracción se realiza por medio de los punzones inferiores, que se desplazan hacia arriba venciendo la fuerza de fricción que existe entre la pieza y el molde. El efecto de la fricción se puede atenuar con el uso de lubricantes. Después de la retirada de la pieza, se procede a llenar el molde y continuar el proceso.

Las principales ventajas que tiene la utilización de este proceso, para la fabricación de piezas de uso industrial[4] son las siguientes:

- a. Permite la fabricación de piezas con un gran ahorro de materia prima, ya que sólo se usa la cantidad de material requerido para alcanzar el producto final
- b. La precisión que se obtiene en las dimensiones del producto final es bastante elevada y la dispersión de medidas en una serie larga de piezas es muy baja
- c. Las operaciones de mecanizado se reducen o se eliminan
- d. Permite construir piezas con una porosidad controlada, utilizada por ejemplo en el diseño de cojinetes autolubricados o piezas atenuantes del sonido
- e. El acabado superficial es excelente, siendo superior a técnicas convencionales como la fundición, forja, etc.
- f. Es una técnica poco polucionante
- g. El proceso de compactación permite ser automatizado, aumentando así el nivel de producción
- h. Disminuye el consumo global de energía, ya que la pieza no necesita llevarse hasta el punto de fusión del material base

Entre las desventajas se pueden enumerar las siguientes:

- i. El coste, diseño y construcción de la matriz es bastante elevado [6], entonces su inversión sólo se justifica si se pretende fabricar un gran número de piezas
- ii. La compactación, requiere la utilización de grandes presiones para poder obtener así altos valores en la densidad que a su vez implican mejoras en las propiedades mecánicas. Pero para conseguir estas grandes presiones, se

requieren prensas de gran capacidad, que además limitan el tamaño de las piezas que se pueden construir

- iii. En general, los niveles de resistencia de las piezas son menores que las de las piezas macizas
- iv. La obtención de las materias primas (polvo metálico o cerámico) es costosa
- v. Existen geometrías que son prácticamente imposibles de construir completamente por este método, lo que obliga en algunos casos a un maquinado posterior, incrementando así los costos
- vi. La etapa de la expulsión, es otra limitante en la geometría, ya que la pieza puede deformarse o romperse



Figura 1.1 Proceso de compactación (tomado de la referencia [4])

Capítulo 1

Conformado con presión en caliente

En el proceso de conformado en frío, el incremento en la densificación va disminuyendo a medida que se avanza en la compactación. Esto es debido al trabajo en frío hecho sobre las partículas de polvo, que hace muy difícil cualquier aumento en la densidad en las etapas finales del proceso a temperatura ambiente. Sin embargo, si durante la etapa de compactación, al mismo tiempo se calienta la pieza a temperatura de recristalización [6][66][67], el trabajo en frío se elimina y se consiguen de esta forma mayores densidades. El resultado son piezas con densidades cercanas a la densidad teórica, de dimensiones muy precisas, que en general no necesitan un mecanizado posterior. Además, es posible compactar metales que son imposibles de compactar a temperatura ambiente. Los primeros trabajos en esta área se deben a Goetzel. Entre las dificultades y desventajas del método se tienen las siguientes: (1) para muchos de los metales el inconveniente está en la oxidación del polvo, que hace necesario el empleo de una atmósfera que los proteja durante el calentamiento y luego también durante su enfriamiento fuera del molde. Esto hace, que el proceso sea lento y costoso [6], (2) el uso de las altas temperaturas limita el tipo de materiales que se pueden emplear para la fabricación del molde, además el desgaste se incrementa a estas temperaturas.

Existen otros procesos de conformado en caliente, como el laminado en caliente de polvos flojos o sin cohesión, que se hacen pasar por rodillos a una temperatura de $300^{\circ}C$. Una de las dificultades es la adherencia que se produce entre el material y los rodillos. Otras técnicas similares son forja, extrusion y estampado. La extrusión es muy útil para la producción de varillas, tubos y demas formas similares usando como materia prima, polvos metálicos. Otro proceso es la compactación isostática en caliente [66][67], que consiste en la aplicación de calor a un proceso de compactación isostática (la presión que se aplica es uniforme sobre todo el compacto). En este caso el polvo se envuelve en láminas metálicas flexibles y se colocan en el interior nucleos rígidos que dan la forma a la pieza. La presión se transmite por medio de un líquido o gas. La aplicación simultánea de calor, provoca una sinterización a medida que la densidad aumenta. Al igual que en los procesos anteriores las densidades finales están muy cerca a la teórica, esto equivale a decir, que el nivel de poros al final es casi nulo. Mediante esta técnica se obtienen piezas de metal duro y aceros de elevada resistencia.

En las siguientes secciones de este capítulo, se analizan con más detalle, las diversas formas de producción de materiales en polvo y el efecto sobre sus propiedades. También se analizará paso a paso el proceso de compactación en frío que es el tema central de esta tesis.

1.2 PROPIEDADES Y PRODUCCIÓN DE MATERIALES METÁLICOS EN POLVO

Se entiende por polvo metálico aquel metal en forma de polvo cuyas partículas tienen un diámetro máximo del orden de 800-900 micrones y están constituidas al menos de un 85% del metal puro, siendo el resto principalmente óxidos [8][2].

Existen diferentes métodos para la producción de polvos metálicos. Dependiendo de las características de cada uno, las propiedades del polvo varían. Como se sugiere en [6] es conveniente analizar primero las propiedades que se desean en el material en polvo y luego analizar los procesos de producción existentes. Entre las principales propiedades se cuentan: la composición, el tamaño de las partículas, su forma y estructura. Estas propiedades determinan otras características como: la superficie específica que relaciona el área superficial con el peso del polvo, la densidad aparente y la capacidad para fluir. También determina la capacidad del material para dejarse compactar y sinterizar apropiadamente.

1.2.1 Composición

La composición química del material en polvo, determina tanto las propiedades finales del producto como el proceso para producirlo. En el momento de compactar una pieza, es muy importante el comportamiento ante las grandes deformaciones que pueden ocurrir y esto viene determinado por la composición química. La aleación y las impurezas también afectan la sinterización, ya que parte de las impurezas pueden cambiar de fase a la temperatura de sinterizado. La determinación de los componentes se realiza en general con las técnicas habituales utilizadas por los analistas químicos.

1.2.2 Forma, tamaño y superficie específica de las partículas

Estos tres factores se relacionan, ya que una disminución en el tamaño de las partículas o una desviación de la forma esférica aumentan la superficie específica. Su importancia radica en la influencia que tienen en el proceso de compactado y sinterizado.

La figura 1.2 muestra una de las alternativas más comunes para la clasificación de la forma de las partículas. La figura 1.3 presenta los principales factores de forma, que se deben tener en cuenta al comparar las diversas posibilidades.

Las partículas muy finas e irregulares generalmente llevan a una alta superficie específica, que es una propiedad deseada en el proceso de sinterizado. Pero las partículas muy finas tienden a tener bajas propiedades de flujo y a disminuir la densidad aparente [4][6], estos factores son muy importantes durante



Figura 1.2 Formas típicas de granos de polvo

,

a Area C	a. esférica e. dendrítica	b. redondeada f. irregular	c. angular g. porosa	d. acicular h. fragmentada
Area b		8		
		Area		b

Figura 1.3 Factores de forma.
a, b = longitudes del rectángulo.
C = perímetro de la partícula proyectada.
A =área de la partícula proyectada

el proceso de compactación. Aunque las partículas esféricas tienen la forma óptima para permitir un buen flujo y buena densidad aparente, tienen el menor número de puntos de contacto que hacen que el área de enlace sea menor.

El tamaño de las partículas se puede determinar mediante el uso de microscopios ópticos o de electrones, en el caso de polvo muy fino. Este método es bastante eficiente pero demasiado laborioso ya que requiere que se haga la medición sobre toda una muestra que en general debe ser pequeña. Por lo tanto la selección de la muestra debe ser bastante precisa. Otro método alternativo bastante usado es el tamizado, que consiste básicamente en hacer pasar el polvo por diferentes tamices y dependiendo del porcentaje de partículas que consiguen pasar, se determina su diámetro promedio. Otra forma empleada para conocer el tamaño de partículas muy pequeñas es aprovechar la relación que existe entre la velocidad de una partícula en un fluido y su tamaño. La relación viene dada por la ecuación de Stokes, que expresa una relación entre la velocidad terminal de la partícula, la densidad de la partícula, la densidad del fluido, diámetro de la partícula y viscosidad del fluido. Para que la medición sea válida se exige



Figura 1.4 Flujómetro

que el número de Reynolds esté por debajo de 0.2. Se debe tener en cuenta que el diámetro corresponde al tamaño de una partícula esférica equivalente.

Una medición del área total superficial de una masa de polvo puede ser un buen indicativo del tamaño promedio de las partículas. Existen dos métodos para realizar este cálculo. El método de absorción que consiste en exponer a las partículas a la acción de un gas que se adhiere a la superficie de éstas formando unas macromoléculas. Se debe determinar cuanto gas fue absorbido y dependiendo de esta cantidad se determina el área superficial. El segundo método llamado permeametría se basa en el cálculo de la resistencia ofrecida al paso de un determinado fluido por una columna de material en polvo. El aparato consiste de un tubo en donde se coloca el polvo, una bomba que suministra al fluido la presión deseada y un medidor de la caida de presión al final. La superficie total se calcula mediante la ecuación de Carman [6] que expresa la superficie específica en términos de la constante de permeabilidad, la viscosidad cinemática y la fracción de volumen de vacíos respecto del volumen total.

1.2.3 Flujo y densidad aparente

La velocidad a la cual el polvo puede fluir a través de un orificio es muy importante ya que refleja en que medida el polvo conseguirá llenar completamente el molde de una determinada pieza. La determinación de esta propiedad se lleva a cabo mediante la utilización de un aparato medidor de flujo, (ver figura 1.4) que consiste en un embudo de forma cónica construido bajo ciertas medidas estandar [9][7]. Se mide entonces el tiempo que tarda en salir una cantidad fija de polvo por un orificio que normalmente tiene entre 0.1 y 0.125 pulgadas. La figura 1.5 muestra el ángulo en reposo de un buen material para fluir y otro que no lo es. Esto es debido a que en el primero, la fricción entre partículas es mayor que en el segundo y esto hace que el polvo fluya más lentamente. Capítulo 1



Figura 1.5 Ángulo en reposo: a. mal flujo b. buen flujo

La densidad aparente de una masa de polvo es el peso por unidad de volumen. El volumen incluye todos los vacíos entre partículas y la porosidad interna del material. Este valor se obtiene vertiendo el material en un contenedor de volumen conocido bajo condiciones estandar y luego se procede a pesarlo.

Esta densidad depende de la forma de las partículas, de su tamaño y distribución. Así como de su porosidad. Su interés reside en el hecho de que las matrices se llenan normalmente con un volumen fijo de polvo, por lo que la densidad, indica la profundidad con la que deben diseñarse.



Figura 1.6 a. Densidad aparente - Tamaño partícula b. Super. Específica - Tamaño partícula c. Densidad aparente - forma de las partículas

La figura 1.6 muestra cualitativamente [9] como varía la densidad aparente y la superficie específica respecto del tamaño de las partículas, así como el efecto de la forma sobre la densidad aparente. La figura 1.6.a muestra como para un mismo material constituyente, un tamaño de partículas muy pequeño tiene menor densidad aparente que un tamaño moderadamente mayor.

A medida que se hacen más pequeñas las partículas que ocupan un mismo volumen, la superficie específica aumenta, este efecto se muestra en la figura 1.6.b. La figura 1.6.c muestra como las partículas de forma esférica consiguen reorganizarse de forma óptima de tal forma que la densidad aparente es la máxima respecto a las otras formas.

1.2.4 Densidad y otras propiedades del material en verde

El término material en verde se refiere al producto que se obtiene al finalizar la compactación pero antes de ser sinterizado. Densidad en verde se refiere entonces a la densidad al final de la compactación, que puede medirse mediante técnicas estandar como pesando la pieza en aire y dentro del agua. En algunos casos con piezas complejas es más conveniente sumergirlas en mercurio.

Para conocer las propiedades del material en verde, se la somete a las pruebas estandar de dureza, resistencia (como la prueba de rotura transversal, rotura radial en el caso de piezas cilíndricas), análisis de microestructura, etc.

Un efecto muy importante como se verá más adelante es la descarga elástica, que ocurre después de que el material es expulsado del molde. Tanto en la dirección radial como en la dirección axial, se percibe un ligero cambio en las dimensiones, debido a la recuperación de la deformación elástica (*spring back*). Este cambio en medidas, puede afectar la construcción de piezas de alta precisión y además en el peor de los casos, puede producir una fractura de la pieza.

1.2.5 Manufactura de polvos metálicos

Los polvos metálicos son usualmente puros, pero el grado de pureza, el tamaño y forma del grano dependen del método para su manufactura. Entre los más comunes se encuentran los siguientes [8][2][6]:

Atomización

El metal se funde en un horno que se alimenta a una velocidad predeterminada en base a las dimensiones del surtidor. El metal se atomiza mediante la propulsión de un gas o líquido. La acción de chorro sobre el flujo de metal separa el material en diminutas gotas que luego caen libremente dentro de un contenedor (ver figura 1.7).

Debe tenerse cuidado principalmente, de controlar la temperatura del metal, velocidad del chorro y la cantidad de metal que se mezcla con el gas para que al final el resultado sea óptimo. El tamaño puede llegar al orden de los micrones y la forma puede variar desde partículas esféricas hasta completamente irregulares. Este proceso se emplea frecuentemente con metales como el hierro, aluminio y cobre. También con algunos materiales que luego se emplean en aleaciones.

Proceso electrolítico



Figura 1.7 Atomización

Consiste en someter al material a un proceso de electrólisis dentro de una cierta solución. Dependiendo de las condiciones químicas y físicas el material se deposita sobre el cátodo de tal forma que se forma una masa o una cadena de copos que luego debe triturarse mecánicamente para obtener el polvo. En general, las condiciones que garantizan una buena producción de polvo son contrarias a las condiciones que se necesitan para un correcto galvanizado. El polvo metálico que se produce es bastante puro y dependiendo de la solución se pueden variar las características finales de compactación y sinterizado.

Reducción

Es una de las técnicas más difundidas para la producción de polvo metálico, donde los óxidos metálicos son la materia prima para la reducción. Normalmente el mineral no se encuentra tan puro como para realizar una reducción directa, se debe antes realizar una etapa de concentración y purificación. En esta primera parte el material se seca y calienta a 900°C, luego se tritura a menos de 100 mesh y se separa magnéticamente. Se procede a reducir el producto en un horno continuo a una temperatura próxima a los 1000°C. La elección del agente reductor depende del comportamiento termodinámico pero también del económico. Se emplea ampliamente el carbón, que es bastante barato, con el inconveniente que es difícil de controlar el contenido de carbón en el polvo metálico resultante. Se emplea también hidrógeno o atmósferas ricas en hidrógeno pero son muy costosas. En muchos casos la reducción ocurre a altas temperaturas y el material final se torna parecido a una esponja, que debe molerse para convertirla en polvo. El tamaño final del material en polvo depende de varios parámetros: el tamaño de las partículas del óxido, la temperatura de reducción y el tiempo que se toma en la reducción. En general el resultado son partículas muy finas que además tienen facilidad para sinterizarse. La forma es en general irregular, la densidad aparente es baja y con pocas propiedades para fluir.

Trituraci'on

Proceso mecánico que convierte el metal frágil en un polvo con forma de copos. Algunos metales se pueden transformar en materiales frágiles mediante la inserción de impurezas como el azufre, luego se procede a la pulverización mecánica. Con otros metales, la fragilidad se logra calentando el material inmerso en hidrógeno, después el hidrógeno se retira calentando el material en el vacío. El polvo que se produce, generalmente es de forma angular y requiere de una subsiguiente trituración antes de que se pueda emplear en la pulvimetalurgia.

Hidrometalurgia

Esta técnica se basa en el hecho que dentro de ciertas condiciones de presión y temperatura el metal en polvo precipita de su solución o sal por el hidrógeno. El tratamiento de esta sal en solución es bastante atractivo debido a que se puede emplear directamente en el proceso de extracción del mineral, haciendo que uno de los elementos resultantes de ésta sea exactamente el material en polvo. Se emplea para la producción de hierro, níquel, cobre y cobalto entre otros. El polvo producido por esta técnica suele ser muy fino, de gran pureza y baja densidad aparente.

Precipitación durante la fase gaseosa

La técnica consiste en la obtención del polvo metálico por condensación del estado gaseoso. Por ejemplo la producción de hierro y níquel se consigue mediante un enfriamiento controlado que consigue separar el polvo metálico del monóxido de carbono. Las características del polvo pueden variarse mediante unas cuidadosas modificaciones en las condiciones de producción. Las formas de las partículas pueden variar desde esféricas para el hierro y semejante a fibras para el níquel.

1.3 PROCESO DE COMPACTACIÓN EN FRÍO

Como se explicó en el apartado 1.1, la compactación en frío se ocupa de dar forma a la pieza mediante un molde o matriz que es el negativo de la pieza deseada. Entre los principales métodos de este grupo se encuentran: compactación por vibración, compactación cíclica, laminado, presión isostática y presión uniaxial. Se completa el proceso con la etapa de sinterizado aplicada sobre el material en verde que sale de la matriz. Esta etapa calienta la pieza a una temperatura por debajo de su punto de fusión y tiene por objeto mejorar los enlaces entre las partículas del material. Se describe a continuación el proceso que es de interés en esta tesis, la compactación uniaxial en frío del material en polvo.

1.3.1 Compactación uniaxial en frío

Se pueden distinguir tres fases [6][2][4]: llenado del molde, compresión (o prensado) y expulsión del compacto. En la fase de llenado, la cavidad de la matriz, que es el negativo de la pieza final, se llena de polvo previamente mezclado. La cantidad de polvo se determina por volumen o por peso. En el primer caso, se trata de llenar la cavidad hasta que rebose el molde. Luego se enrasa a nivel con la cara inferior de la matriz. Esta operación se suele efectuar automáticamente por medio de una tolva de alimentación de forma cónica conectada a un tubo vertical terminado en una zapata giratoria. Al principio de cada ciclo de compresión, el dispositivo de alimentación se coloca sobre la cavidad de la matriz para permitir la entrada del polvo a la misma, lo que se realiza moviendo hacia atrás y adelante la zapata de alimentación. La rotación de la zapata de alimentación detiene la salida del polvo y a su vez el borde inferior elimina el polvo en exeso enrasando la cavidad. Luego el dispositivo se separa de la matriz para dejar actuar a los punzones. Los punzones se desplazan en una forma predeterminada y se compacta la pieza. Al final se procede a expulsar la pieza con la ayuda de los punzones inferiores y se procede a repetir la operación.

Una tolerancia de $\pm 1\%$ en el peso de polvo es normal en la práctica industrial [6]. Se pueden conseguir tolerancias más estrechas mediante el empleo de balanzas de precisión o llenando los moldes por peso y no por volumen. Pero cuando el llenado se hace por peso es difícil obtener una densidad aparente uniforme, por esta razón el llenado se lleva a cabo por volumen y gravedad. La diferencia en peso entre dos piezas puede llevar a una diferencia apreciable en la densidad, que a su vez ejerce una influencia importante sobre la presión específica de compactación necesaria. Además tiene efecto sobre las propiedades mecánicas del producto acabado.

Volviendo al problema de llenado, se aprecia que después de verter el material, éste adquiere una cierta densidad inicial. Esta densidad depende del tipo de polvo, ya que varía con el tamaño y forma de las partículas y con la presencia del lubricante. Cuando se aplica la primera presión de precarga la primera densificación ocurre por reacomodamiento de las partículas, mejorando así la densidad aparente. Un polvo fino con pocas propiedades para fluir tiende a formar puentes pero esta primera precarga los rompe y facilita el movimiento.

Cuando se establece el contacto metal-metal entre el polvo y las paredes del molde, aparece un fenómeno conocido como soldadura por presión en frío. Este fenómeno describe la adhesión que ocurre entre las superficies de los materiales sin la aplicación de calor. Esta adhesión disminuye la presión transmitida por el punzón al resto del material en polvo.

En las siguientes etapas la pieza comienza a ganar resistencia. Parte de ésta comienza a ser debida al aumento de las áreas de contacto entre partículas y a la deformación plástica de éstas. Los materiales frágiles se caracterizan por incrementar su densidad y resistencia sin que suceda nigún aumento en la deformación plástica. Lo que sucede es que las puntas irregulares de los granos con un aumento en la presión tienden a fracturarse, lo que altera el tamaño y mejora la redistribución. Este mecanismo, es de hecho el único que permite aumentar la densidad en materiales frágiles.

Se resumen a continuación los pasos que se distinguen durante la compactación:

- 1. Deslizamiento de las partículas sin exesiva deformación. Es sólo un fenómeno de reordenamiento.
- 2. Compresión elástica en los puntos de contacto, que son puntos temporales de contacto.
- 3. Deformación plástica en las zonas de contacto, que ahora se convierten en zonas de contacto permanente.
- 4. Crecimiento del área de contacto a través de futuras deformaciones plásticas y/o fragmentación.
- 5. Eliminación de las fronteras entre las partículas cuando las fuerzas son suficientemente grandes.
- 6. Compresión final de la pieza como un todo.

.

Algunos aspectos que vale la pena destacar de las etapas descritas son los siguientes:

La figura 1.8 muestra la curva carga del punzón-densidad típica del proceso de compactación uniaxial de simple efecto. A medida que aumenta la carga, el aumento en densidad es cada vez menor, esto es debido al endurecimiento del material.



Figura 1.8 Compactación uniaxial de simple efecto

La figura 1.9 muestra la disminución de volumen para diferentes tipos de forma de las partículas durante las primeras etapas de la compactación. La curvas 1,2,3 representan partículas esféricas con diferentes tamaños mientras la curva 4 representa partículas en forma de copos irregulares. Las partículas esféricas compactan menos que los copos, esto es debido al hecho que las esféricas consiguen distribuirse de forma óptima produciendo así una densidad inicial mayor que los copos irregulares.



Figura 1.9 Efecto de la forma de las partículas sobre la disminución de volumen (Tomada de la referencia [5])

El fenómeno de fricción se manifiesta de diferentes formas durante el proceso de compactación. La fricción interna entre las partículas es una de ellas. La otra es la que aparece entre la masa de polvo y las paredes tanto del molde como de los punzones. Según se explica en [5] esta última es la más importante.



Figura 1.10 Distribución de densidades debida a la compactación de simple efecto

Estas fuerzas de fricción entre las paredes del molde y el polvo disminuyen la transmisión de presión del punzón a las partículas del material, causando
así una variación local en la densidad. La figura 1.10 propociona una idea cualitativa del efecto de la fricción, ya que muestra como zonas cercanas al punzón poseen mayor densidad y como ésta va disminuyendo a medida que se está lejos de éste. Algunos materiales presentan una diferencia muy notoria entre la densidad arriba y la densidad abajo en procesos de compactación de simple efecto. La figura 1.11 presenta una forma de remediar esto, que consiste en la aplicación simultánea de presión arriba y abajo (compactación de doble efecto).



Figura 1.11 Distribución de densidades debida a la compactación de doble efecto

Cerca de la pared puede existir un flujo considerable de partículas, pero las que están justo en la pared se encuentran casi adheridas, esto causa dislocaciones y distorsiones severas en las proximidades de la pared. En el caso de los cilindros de las figuras 1.10, 1.11 ésto se convierte en una limitante de la razón altura y radio.

Una forma de disminuir el efecto de la fricción es mediante el uso de lubricante, que permite obtener una mayor densidad en verde y permite transmitir mejor la presión. Algunas de las desventajas que deben tenerse en cuenta para su uso son:

- a. Es una operación extra que debe hacerse manualmente lo que incrementa los costos
- b. Si se añade como solución al material en polvo, mejora su distribución pero debe eliminarse al fiñal
- c. Se puede añadir al polvo directamente pero su mejor efecto se consigue aplicándolo directamente sobre las paredes
- d. En algunos casos el lubricante puede disminuir el flujo del material, disminuyendo así la densidad aparente

- e. Eleva el nivel de la presión requerida, entonces aumenta el nivel de tensiones residuales que en el momento de la expulsión de la pieza pueden provocar rotura del material.
- f. Se debe tener cuidado con el efecto del lubricante en el momento de siterizar la pieza, ya que puede reaccionar y cambiar las propiedades del material.

Aunque parecen muchas las desventajas son muchos más los beneficios que se consiguen con una lubricación cuidadosa.

Un material en polvo no se comporta como un verdadero fluido ya que la presión aplicada no se transmite uniformemente através del compacto. Por ejemplo en una pieza cilíndrica, la relación P_r/P_a que expresa el cociente entre la presión radial y la presión aplicada es igual a la unidad en el caso hidrostático, pero en el polvo no es así. Lo que se aprecia es que aumenta con la densidad.

La presión radial deforma elásticamente el molde y el polvo. Pero además produce una deformación permanente del polvo. Cuando se elimina la presión aplicada, en la dirección radial se observa que el material recobra bastante menos que el molde por lo tanto se requiere una presión externa para la expulsión. Las tensiones elásticas en la dirección de la compactación se eliminan al retirar la presión de compactación, pero la tensión radial permanece. Durante el estado de expulsión cuando la pieza ha salido parcialmente del molde, la sección libre se expande lateralmente. Si la fuerza cohesiva del compacto es insuficiente para soportar esta alteración súbita de las fuerzas elásticas, se producirá una laminación horizontal en la pieza. Este tipo de problemas normalmente se evita dandole al borde superior del molde un pequeño radio.

Se deduce entonces que las dimensiones de un compacto al ser expulsado del molde, son mayores que las de éste. Esto debe tenerse en cuenta al calcular las dimensiones del molde. Descripción fenomenológica del proceso de compactación



Figura 1.12 Compactación de doble efecto

1.3.2 Diseño del Proceso de compactación

Como se dijo antes, la compactación de doble efecto es muy útil para conseguir una pieza mucho más homogénea. Este tipo de compactación se puede conseguir de diferentes formas que se describen a continuación:

La figura 1.12.a representa la compactación de doble efecto, que consiste en mover los dos punzones en forma simultánea, mientras que el molde permanece inmóvil. En la figura 1.12.b el molde se soporta sobre unos muelles, a medida que la presión del punzón superior aumenta, también lo hace la fuerza de fricción entre el polvo y las paredes del molde. Entonces se consigue que el molde se mueva hacia abajo sobre el punzón inferior, por lo tanto se consigue un efecto similar al primero. El caso presentado en la figura 1.12.c es similar al de la figura 1.12.b pero el movimiento del molde se controla externamente. La expulsión se consigue con un movimiento continuo del molde hacia abajo y el retiro del punzón superior.

El primer método expuesto es el más popular en la industria norteamericana, mientras que el segundo y tercero son más populares en Europa. La fabricación de este tipo de piezas cilíndricas, en general no ofrece ninguna dificultad. Pero existen otro tipo de limitaciones como el tamaño de la prensa a utilizar y su capacidad. Además la relación altura-diámetro se vé limitada por el efecto de la fricción con las paredes.

El diseño de piezas más complicadas requiere del uso de un mayor número de punzones y una labor de sincronización en sus movimientos bastante más compleja. La figura 1.13 muestra un método que se usa frecuentemente para la elaboración de bujes con un reborde. Si sólo se mueve el punzón de arriba, la diferencia de densidades entre el reborde y el resto de la pieza, es bastante elevada. El movimiento de los dos, permite uniformizar bastante el campo de densidades. Una limitante muy fuerte de esta técnica es el momento de la expulsión, ya que normalmente se realiza empujando la pieza desde abajo. Pero



Figura 1.13 Compactación y expulsión de un buje con reborde

la zona del reborde que se encuentra en contacto con el molde, debido a la fricción y contracción del molde se vé sometida a flexión. Esto limita el ancho del reborde én las piezas que se descan fabricar.



Figura 1.14 Adición de un punzón para la expulsión

La adición de un punzón en el momento de la expulsión (ver figura 1.14) elimina este problema [6].

Si adicionalmente se desea que la parte superior no sea plana, debe introducirse una etapa de transferencia del material como la ilustrada en la figura 1.15, que distribuye el material y luego puede procederse a la compactación simultánea.

En muchos casos la alimentación se realiza por la parte superior, desde donde se vierte el material al molde. Las características del llenado, dependen de la capacidad del polvo para fluir y naturalmente de la forma del molde. Es frecuente el uso de un vibrador sujeto a la prensa para mejorar la densidad inicial. Descripción fenomenológica del proceso de compactación



Figura 1.15 Transferencia y Compactación

Se utilizan diferentes métodos en el momento del llenado, como bajar el punzón inferior, llenar y luego se procede a subirlo nuevamente. Si se desea construir un buje de paredes muy delgadas, se baja el punzón inferior y el núcleo que definirá el hueco, se procede a llenar el molde y finalmente se sube nuevamente el núcleo.

1.3.3 Limitaciones en el Diseño

En el diseño de una pieza por el método de compactación en frío, se tienen varias limitantes que deben tenerse en cuenta. La capacidad de la prensa, los límites en la sección transversal y longitudinal son algunas de éstas. También la altura de la profundidad de llenado, el efecto de la fricción, etc. Algunas de estas limitantes se pueden superar con el uso de prensas más grandes, con el empleo de lubricantes o rediseñando algunas secciones. Pero existen cierto tipo de configuraciones que son virtualmente imposibles de construir (ver [9]). La figura 1.16 muestra algunas de ellas. Las características que son indeseables en una pieza se pueden agrupar en dos [9]: el primer grupo lo constituyen aquellas formas donde se rompe el flujo de material o el proceso de expulsión se torna imposible de la forma convencional. El segundo grupo lo forman aquellas piezas que requieren diseñar elementos muy delgados o débiles que pueden romperse durante la compactación.

En el primer grupo se encuentran piezas con agujeros en direcciones diferentes a la del movimiento de los punzones. Entradas y salidas agudas como las roscas de los tornillos que hacen imposible la expulsión de la manera convencional. Muchos de estos inconvenientes obligan a maquinar la pieza después del sinterizado. En el segundo grupo se encuentran piezas con agujeros o cambios de sección muy estrechos que obligarían a que el molde o el núcleo tuvieran secciones muy delgadas. Piezas con chafanes muy pequeños que obligarían a construir el punzón con pestañas muy delgadas. Finalmente se incluyen en este grupo cambios de sección súbitos o fuertemente asimétricos.



Figura 1.16 Formas no deseables y formas preferibles en el proceso de Compactación. (Tomada de la referencia [9]

CAPÍTULO 2

ESTADO DEL ARTE DE LOS MODELOS CONSTITUTIVOS DEL PULVIMATERIAL

El diseño de un proceso de compactación de polvos, requiere la correcta planificación de todas las etapas que intervienen en el mismo. En muchas de ellas, sólo se llega a una solución, después de pasar por un proceso iterativo largo y costoso. Por ejemplo, en el diseño de la geometría de la matriz y el montaje de los punzones, se deben tener en cuenta varios factores. Entre ellos, se encuentra el proceso de llenado, que debe llevarse a cabo de forma satisfactoria para evitar diferencias en las densidades iniciales de la pieza. Otro factor es la secuencia de movimientos de los punzones, que se debe elegir de tal forma, que durante la compactación no se produzcan zonas de grandes densidades, frente a zonas de bajas densidades, ya que esto llevaría a una generación de tensiones residuales, que luego durante la extracción o durante el sinterizado hacen que la pieza se distorsione o se fracture. Por otro lado, existen una serie de parámetros geométricos que el diseñador debe elegir, como son: las curvaturas de las esquinas, inclinación de las paredes, tamaño y localización de los agujeros, etc. Se pueden añadir otros como el espesor de las paredes tanto de la matriz como de los punzones. Todos éstos, deben ser elegidos cuidadosamente para evitar que la pieza o inclusive la matriz o los punzones se puedan deformar o fracturar durante la compactación.

Los indicados más arriba, son algunos de los problemas que el diseñador debe resolver durante la elaboración del proceso de compactación. Como se dijo antes, la forma convencional de encontrar los valores apropiados es por métodos de prueba y error, que implican un gran consumo de tiempo y dinero. En la actualidad se ha acumulado bastante información y experiencia que permiten al diseñador construir una gran variedad de geometrías sin ningún problema adicional. Pero para producir piezas más complejas y de mejor calidad, es necesario aumentar las presiones aplicadas y modificar el montaje de los punzones. Para resolver estos problemas se requiere una herramienta de diseño más eficiente que la convencional. Es aquí donde los modelos numéricos pueden hacer aportaciones relevantes, mediante la simulación del proceso por ordenador. Una simulación eficiente puede evitar muchos de los pasos de prueba y error que son imprescindibles en la metodología convencional. Durante los últimos años, han aparecido una serie de modelos que intentan llenar este vacío. Estos básicamente se pueden clasificar en dos: modelos microscópicos y modelos macroscópicos.

• En los modelos microscópicos, conocidos también como modelos directos [24][25][26], cada partícula se modela como una esfera (o pequeñas variaciones de ésta) y los movimientos de muchas de ellas se calculan considerando el contacto entre ellas. Estos modelos, están pensados para simular el comportamiento mecánico del material, pero es muy difícil mediante éstos, modelar situaciones reales complicadas como colapso de las partículas durante la densificación, la irregularidad de las formas o dislocaciones locales. Además los cálculos de modelización, requieren tiempos de ejecución muy grandes ya que se deben incluir muchas partículas en el análisis.

• En el segundo grupo de modelos, conocidos también como modelos continuos [10-23], se analiza el material en polvo que se desea compactar, mediante la mecánica de los medios continuos. El resultado es un conjunto de ecuaciones que permiten conocer la variación de la densidad y en general de todas las variables mecánicas involucradas, en función de la presión externa aplicada. Esta estrategia generalmente viene acompañada de una herramienta numérica que permite solucionar el sistema de ecuaciones y con la cual se espera poder suministrar la siguiente información:

- 1. La distribución de las densidades a lo largo de toda la geometría y su evolución durante la compactación
- 2. La cantidad de material que fluye de forma transversal durante la compactación
- 3. El valor de la tensión tangencial que se genera en el polvo a raiz del movimiento relativo de los punzones y del molde
- 4. La influencia de la fricción entre el material en polvo y las paredes del molde y los punzones
- 5. La magnitud de la presión requerida por el punzón (o punzones) para conseguir la densidad deseada
- 6. La magnitud de la deflexión del molde tanto axial, como radial, durante la compactación
- 7. Distribución de las tensiones residuales que permanecerán aún después de la liberación del compacto

El propósito de este capítulo es presentar los modelos constitutivos más destacados correspondientes al segundo grupo, que han sido formulados hasta la fecha. También se describirán algunas de las estrategias numéricas empleadas para este tipo de problemas.

2.2 CLASIFICACIÓN DE LOS DIFERENTES MODELOS CONS-TITUTIVOS

Una característica común de los modelos constitutivos propuestos hasta la fecha, ha sido el uso de la teoría de la plasticidad como elemento fundamental. Los primeros modelos se formularon como modificaciones de otros empleados para materiales porosos [15][17][19][31] o para materiales friccionales [18][10] [13][23]. Ha sido unánime la elección de la *densidad relativa* como la variable de endurecimiento, pero esto implica que fenómenos como la difusión y el deslizamiento de partículas no se tienen en cuenta o se consideran despreciables. Básicamente la diferencia entre los distintos modelos se concentra en la definición de la superficie de fluencia y su evolución a medida que la densidad aumenta. En general los modelos constitutivos son modificaciones del criterio de Von Mises, introduciendo el efecto de la componente hidrostática de la tensión.

Evolución de la superficie de fluencia

Desde el punto de vista de la evolución de la superficie de fluencia, se pueden definir dos grupos: (1) Aquellos que buscan que la superficie final degenere en la superficie de Von Mises [14][15][19], que normalmente están dirigidos a la compactación de materiales metálicos, ya que se espera que al final de la compactación, el producto resultante se comporte como tal. En general la superficie de fluencia, se define por medio de un elipsoide. (2) Los modelos de este grupo, buscan que la superficie final degenere en una superficie para materiales friccionales del estilo Mohr-Coulomb [10][17] [18]. Entre los modelos más simples de este tipo [18][10], se encuentran los que mantienen fija la forma de la superficie que define la resistencia a la compresión (superficie definida mediante múltiples superficies) y sólo varían su posición, dependiendo del aumento en la densidad, pero con la desventaja de que, si se utiliza una regla de flujo asociada, la deformación volumétrica no tiende a un valor límite, que es una característica importante en la compactación de cualquier tipo de material. Una variante de éstos [14][15], lo integran los modelos que modifican la forma de la superficie, de tal manera que solucionan el problema de la deformación volumétrica. Otra variante en los modelos descritos es la inclusión o no, del fenómeno de la dilatancia [10][11][14][15][18][23][30], que afirma que el volumen plástico aumenta dentro de un proceso de carga de corte. Estos modelos sitúan la superficie que envuelve el eje de presión hidrostática de tal forma que el vector de flujo normal a la superficie tiene una componente en la dirección en la que el volumen aumenta.

Superficie simple o definida a trozos (múltiples superficies)

Desde el punto de vista geométrico, las distintas superficies se pueden separar en dos grupos: el primero lo forman los llamados *cap model* [10][14][15][18] que definen la superficie a trozos y el segundo que definen la superficie mediante sólo una expresión, generalmente un elipsoide [11][17][19][23]. Los primeros son el resultado de la modificación de los modelos del tipo Mohr-Coulomb a los que se les añade una superficie del lado de la compresión, mediante la cual se controla la evolución en la resistencia y otra superficie del lado de la tracción. La segunda familia define la superficie en términos de un elipsoide, cuyos parámetros básicos son: la posición del centro, tamaño de los ejes, orientación, etc. La superficie puede aproximarse en un caso al cilindro de Von Mises, o a una superficie del tipo Mohr-Coulomb.

Parámetros del modelo y su determinación

Otro criterio que puede usarse para clasificar los diferentes modelos es por el número de parámetros requeridos para controlar la evolución de la superficie y la forma de determinarlos. En esta clasificación el espectro es bastante amplio. Desde modelos que se calibran sólo con la curva de compresibilidad del material [10][18] y otros tan complejos que requieren la determinación de bastantes parámetros [11]. Los modelos intermedios [15][19][23] se calibran básicamente con dos etapas de ensayos. En la primera etapa, la muestra se somete a un ensayo de compresión isostática. El resultado es una curva que relaciona la presión requerida contra la densidad. La siguiente etapa es una serie de ensayos triaxiales que consisten en someter las muestras a diferentes presiones de confinado y luego aplicar presión en la dirección axial manteniendo en forma simultánea la presión de confinado. El resultado de esta segunda etapa es una curva de tensión axial contra deformación axial. Esta segunda etapa se puede llevar a cabo de forma diferente [15], por ejemplo realizando la compresión axial pero impidiendo el desplazamiento en la dirección radial.

Diferentes descripciones cinemáticas

Una vez definido el modelo constitutivo, el siguiente paso es estudiar el esquema numérico con el cual se pueda solucionar el conjunto de ecuaciones que representan el proceso de la compactación. En lo que respecta a los modelos continuos, ha sido unánime el empleo del método de los elementos finitos para abordar el problema. Es generalizado el empleo de una formulación en grandes desplazamientos, ya que como es sabido, durante la compactación se producen grandes movimientos y grandes cambios de volumen. En algunos casos la formulación en grandes desplazamientos se acompaña con un esquema Lagrangiano Actualizado. Abouaf [68], Weber y Brown en [19] proponen el uso de la teoría de las grandes deformaciones plásticas que parte de la descomposición multiplicativa del tensor gradiente de la deformación y la integración de todas las variables internas en la configuración intermedia o relajada, todo esto dentro de un esquema lagrangiano total. Debido a las grandes deformaciones que pueden ocurrir, un esquema lagrangiano tiene el inconveniente de las grandes distorsiones de los elementos a medida que se avanza en la compactación. Para solucionar en parte este problema y el flujo alrededor de las esquinas en el molde, Brekelmans y sus colaboradores [11] proponen un esquema numérico euleriano básicamente en desplazamientos donde el remallado lo gobierna el mismo proceso como se verá más adelante y no por la distorsión, que en los esquemas lagrangianos obliga al proceso de remallado o malla adaptativa. Referente a la integración de la ecuación constitutiva Nakagawa y otros [15] reportaron que en el caso de compactación era necesario utilizar métodos de integración implícitos debido a que la variación de las tensiones es muy grande.

En las próximas dos secciones del capítulo se analizan con más detalle cada uno de los modelos constitutivos y las técnicas numéricas utilizadas hasta el momento presente.

2.3 DESCRIPCIÓN DE LOS DIFERENTES MODELOS

2.3.1 MODELOS A PARTIR DEL COMPORTAMIENTO DE LOS MATE-RIALES FRICCIONALES

Modificación de la superficie de Drucker-Prager

Trasorras, Krauss, Ferguson [18], proponen el uso de una superficie de fluencia definida mediante varias superficies. Este tipo de modelos fueron originalmente propuestos por DiMaggio y Sandler [30]. Cumplen con los postulados de la plasticidad y aproximan el comportamiento de una gran variedad de suelos granulares de forma bastante buena.

La superficie de fluencia resulta de la combinación de una superficie de Drucker-Prager denotada por:

$$\phi_1(I_1, \sqrt{J_2}) = 0 \tag{2.1}$$

(donde I_1 es el primer invariante de las tensiones y J_2 el segundo invariante del tensor desviador) y otra superficie que incorpora una ley de endurecimiento la cual se contrae o se expande mediante una función de endurecimiento K. La superficie viene dada por:

$$\phi_2(I_1, \sqrt{J_2}, K) = 0 \qquad (2.2)$$

DiMaggio definió el parámetro K directamente como la deformación volumétrica ϵ_v^p . La superficie $\phi_1 = 0$ corresponde al criterio de falla de Mohr-Coulomb que expresa que pueden ocurrir deslizamientos a lo largo de planos donde se ha alcanzado un valor máximo en la tensión de corte (valor que se supone aumenta con la presión). Se utiliza una regla de flujo asociada sobre ambas superficies. Obsérvese que el uso de una regla de flujo asociada sobre $\phi_1 = 0$ conduce al fenómeno de expansión por corte (dilatancia), esto significa que el volumen plástico aumenta durante un proceso de carga de corte.

La superficie $\phi_2 = 0$ permite describir la densificación cuando se tiene presión hidrostática. Del lado de las tracciones se define una superficie fija $I_1 < T$ que limita el valor de la tracción máxima. La figura 2.1 muestra la forma que adquiere la superficie de fluencia para un estado de tensiones dado.



Figura 2.1 Superficie de fluencia definida mediante múltiples superficies

La superficie $\phi_2 = 0$ viene definida básicamente por una elipse, cuyos ejes se definen en términos del parámetro de endurecimiento y vienen relacionados mediante un factor de forma. Una limitación de este modelo se encuentra cuando se tienen elevados niveles de compresión, ya que no se observa que la deformación volumétrica tienda a un valor límite. Esto es consecuencia del factor de forma de la elipse. Como se verá más adelante este factor no se puede suponer constante en el caso de polvos metálicos, sino que debe variar en términos de K en este caso. Pero en general se encuentran buenos resultados para materiales cerámicos.

Modificación de un modelo para hormigón celular

J. Bandstra, W. Otto, Massa[10], utilizan como modelo constitutivo, el modelo de Krieg para hormigón celular. Se utiliza a manera de primera aproximación para la simulación de metal en polvo. La superficie de fluencia en este modelo viene descrita mediante dos superficies. Una superficie de revolución cuyo eje coincide con el eje de presiones. La otra superficie es un plano perpendicular al eje hidrostático y que se mueve describiendo así el proceso de densificación. La superficie de revolución viene definida por el siguiente paraboloide:

$$\phi_s = J_2 - (a_0 + a_1 P + a_2 P^2) \tag{2.3}$$

donde J_2 es el segundo invariante del tensor de tensiones, P la presión, a_0, a_1, a_2 las constantes materiales. La segunda función se define como:

$$\phi_p = P - f \tag{2.4}$$

donde f depende de la traza de la deformación total. Un esquema de la superficie se puede ver en la figura 2.2.



Figura 2.2 Superficie de fluencia del modelo de Krieg

Cuando se alcanzan altas presiones se cae en el mismo problema descrito para el modelo anterior, ya que tampoco se consigue simular correctamente el hecho que la deformación volumétrica tiene un valor límite. J. Bandstra, W. Otto y Massa [10] afirman que los valores de las constantes materiales se pueden encontrar de ensayos triaxiales, pero que no se pueden determinar de forma única y por lo tanto utilizan unos valores promedio. La forma de la superficie se adapta bien a un material que para cada nivel de presiones se comporta como un material elástico perfectamente plástico, pero éste no es el caso con estos materiales. La determinación de la función f se realiza apartir del ensayo de compresión axial de una muestra. Debe tenerse en cuenta que normalmente la

curva resultante del ensayo, presenta la variación de la tensión axial respecto a la densidad, pero no el comportamiento de la presión directamente. Por lo tanto debe conocerse también la variación de la tensión radial respecto a la densidad.

Modelo para un polvo cerámico

W. Brekelmans, J. D. Janssen, y A. A. Van De Ven en [11] utilizan un modelo asociado donde la superficie de fluencia está definida en términos de los parámetros de un elipsoide. Este tipo de superficie fue utilizada por Park [32], para el comportamiento de un tipo de polvo cerámico, la representación matemática del criterio es la siguiente:

$$f(p,q,\rho^{p}) = F^{2}\left[p - \frac{D+C}{2}\right]^{2} + q^{2} - F^{2}\left[\frac{D-C}{2}\right]^{2} = 0$$
(2.5)

donde p es la presión hidrostática, que se supone positiva para compresión, y q la norma del desviador. La Cohesión es descrita por $C(\rho^p) \leq 0$, la densificación por $D(\rho^p) > 0$ y la razón entre los ejes de la elipse, que es una medida de la fricción interna, está dada por $F(\rho^p) > 0$. La figura 2.3 esquematiza dicha función.



Figura 2.3 Superficie de fluencia elíptica

Los parámetros vienen definidos por las siguientes expresiones:

$$C(\rho^{p}) = C_{1} + \gamma D(\rho^{p})$$

$$D(\rho^{p}) = D_{1} \left[\left(1 - \frac{\rho^{p}}{\rho_{max}^{p}} \right) - 1 \right]$$

$$F(\rho^{p}) = F_{1} + (F_{2} - F_{1}) \frac{\rho^{p} - \rho_{ini}^{p}}{\rho_{max}^{p} - \rho_{ini}^{p}}$$
(2.6)

Los parámetros elásticos se supone que también varían con la densidad. En total el modelo utiliza catorce parámetros que deben determinarse, dependiendo del tipo de material.

2.3.2 MODELOS A PARTIR DEL COMPORTAMIENTO DE LOS META-LES POROSOS

Krauss, Petrus y Ferguson en [14], proponen una modificación al modelo empleado en [18], que define la condición de fluencia por multiples superficies, de tal forma que se puedan modelar polvos metálicos, que en general son materiales dúctiles. También proponen modificar las propiedades elásticas del material como función de la densidad. La modificación en la superficie de fluencia, consistió en permitir que las superficies que describen el máximo cortante y la máxima tracción varien con la densificación (ver figura 2.4). Entonces se supone que:

$$f_1 = f_1(I_1, \sqrt{J_2})$$

$$f_2 = f_2(I_1, \sqrt{J_2}, \epsilon_v)$$

donde I_1 es el primer invariante de las tensiones, J_2 es el segundo invariante del tensor desviador y ϵ_v la deformación volumétrica. A medida que la presión aumenta las curvas f_1, f_2 se acercan a la superficie definida por el criterio de Von Mises.



Figura 2.4 Modificación al modelo de superficies multiples

Un punto importante que destacan los distintos autores, es el tener en cuenta la variación de las propiedades elásticas como función de la densidad, aunque esta variación no es tan importante durante la densificación, si puede volverse muy relevante en la etapa de la extracción, ya que el módulo elástico no será constante sino que dependerá de la densificación.

Variación del modelo de Shima y Oyade

T. Nakagawa y M. Sato[15], proponen utilizar modelos similares a los estudiados para metales porosos como el propuesto por Shima y Oyade en [31]. Este tipo de modelos son simples y faciles de calibrar. El criterio de fluencia se describe como:

$$F = \sqrt{2J_2 + \alpha \sigma_m^2} - \overline{\sigma} = 0 \tag{2.7}$$

donde J_2 es el segundo invariante del tensor desviador, σ_m es la presión y α , $\overline{\sigma}$ son parámetros que dependen del material y deben determinarse de forma experimental.

El parámetro α representa la dependencia de la superficie respecto al término de presión. Si α es cero entonces F se convierte en la superficie de Von-Mises. La superficie de fluencia expresada en la ecuación anterior tiene una forma de elipse como puede verse en la figura 2.5.



Figura 2.5 Superficie de fluencia del modelo de Shima y Oyade

La superficie está definida sólo en el caso de compresión, esto está sujeto a la hipótesis que este tipo de material tiene una muy baja resistencia a la tracción. El modelo se completa con el uso de una regla de flujo asociada. La evolución de la deformación plástica se expresa como:

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{p} = \dot{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}^{p} \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \dot{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}}^{p} \frac{3}{2\bar{\sigma}} (\operatorname{dev}[\boldsymbol{\sigma}] + \frac{2}{9} \alpha \sigma_{m} \boldsymbol{I})$$
(2.8)

donde $\dot{\overline{\epsilon}}^p$ es la deformación plástica equivalente dada por:

$$\dot{\tilde{\epsilon}}^{p} = \sqrt{\frac{2}{3}\dot{\epsilon}^{p}:\dot{\epsilon}^{p} + \frac{1}{\alpha}[\mathrm{tr}\ \dot{\epsilon}^{p}]^{2}}$$
(2.9)

Al igual que en el caso de endurecimiento, se supone que la superficie de fluencia crece isotrópicamente con la densidad relativa. Entonces esto implica que tanto α como $\overline{\sigma}$ son funciones de la densidad relativa.

32

La determinación de los parámetros del material, se consigue mediante la siguiente serie de experimentos: el primero es una compresión isostática en la cual el efecto de la fricción prácticamente se anula, y el segundo es la restricción del movimiento en la dirección radial y su compresión en la dirección axial, colocando una célula de carga que permite medir la tensión axial. En el primer caso al tensor de tensiones sólo contribuye el término de presiones y por la condición de fluencia se concluye que:

$$\overline{\sigma} = \sqrt{\alpha} \ \sigma_m = \sqrt{\alpha} \ |P| \tag{2.10}$$

En el segundo caso $\sigma_{11} = \sigma_{22} = P_r$, $\sigma_{33} = P_z$, además se supone que la deformación plástica ϵ_{33}^p es casi nula ya que en esta dirección el desplazamiento ha sido impedido y las deformaciones elásticas son nulas. Se concluye entonces que:

$$\alpha = 9 \frac{1 - |\frac{P_z}{P_r}|}{2 + |\frac{P_z}{P_r}|}$$
(2.11)

De la primera campaña de experimentos se obtiene la variación de la presión P y de la segunda, la variación de $P_z/P_r = m$, ambas respecto a la densidad relativa. Finalmente, mediante las relaciones escritas arriba, se obtienen expresiones para los parámetros α y $\bar{\sigma}$ que definen el material en polvo.

Modelo de G. Weber y S.B. Brown

El modelo constitutivo presentado por G. Weber y S.B. Brown [19] está basado en las siguientes dos hipótesis:

1. Se supone que el único mecanismo que incrementa la deformación permanente es la deformación plástica. Esto implica que se desprecia la existencia de otros mecanismos como el deslizamiento de los granos y la densificación por difusión de las componentes del material.

2. El efecto del reordenamiento de las partículas en la respuesta mecánica del material es función únicamente de la densidad relativa. Esto equivale a suponer que los efectos anisotrópicos, debidos a la orientación y tamaño de los granos es despreciable.

Por lo tanto el comportamiento del material en polvo es muy similar a un material isotrópico con alta porosidad. Sin embargo materiales en polvo con muy poca cohesión, no satisfacen las hipótesis anteriores y por lo tanto se debería formular un nuevo modelo para esos casos.

Se modelan en conjunto la matriz y el material en polvo. En ambos casos se emplea la teoría de la plasticidad. Se supone que la matriz se puede modelar mediante un material metálico que cumple el criterio de Von Mises con endurecimiento isotrópico. La ecuación constitutiva del material en polvo, está inmersa dentro de la teoría de las grandes deformaciones plásticas. En el tratamiento cinemático se supone entonces, la descomposición multiplicativa del tensor gradiente de la deformación. La evolución de las variables internas y el criterio de fluencia se formulan en la configuración intermedia. Se supone además, una relación hiperelástica entre las tensiones de Cauchy y las deformaciones elásticas. La función de fluencia para el material en polvo fue inicialmente propuesta por Kuhn y Downey en [33] y forma parte de la familia de funciones de fluencia expresadas mediante los parámetros de un elipsoide. La superficie viene definida por:

$$\phi(S, P, \eta) = S^{2} + b(\eta)P^{2} - c(\eta)s_{m}^{2}$$
(2.12)

S representa el tensor desviador de las tensiones, P el valor de la presión, s_m la función de endurecimiento y η la densidad relativa. Los parámetros vienen dados por:

$$b(\eta) = \frac{6(1-\eta^2)}{2+\eta_2} \qquad c(\eta) = \frac{3\eta^2}{2+\eta^2}$$
(2.13)

Esta selección de los parámetros fue determinada a partir de experimentos realizados sobre el polvo metálico MH-100. La ley de endurecimiento plástico se formula como:

$$s_m = s_o \left(2 - \exp\left[-\epsilon^p / \epsilon^o \right] \right) \tag{2.14}$$

para este material se tiene que $s_o = 51.3$ MPa y $\epsilon_o^p = 0.1237$. Esta ley de endurecimiento se determinó experimentalmente a partir de una muestra de polvo de hierro que se compactó isostáticamente y en caliente y luego se ensayó a compresión. A través de experimentos de compresión uniaxial se probó que las constantes elásticas del material dependían de la densidad relativa. Por lo tanto se formulan las siguientes relaciones:

$$E(\eta) = 1.0 \times 10^5 \exp(5.62\eta), \qquad \nu = 0.3 \tag{2.15}$$

Modelo para polvo de hierro

G. Coccoz, Bellet, Lécot, Ackermann y Häggblad [23], realizaron dos grupos de ensayos con el objeto de formular un modelo para un tipo de hierro en polvo. El primer grupo consistió en una serie de ensayos triaxiales convencional, donde se aplicó a la muestra una presión hidrostática o presión de confinamiento, que luego se mantuvo constante mientras se aumentó la carga en la dirección axial. El segundo grupo no convencional, consistió en disminuir la presión en la dirección radial, de tal forma que se aumentó el nivel del término desviador y disminuyó el término de presiones. Una de las principales conclusiones fue que tanto la densificación como la dilatancia pueden ocurrir en este tipo de material. Por lo tanto el modelo que se proponga, debe permitir que estos fenómenos ocurran. Simultáneamente G. Coccoz, y sus colaboradores propusieron modificar el modelo *Cam-clay* desarrollado en el ámbito de la mecánica de suelos. La densidad se elige como la variable de endurecimiento. La superficie de fluencia se describe mediante la superficie de un elipsoide cuyos ejes y centro varían en función de la densidad. La superficie viene gobernada por la siguiente ecuación:

$$F(p,q) = q^{2} + M^{2}(p-p_{o})(p-p_{1}) = 0$$
(2.16)

donde p es el término de presiones, q el segundo invariante del tensor desviador y donde M, p_o , p_1 vienen dados por:

$$M = \frac{dq_c}{dp_c} \qquad p_1 = p_c - q_c/M \qquad p_o = 2p_c - p_1 \qquad (2.17)$$

y donde el punto cumbre (p_c, q_c) de la elipse varía de la siguiente forma:

$$p_{c} = -\frac{1}{2} K_{p} \operatorname{Ln} \left[1 - \left(\frac{d}{d_{\max}} \right)^{A} \right] \qquad q_{c} = q_{\max} \tanh \left[\frac{M_{o} \ p_{c}}{q_{\max}} \right] \tag{2.18}$$

 d_{max} es la máxima densidad teórica, q_{max} la máxima tension de fluencia y K_p , A_1 , M_o son parámetros que identifican al material (ver figura 2.6).



Figura 2.6 Superficie de fluencia - Coccoz

Obsérvese que la densidad del material puede aumentar, tanto para cargas hidrostáticas como cargas desviadoras. El modelo *Cam-clay* se puede recuperar manteniendo $M = M_o$ constante y $p_1 = 0$. Se eligió una regla de flujo asociada, por lo tanto su dirección es normal a la superficie de fluencia. Entonces para $p < p_c$ el modelo predice dilatancia, mientras que para $p > p_c$ se produce densificación. El modelo se completó permitiendo que tanto el módulo de Young y el coeficiente de Poisson dependieran de la densidad.

Modelo de Abouaf para presión isostática en caliente

El modelo de Abouaf [68], considera en forma desacoplada el fenómeno de difusión de calor a través del sólido y el comportamiento mecánico macroscópico que simula el fenómeno de compactación-siterizado. Una de las variables básicas es la densidad relativa, que es el cociente entre la densidad aparente y la densidad de la parte sólida del material, cuya evolución depende del proceso plástico y representa la repartición de materia y poros.

El material que se modeliza es un medio poroso, compuesto de partículas que se tratan aquí como un medio continuo. Los mecanismos que producen deformación macroscópica se resumen en dos: (1) reversibles (termoelásticos), (2) irreversibles, que simulan el flujo de partículas y el sinterizado. El comportamiento cinemático se trata mediante la descomposición multiplicativa del tensor gradiente de la deformación, empleando cuatro configuraciones, la configuración de referencia, donde se supone que las tensiones y deformaciones son nulas. La configuración actual, que corresponde al tiempo t, la configuración intermedia que se obtiene mediante una descarga elástica de la vecindad de cada partícula, y por último la configuración rotada (necesaria para sistemas anisótropos). Las variables de estado termodinámicas son: el tensor de deformaciones de Green-Lagrange, la temperatura, la densidad relativa y la rotación del triedro director (anisotropía). Se considera aquí que el proceso de compactación es prácticamente inelástico, entonces se supone que las deformaciones elásticas son muy pequeñas comparadas con las deformaciones plásticas. La ecuación constitutiva se expresa mediante un modelo hiperelástico, donde la función de energía libre depende de las deformaciones elásticas, de la temperatura, y de las variables internas, que en este caso se reducen a la densidad relativa. La superficie de fluencia que se define, sirve tanto para procesos de compactación en frío como en caliente, ya que el efecto de la temperatura se tiene en cuenta en la ley constitutiva hiperelástica. Además debido al desacoplamiento entre el fenómeno de conductividad térmico y el problema mecánico, se resuelve primero el problema térmico hasta que se alcanza un estado de equilibrio, y luego se resuelve el problema mecánico. La definición de la superficie viene dada como una modificación del criterio de Von Mises. La superficie viene definida como:

$$ar{\sigma}^2 = 3a_1(\eta)J_2 + a_2(\eta)I_1^2$$

donde I_1, J_2 corresponden al primer invariante de las tensiones y al segundo invariante del desviador, respectivamente. η es la densidad relativa, a_1, a_2 controlan el crecimiento de la superficie en función de la densidad. $\bar{\sigma}$ representa la máxima tensión de fluencia. La figura 2.7 muestra la evolución de la superficie de fluencia en un caso típico. Obsérvese como el eje central de la elipse se desplaza hacia el origen del sistema de coordenadas. También se puede apreciar el comportamiento de los parámetros a_1, a_2 respecto a la densidad relativa.



Figura 2.7 Superficie de fluencia - modelo de Abouaf

2.3.3 MODELO PARA LA EXTRACCIÓN DEL COMPACTO

Es sabido que durante la parte final de la compactación, la presión requerida para aumentar la densidad de forma significativa es cada vez mayor. Como destacan Ferguson y Krauss en [12], este elevado aumento en la presión conlleva ciertos problemas que se describen a continuación:

- a. Las tensiones sobre la matriz son muy altas, con apreciables deflexiones asociadas
- b. La recuperación elástica es mayor
- c. Aumento en la deformación del polvo y un mayor trabajo en frío
- d. Incremento en la sensibilidad al movimiento (secuencia) de los punzones, que lleva a una frecuente fractura de las piezas durante la compactación
- e. Serias dificultades en el momento de realizar la extraccción de la pieza

El resultado al final es que se produce un incremento en la frecuencia de fracturas de las piezas en verde. German [14] propone las siguientes relaciones empíricas que permiten obtener algunas conclusiones acerca del problema anterior:

$$\sigma_g = k_1 \rho^m$$

$$\sigma_g = k_2 P$$

$$\sigma_{\text{extrac}} = G \mu Z \frac{H}{D} \left[1 + 1.27 \mu Z \frac{H}{D} \right]$$

donde σ_g resistencia máxima del material en verde, ρ es la densidad relativa, m exponente mayor que uno, P es la presión aplicada, Z es el cociente entre la tension axial y la tensión radial, $\frac{H}{D}$ es el factor de forma, y donde k_1 , k_2 , Gson constantes.

La primera ecuación afirma que la resistencia del material aumenta a medida que la densidad aumenta. La segunda indica que la resistencia crece porporcionálmente con la presión aplicada. En realidad esta aproximación vale sólo en un rango de presiones, ya que al final del proceso se puede apreciar que el beneficio en resistencia debido a las altas presiones se reduce notoriamente [12]. De la última ecuación se concluye que la tensión de extracción crece cuando aumenta la fricción (o sea cuando existe mala lubricación), también cuando aumenta el factor de forma, ya que la superficie expuesta a la fricción con la matriz aumenta. Pero también aumenta con la presión aplicada, esto debido al término Z. De la combinación de las dos últimas ecuaciones se concluye que existe un valor de la presión aplicada P, para la cual la tensión máxima de extracción coincide con la resistencia máxima del material. Este valor da una primera aproximación de la presión de fallo.

2.4 FORMULACIÓN DEL PROBLEMA GLOBAL

Existe una gran coincidencia entre los diferentes investigadores, en que durante el proceso de compactación, se pueden generar grandes movimientos de material, que se reflejan en grandes desplazamientos y grandes deformaciones. La manera de considerarlos, da lugar a diferentes esquemas numéricos.

Descripción material

Consiste en definir las variables básicas y en general, las ecuaciones que describen el modelo, en términos de las coordenadas materiales (coordenadas lagrangianas). Por ejemplo, la evolución de las tensiones o los cambios en la resistencia del material se formulan más fácilmente cuando se piensa en términos de la evolución de las propiedades para una partícula material. Por esta razón la elección de este tipo de coordenadas permiten en general, la formulación de las ecuaciones constitutivas de forma natural. Abouaf [68], G. Weber y S.B. Brown [19] y D. T. Gethin [13] entre otros formulan el modelo en este tipo de coordenadas.

Existen diferentes estrategias para abordar el problema que se genera a partir de los grandes desplazamientos y deformaciones. Una de ellas es la utilización directa del modelo que se formula para pequeños desplazamientos y deformaciones pero modificando periódicamente la configuración de referencia. Otra técnica, más compleja, pero bastante más precisa, se basa en la teoría de las grandes deformaciones plásticas que supone válida la descomposición multiplicativa del tensor gradiente de la deformación en una componente plástica y una elástica. Se supone además la existencia de una configuración intermedia o relajada que se define a partir de una descarga elástica. Esta hipótesis es una generalización de la descomposición aditiva válida en el caso de pequeñas deformaciones. La integración de la ecuaciones de evolución se realiza en la configuración intermedia que esta libre de deformaciones elásticas.

Descripción espacial

W. A. M. Brekelmans, J. D. Janssen y A. A. F. Van de Ven en [11] proponen una formulación espacial para el problema global básicamente en desplazamientos. La razón dada por los autores es que se puede simular mejor el flujo alrededor de las esquinas de la matriz. Se describen a continuación algunos de los detalles más importantes que se deben tener en cuenta respecto a otras técnicas usadas de forma estandar.

Se supone inicialmente, que el volumen total V_t se conoce para cualquier instante de tiempo y que el tensor de tensiones de Cauchy σ , sólo depende del tensor gradiente de la deformación y de su historia. (se anulan efectos térmicos y viscosos). Se supone también que el proceso se puede llevar a cabo de forma incremental, de tal forma que partiendo de un estado conocido au el objetivo es encontrar el valor de todas las variables del modelo en el instante $\tau + \Delta t$ de tal forma que satisfagan: la ecuación de equilibrio, la ecuación constitutiva y las respectivas condiciones de contorno en este instante. Se supone que todas las cantidades físicas son función del tiempo τ y de la posición espacial x. La malla de elementos finitos en el caso euleriano, no cambia, pero aquí, el volumen V se reduce cuando pasa de V_{τ} a $V_{\tau+\Delta t}$ entonces es conveniente modificarla. Esto se puede realizar, escalando la geometría o eliminando elementos. Una de las diferencias más importantes con el caso lagrangiano se encuentra en la integración de la ecuación constitutiva. Esto es debido a que en general, la evolución de las variables internas que expresan alguna propiedad física, se formulan de manera natural en coordenadas materiales. Para actualizar el valor de una variable interna en un punto de la nueva malla (la malla de $V_{\tau+\Delta t}$) se necesita conocer el valor que tenía la variable interna en el instante au pero manteniendo constante el punto material. La dificultad está en que este punto material se encuentra en la malla V_{τ} en la posición x - u(x, t). Para conocer el valor de la variable interna en este punto se debe conocer primero el elemento de la malla V_{τ} que lo contiene, y luego interpolar mediante el valor en los nodos

de este elemento. El algoritmo de búsqueda, en general, puede se costoso. Brekelmans y sus colaboradores [11], proponen una forma de aproximar este valor mediante una expansión de Taylor y de esta manera evitar el algoritmo de busqueda. Finalizado el problema de la integración de la ecuación constitutiva, se procede de forma estandar, integrando numéricamente el vector de fuerzas internas, externas y la matriz de rigidez tangente.

2.5 CONSIDERACIONES FINALES

Se han estudiado en este capítulo, diferentes modelos constitutivos que pretenden simular el comportamiento del pulvimaterial durante el proceso de compactación. Dichos modelos se formulan a partir del comportamiento de los materiales friccionales (sección 2.3.1) o del comportamiento de los metales porosos (sección 2.3.2). En esta tesis son de interés los modelos constitutivos que permitan simular la compactación de polvos metálicos que conduzcan a un modelo numérico sencillo y que a su vez permitan realizar cálculos a gran escala. Por esta razón, el modelo numérico que se formula en esta tesis tiene como punto de partida los modelos constitutivos propuestos por Abouaf [68], Weber y Brown [19], Coccoz [23] entre otros. Donde la superficie de fluencia se define mediante una sola superficie que tiene forma elíptica. En particular se utilizará una superficie elíptica que al final del proceso de compactación degenera en el cilindro de Von Mises. La superficie se define mediante dos parámetros (los radios de la elipse) que dependen exclusivamente de la densidad relativa. La calibración de los dos parámetros se puede llevar a cabo mediante dos grupos de ensayos experimentales: (1) compactación isostática y (2) compactación uniaxial o ensayo triaxial.

En concordancia con [19][68][13], el modelo numérico se formulará empleando una descripción material y haciendo uso de la teoría de las grandes deformaciones plásticas, adicionando algunas hipótesis simplificadoras. Respecto al problema de contorno (problema entre el pulvimaterial y la matriz) en la literatura disponible no se hace ninguna referencia particular a los modelos numéricos empleados en el caso de la compactación de pulvimaterial, entonces este tema se desarrollará en el capítulo 3, con bastante profundidad.

40

CAPÍTULO 3

FORMULACIÓN MATEMÁTICA DEL MODELO PROPUESTO PARA LA COM-PACTACIÓN DE PULVIMETALES

3.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se describe el modelo matemático propuesto, para la simulación numérica del proceso de compactación uniaxial de pulvimetales. El modelo está inmerso en la teoría de las grandes deformaciones plásticas y se restringe al proceso puramente mecánico, o sea a procesos termodinámicos térmicamente estables. Se incluye además, el problema de contorno que existe entre las paredes del molde y el material en polvo.

En la sección 3.2 se describen las variables básicas que intervienen en el modelo y su interpretación física, también se hace un análisis de sus alcances y limitaciones.

En la sección 3.3 se formulan las ecuaciones básicas necesarias para la simulación numérica del proceso. La descripción cinemática se basa en la descomposición multiplicativa del tensor gradiente de la deformación. Se hace uso de los operadores pull back ϕ^* y push forward ϕ_* definidos en [35] para transformar tensores de las configuraciones espacial a la material y viceversa. La respuesta elástica del material se obtiene de un modelo hiperelástico, que permite calcular las tensiones en la configuración espacial en forma cerrada, sin tener que recurrir a una integración numérica de la ecuación diferencial que gobierna el problema. La condición de fluencia depende del primero y segundo invariante del tensor de tensiones y además de la densidad relativa. En general la superficie de fluencia tiene forma de elipsoide. Su tamaño y forma se modifican mediante dos parámetros que dependen de la densidad relativa. Se analizan dos reglas de flujo plástico, una asociada y otra no asociada que conducen a una integración cerrada de la ecuación constitutiva. La ecuación de continuidad se utiliza en su forma material y la ecuación de equilibrio se verificará en la misma configuración. La sección finaliza con la descripción de la integración de la ecuación constitutiva que se lleva a cabo de forma similar a la empleada en los problemas de la plasticidad clásica.

La sección 3.4 describe el problema de contacto entre el material que se desea compactar y las paredes del molde. El problema general se formula como una minimización sobre un conjunto de desplazamientos sometidos a las restricciones impuestas por las paredes del molde. Esta formulación de contacto unilateral forma parte de una teoría más general que se emplea para simular el contacto entre un cuerpo deformable y un cuerpo rígido (contacto generalizado). Para la solución del problema, se estudian tres métodos de la teoría de optimización conocidos como: *penalización, multiplicadores de Lagrange y Lagrangiano Aumentado*.

El método de penalización consiste básicamente en eliminar la restricción impuesta por el molde, y a cambio, aplicar unas fuerzas normales, proporcionales a la mínima distancia entre los puntos de la frontera del cuerpo y las paredes del molde. De esta forma se penaliza mediante la constante de porporcionalidad cualquier posible violación de la restricción. El método de multiplicadores de Lagrange introduce una nueva incognita, en este caso las fuerzas normales acompañadas de ciertas restricciones para que el problema quede bien definido. Esta nueva formulación conduce a la busqueda de un punto de silla del lagrangiano asociado al problema. En principio el sistema de ecuaciones aumenta, pero aquí se propone un algoritmo que permite implementar el método, evitando este inconveniente. El método del Lagrangiano Aumentado enlaza las dos técnicas anteriores, de tal forma que la fuerza normal es la combinación de dos términos. Uno es el multiplicador de Lagrange, y el otro proveniente de la penalización.

La sección 3.5 contiene una descripción del modelo de fricción empleado en este trabajo. Es un modelo del tipo Coulomb y se formula de acuerdo a la teoría de la plasticidad. En este caso la condición de fluencia se reemplaza por una condición de fricción, que también se conoce como condición de deslizamiento. La regla de flujo se interpreta ahora como una dirección de deslizamiento.

De forma similar al caso de contacto, se estudian aquí, las técnicas de penalización, multiplicadores de Lagrange y Lagrangiano Aumentado para su posible solución. El método de penalización se formula de forma directa al realizar la integración numérica de la ecuación constitutiva mediante las técnicas empleadas en plasticidad para el caso unidimensional. En el caso de multiplicadores de Lagrange, se propone aquí un algoritmo que permite imponer la condición de deslizamiento de forma exacta. Se describe también la extensión del método del lagrangiano aumentado al problema de fricción propuesta por Simo en [39].

42

3.2 ELEMENTOS BÁSICOS DEL MODELO DE COMPACTACIÓN

El modelo numérico que se describe a continuación está inmerso dentro de la teoría de la plasticidad con grandes deformaciones plásticas. Se formula desde el punto de vista de la mecánica de sólidos para capturar los aspectos más relevantes del proceso de compactación como son: la evolución de la densidad, crecimiento de la resistencia del material, perdida de vacíos, aumento de la deformación elástica, fricción entre partículas, etc. Las variables básicas en el modelo son: la densidad relativa, la deformación total, la deformación plástica y el estado tensional.

Densidad relativa

La densidad relativa η , se define como el cociente entre la densidad aparente y la densidad de la parte sólida que no incluye vacíos. Este valor final, generalmente es la densidad teórica que se espera obtener al final de la compactación. La relación se puede escribir más precisamente con base en los siguentes términos:

$$\begin{split} m &:= \text{masa total}, \quad v := \text{volumen total}, \\ v_s &:= \text{volumen de la parte sólida}, \quad v_v := \text{volumen de vacios} \\ v &= v_s + v_v \\ \rho_t &= \frac{m}{v} \quad (\text{densidad aparente}) \\ \rho_s &= \frac{m}{v_s} \quad (\text{densidad de la parte sólida}) \\ \eta_t &= \frac{\rho_t}{\rho_s} \quad (\text{densidad relativa}) \end{split}$$

La densidad inicial ρ_o , coincide con la densidad inicial aparente definida en el capítulo 1, que incluye los vacíos y los posibles poros del material en polvo. Se podría tomar también como densidad inicial, la que se obtiene después de someter a la matriz a la etapa de vibración que se utiliza en algunos casos para redistribuir el material. La densidad relativa en este modelo, representa el endurecimiento del material. Su distribución dentro del molde es una medida de la calidad del proceso de compactación. Esta variable se calcula directamente de una expresión derivada de la ecuación de continuidad, que se formula en la configuración material.

۳.

Deformación plástica y elástica

Durante los primeros pasos del proceso de compactación, el movimiento de los punzones y de la matriz producen una disminución global en el volumen. Estos movimientos producen deformaciones que en su mayor parte, son irreversibles. Este fenómeno macroscópico proviene de la combinación de dos fenómenos a nivel microscópico, como se explicó en el capítulo 1. El primero, es la gran pérdida de vacíos y el segundo involucra directamente a las partículas, ya que aumentan sus puntos de contacto y se producen las primeras deformaciones elásticas en estas zonas. A medida que la presión aumenta, los puntos de contacto se convierten en puntos de contacto permanente. En este instante, comienza el desarrollo de deformación plástica a nivel de partículas, para los materiales dúctiles y el inicio de la etapa de fragmentación para los materiales frágiles. Al final, las fronteras entre las partículas desaparecen, el crecimiento de las deformaciones irreversibles disminuye, y el crecimiento de las deformaciones elásticas se vuelve más importante. El tensor de las deformaciones plásticas empleado en el modelo, incluye los dos efectos, las pérdidas de vacíos y las deformaciones plásticas o fragmentación de las partículas en las zonas de contacto. El tensor de las deformaciones elásticas, considera básicamente las deformaciones elásticas de las partículas, que se incrementan más rápidamente al final del proceso. Se supone en general que la norma de este tensor es pequeña comparada con la norma del tensor plástico.

Tensor de tensiones

El tensor de tesiones se interpreta como la respuesta constitutiva del material debido a las deformaciones elásticas. Su evolución durante el proceso de compactación es una medida del aumento de la resistencia del material a medida que aumenta la presión externa que produce un trabajo en frío sobre éste. El conocimiento de esta variable permite: a) predecir el valor de la presión externa que se requiere para alcanzar un valor dado en la densidad relativa, b) conocer que parte de la presión de entrada se transmite realmente al material y c) conocer cuanto se pierde debido a la fricción con las paredes. Al final del proceso, cuando se elimina la presión externa después de la extracción, las tensiones se interpretan como tensiones residuales o remanentes.

El papel de la teoría de la plasticidad en el modelo

El uso de la teoría de las grandes deformaciones plásticas permite calcular muy precisamente los grandes movimientos debidos a las pérdidas de vacíos y deformación de las partículas que ocurren al inicio de la compactación que, como se dijo antes, son irreversibles. La teoría se basa en la descomposición multiplicativa del tensor gradiente de la deformación, en un tensor elástico y uno plástico. La componente plástica registra la perdida de vacíos y la deformación irreversible de las partículas.

La condición de fluencia, al igual que en plasticidad clásica, separa aquí los estados incrementalmente elásticos de los estados incrementalmente elastoplásticos. La condición de fluencia, define una superficie que al inicio del proceso de compactación (material en polvo), es un punto. Esto es debido a que durante esta etapa, el estado elástico es nulo o en otras palabras, el material tiene resistencia nula. A medida que la presión aumenta, como se dijo antes, la resistencia aumenta, por lo tanto la superficie crece. Este crecimiento se controla mediante dos parámetros que dependen de la densidad relativa. En las primeras etapas del proceso de compactación, el material se caracteriza por su limitada capacidad de soportar corte, por lo tanto su estado de tensiones es casi hidrostático, pero a medida que se comprime aumenta la capacidad para resistir el cortante debido al aumento en la fricción interna. Por esta razón se incluyen el primer invariante de las tensiones además del segundo invariante del desviador en la condición de fluencia. El efecto de la fricción interna entre las partículas es muy importante durante las primeras etapas de la compactación. Pero a medida que la presión aumenta, el contacto entre las partículas es casi permante y el material se comienza a comportar como un material sólido, en este caso como un metal. Por esta razón se afecta el primer invariante por un parámetro que a medida que la densidad aumenta, gradualmente lo elimina de la condición de fluencia, permitiendo así, recobrar la superficie de fluencia de Huber-von Mises, clásica de un material metálico ([40]).

La evolución de la deformación plástica viene dada por la ecuación de flujo. La dirección del flujo viene afectada por el tipo de material. De un lado, se podría suponer que todas las partículas de material son bastante homogénas y una dirección de flujo normal a la superficie [13](regla de flujo asociada) sería conveniente. Por otro lado si esto no se cumple, debe pensarse en una regla de flujo no asociada.

Limitaciones del modelo

Se enumeran a continuación algunas de las limitaciones del modelo numérico. La etapa de llenado del molde es una parte importante en el proceso de compactación. Un buen llenado garantiza una densidad aparente inicial elevada y homogénea, pero esto puede cambiar si se modifican parámetros como

la forma y tamaño del material en polvo, la geometría del molde, velocidad de llenado, etc. Esta etapa preliminar no se ha incluido en el presente trabajo. La densidad relativa es la única variable de endurecimiento y sólo registra el efecto del reordenamiento de las partículas en el molde, pero los efectos anisótropos como la forma y el tamaño del grano no se tienen en cuenta o se suponen despreciables. De no serlo, se requeriría entonces la adición de nuevas variables internas tensoriales, que registren esta anisotropía. Respecto a la superficie de fluencia, ésta crece indefinidamente del lado de las tracciones, pero esto no corresponde con la realidad física, por lo tanto en el caso en que se produjeran tracciones importantes durante el proceso de compactación, sería necesario incluir un criterio de falla por tracción. Aunque todavía existen discrepancias entre los diferentes investigadores, el fenómeno de dilatancia podría incluirse dentro del modelo. Como se explicó en el capítulo 1, la lubricación atenúa el efecto de la fricción con las paredes pero tiene algunas desventajas dependiendo de como se suministre el lubricante. Estas variaciones en el proceso debidas al lubricante no se estudian aquí. Sólo se analiza el efecto que tiene de forma indirecta, estudiando la variación en la distribución de las densidades para diferentes valores del coeficiente de fricción. El modelo no tiene en cuenta fenómenos dependientes del tiempo, por lo tanto es insensible a la velocidad de carga.

3.3 MODELO CONSTITUTIVO

3.3.1 Cinemática

Se describen a continuación algunas de las características principales de la cinemática de grandes deformaciones que se requieren para la formulación del modelo de compactación. Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ (N = 2,3) abierto y acotado que representa al material que se desea compactar. Se supondrá de aquí en adelante que Ω define la configuración de referencia del cuerpo. Sea [0,T] el intervalo de tiempo de interés. Aquí la variable t, se debe interpretar como un parámetro que se incrementa de forma monótona, e indica el nivel de progreso en el proceso de deformación.

Denótese por $\varphi : \Omega \times [0,T] \to \mathbb{R}^N$ la aplicación que describe el movimiento del cuerpo Ω . Sea $X \in \Omega$ una partícula del cuerpo, entonces $x = \varphi(X,t)$ denotará la posición de la partícula en el instante $t \in [0,T]$. Se considerará además que el conjunto:

$$oldsymbol{arphi}_t(oldsymbol{\Omega}) = \{ x \mid x = oldsymbol{arphi}(X,t) \quad ext{donde} \quad X \in oldsymbol{\Omega} \}$$
 (3.3.1)

define la configuración actual del cuerpo. Sea $F = \partial \varphi / \partial X$ el tensor gradiente de la deformación. Se define U(X, t), campo de desplazamientos, como:

$$\varphi(X,t) = X + U(X,t)$$

46

entonces el tensor gradiente de la deformación se puede escribir como:

$$F(X,t) = I + \text{GRAD } U(X,t)$$

donde GRAD U denota el gradiente de los desplazamientos en la configuración de referencia.

Como se explicó en la sección 3.2, durante el proceso de compactación se producen deformaciones elásticas y, en su mayor parte, deformaciones irreversibles. Por lo tanto el modelo debe ser capaz de considerarlas. Para cumplir este objetivo se supondrá válida la descomposición multiplicativa del tensor F, introducida por Kröner en [42] y desarrollada por Lee y Liu [46], Fox [43], Lee [44], Mandel [45] y otros.

Esta descomposición supone lo siguiente:

Dado $t \in [0, T]$ entonces para cada $x = \varphi(X, t)$ existe una vecindad del punto x contenida en $\Omega_t = \varphi_t(\Omega)$ (ver figura 3.1) para la cual es válida la siguiente descomposición:

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X},t) = \boldsymbol{F}^{\boldsymbol{e}}(\boldsymbol{X},t)\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{X},t) \tag{3.3.2}$$

El tensor F^e corresponde a la parte elástica y el tensor F^p a la parte plástica.



Figura 3.1 Descomposición Multiplicativa

• Observación 3.1

El tensor elástico \mathbf{F}^e se obtiene realizando una descarga elástica de la vecindad del punto \mathbf{x} mencionada anteriormente. Esta descarga elástica genera una nueva vecindad que junto a las otras generadas por el resto de puntos, conforman lo que se llamará configuración intermedia $\overline{\Omega}$ (ver figura 3.1). Se puede pensar en el tensor \mathbf{F}^e como el gradiente de la deformación local, que relaciona vecindades entre las configuraciones intermedia y actual o deformada. Pero lo que no es válido, en general, es suponer que \mathbf{F}^e es el gradiente de la deformación de alguna función $\boldsymbol{\psi}$ que representaría un movimiento entre las anteriores configuraciones [40]

Se definen ahora los siguientes tensores en la configuración de referencia:

$$C(\boldsymbol{X},t) = \boldsymbol{F}^{T}(\boldsymbol{X},t) \cdot \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X},t)$$

$$C^{p}(\boldsymbol{X},t) = \boldsymbol{F}^{p^{T}}(\boldsymbol{X},t) \cdot \boldsymbol{F}^{p}(\boldsymbol{X},t)$$

$$E(\boldsymbol{X},t) = \frac{1}{2}(C(\boldsymbol{X},t) - \boldsymbol{G}(\boldsymbol{X}))$$

$$E^{p}(\boldsymbol{X},t) = \frac{1}{2}(C^{p}(\boldsymbol{X},t) - \boldsymbol{G}(\boldsymbol{X}))$$
(3.3.3)

donde C es el tensor de Cauchy-Green a la derecha y E el tensor de deformaciones de Green-Lagrange. El tensor G se define como el tensor métrico en la configuración de referencia, cuyas componentes vienen dadas por:

$$G_{ij} = \langle E_i, E_j \rangle$$
 $i, j: 1..N$

donde los vectores $\{E_i\}$ definen un sistema de coordenadas en \mathbb{R}^N y \langle , \rangle denota su correspondiente producto escalar. Hasta que no se diga otra cosa, se supondrá que $\{E_i\}$ coincide con la base canónica de \mathbb{R}^N por lo tanto G se convierte en la identidad (G = 1). De forma similar al caso lagrangiano se define el tensor métrico g en la configuración actual como:

$$g_{ij} = \langle e_i, e_j \rangle$$

donde $\{e_i\}$ define un sistema de coordenadas en la configuración actual Ω_t . Se supondrá por ahora que $\{e_i\}$ coincide con la base canónica y por lo tanto g = 1 en la configuración deformada.

Se definen a continuación los siguientes tensores en la configuración actual:

$$b(x,t) = F(\varphi^{-1}(x,t),t) \cdot G^{-1} \cdot F^{T}(\varphi^{-1}(x,t),t) = F \cdot G^{-1} \cdot F^{T}$$

$$b^{e}(x,t) = F^{e}(\varphi^{-1}(x,t),t) \cdot G^{-1} \cdot F^{e^{T}}(\varphi^{-1}(x,t),t) = F^{e} \cdot G^{-1} \cdot F^{e^{T}}$$

$$e(x,t) = \frac{1}{2}(g(x) - b^{-1}(x,t))$$

$$e^{e}(x,t) = \frac{1}{2}(g(x) - b^{e^{-1}}(x,t))$$

$$e^{p}(x,t) = \frac{1}{2}(b^{e^{-1}}(x,t) - b^{-1}(x,t))$$
(3.3.4)

Los tensores b y b^e se conocen como tensores de Cauchy-Green a la izquierda, total y elástico respectivamente. El tensor e se conoce como el tensor de deformaciones de Almansi y los tensores e^e , e^p corresponden a sus componentes elástica y plástica, respectivamente.

3.3.2 Formulación de las ecuaciones constitutivas

Se describen a continuación las ecuaciones básicas de la teoría de la plasticidad, que permiten modelar el comportamiento del material que se desea compactar. Varias de estas ecuaciones se formulan inicialmente en la configuración intermedia, ya que es en ésta donde tienen su significado físico.

• Respuesta elástica

En concordancia con la hipótesis de Mandel y otros [40], se supone aquí, que el estado local termodinámico se determina mediante las variables $\overline{E}^e, \overline{Q}, T$. El tensor \overline{E}^e corresponde al tensor de deformación elástico escrito en la configuración intermedia, la variable \overline{Q} denota el vector de variables internas que completan la definición de modelo y T denota la temperatura.

La densidad de energía libre se define entonces como [40]:

$$\psi = \overline{\psi}(\overline{E}^e, \overline{Q}, T) \tag{3.3.5.a}$$

restringiéndose al caso puramente mecánico se puede suponer que:

$$\psi = \overline{\psi}(\overline{E}^e, \overline{Q})$$
 (3.3.5.b)

reemplazando la ecuación $E^e = F^{pt} \cdot \overline{E}^e \cdot F^p$ en (3.3.5), se puede definir la función de energía libre en la configuración de referencia como:

$$\Psi = \Psi(\boldsymbol{E}^{e}, \boldsymbol{Q}) \tag{3.3.5.c}$$

Se supone además, una respuesta hiperelástica del material, entonces el segundo tensor de tensiones de Piola Kirchhoff S viene dado por [40][37]:

$$S = \rho_o \frac{\partial \Psi}{\partial E^e} \tag{3.3.6.a}$$

dicha hipótesis equivale a suponer que el tensor de tensiones de Kirchhoff τ , viene dado por la siguiente expresión:

$$au =
ho_o rac{\partial ilde{\psi}}{\partial e^e}(e^e, q)$$
 (3.3.6.b)

donde $\tilde{\psi}$ representa la función de energía libre en la configuración deformada. Los tensores de tensiones S y τ se relacionan entonces mediante la siguiente ecuación:

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{\phi}^*(\boldsymbol{\tau}) = \boldsymbol{F}^{-1} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{F}^{-T}$$
(3.3.7)

donde $\phi^*(\tau)$ se refiere al *pull back* de τ (ver anexo A4). Se supone válida la hipótesis de *elasticidad desacoplada* [40], que permite expresar la energía libre como:

$$\overline{\psi}(\overline{E}^e, \overline{Q}) = \overline{\psi}^e(\overline{E}^e) + \overline{\psi}^p(\overline{Q})$$
(3.3.8.a)

de forma equivalente, esta descomposición se puede escribir en la configuración deformada como:

$$\psi(e^{e},q) = \psi^{e}(e-e^{p}) + \psi^{p}(q)$$
 (3.3.8.b)

En el modelo que se estudia aquí, la única variable interna que se considera es la deformación plástica, que ya se encuentra incluida en las variables básicas. Debido a que las deformaciones elásticas se suponen *pequeñas*, la energía elástica se puede definir directamente en la *configuración actual* mediante la siguiente función cuadrática:

$$\psi^{e} = \frac{1}{2\rho_{o}}(e - e^{p}) : c : (e - e^{p})$$

= $\frac{1}{\rho_{o}} \left[\frac{1}{2} \overline{\lambda} (\operatorname{tr} e^{e})^{2} + \overline{\mu}(e^{e} : e^{e}) \right]$ (3.3.9)

:..

donde $c = 2\overline{\mu}I + \overline{\lambda}1 \otimes 1$ es el tensor constitutivo elástico en la configuración deformada. Con base en (3.3.6.b) las tensiones de Kirchhoff se pueden calcular como:

$$\tau = c:(e-e^p) = 2\overline{\mu}(e-e^p) + \overline{\lambda}\operatorname{tr}[e-e^p]\mathbf{1}$$
(3.3.10)

50

• Densidad relativa

Sea $\boldsymbol{\omega}_t \subset \boldsymbol{\Omega}_t = \boldsymbol{\varphi}_t(\boldsymbol{\Omega})$ una porción del cuerpo en el tiempo t. La expresión material del principio de conservación de la masa afirma que la masa del subconjunto $\boldsymbol{\omega}_t$ (arbitrario) en el instante t es la misma que en el instante inicial t = 0. Con base en este principio, se puede formular la siguiente ecuación básica de la densidad en la configuración de referencia [49]:

$$\rho \operatorname{Det} \boldsymbol{F} = \rho_o \tag{3.3.11}$$

La densidad ρ representa el valor de la densidad aparente definida en el capítulo 1, el valor ρ_o representa entonces el valor de la densidad inicial aparente. Dividiendo a los dos lados de la ecuación (3.3.11) por la densidad del sólido ρ_s se obtiene la siguiente expresión en términos de la densidad relativa:

$$\eta(\boldsymbol{X},t) = \frac{\eta_o(\boldsymbol{X})}{\text{Det}[F(\boldsymbol{X},t)]}$$
(3.3.12)

donde η_o es la densidad relativa inicial y η_t es la densidad relativa en el instante t. Ésta es una expresión bastante sencilla de evaluar en la configuración material a diferencia de la expresión espacial [49].

• Condición de fluencia

La condición de fluencia, en general distingue entre dos estados, uno elástico que se encuentra en el interior de la superficie definida a partir de la condición de fluencia y un estado plástico que se localiza sobre dicha superficie [40].

En el caso que se trata aquí, el estado elástico proviene del comportamiento elástico de las partículas cuando éstas entran en contacto entre si, mientras que el estado plástico se interpreta como una pérdida de vacíos más unas deformaciones plásticas en las zonas de contacto. La condición de fluencia que se considera aquí, con algunas modificaciones, fue inicialmente propuesta por Kuhn y Downey en [33] y empleada por G.G. Weber y S.B. Brown en [19] y se define en la configuración espacial de la siguiente forma:

$$\phi(\tau,\eta) = \|\operatorname{dev}[\tau]\|^2 + a_1(\eta) \left(\frac{\operatorname{tr} \tau}{3}\right)^2 - \frac{2}{3} a_2(\eta) \sigma_y^2 \le 0$$
(3.3.13)

El tensor τ corresponde a las tensiones de Kirchhoff, η la densidad relativa y σ_y es la tensión máxima de fluencia del material homogéneo. a_1 , a_2 son parámetros que dependen de la densidad relativa y se definen dependiendo del tipo de material. Los términos dev $[\tau]$ y tr $[\tau]$, corresponden al desviador y la

traza del tensor τ , y vienen dados por las siguientes expresiones:

$$\mathrm{tr}[m{ au}] = au^{ij} g_{ij} = g : m{ au}$$

 $\mathrm{dev} \ m{ au} = m{ au} - rac{1}{3} \mathrm{tr}[m{ au}] \ g^{-1}$

De forma equivalente, la condición de fluencia se puede escribir en la configuración de referencia como:

$$\Phi(S,\eta) = \|\operatorname{DEV}S\|_{C}^{2} + a_{1}(\eta) \left(\frac{\operatorname{TR}S}{3}\right)^{2} - \frac{2}{3} a_{2}(\eta) \sigma_{y}^{2} \leq 0$$
(3.3.14)

donde

$$TR[S] = C:S$$
$$DEV[S] = S - \frac{1}{3}TR[S]C^{-1}$$
(3.3.15.a)

y la norma $\|\cdot\|_C$ viene dada por:

$$\| \text{DEV} S \|_{C}^{2} = (\text{DEV} S)^{ij} (\text{DEV} S)^{kl} C_{ik} C_{jl}$$
(3.3.15.b)

La igualdad en (3.3.13) (o equivalentemente en (3.3.14)), define la superficie de fluencia que se analiza a continuación. Para facilitar la descripción de esta superficie, se empleará la proyección de ésta sobre ciertos planos característicos [50], descritos en el espacio de tensiones. Los ejes del sistema espacial coinciden con las direcciones principales (este espacio se conoce como espacio de High-Westergard).

Se define plano octaédrico como el plano ortogonal a la recta diagonal definida por $\tau_1 = \tau_2 = \tau_3$ donde τ_1, τ_2, τ_3 coinciden con las direcciones principales. Sobre cada uno de estos planos el primer invariante del tensor de tensiones se mantiene constante, por lo tanto la superficie de fluencia se proyecta como un círculo. El radio de éste varía haciéndose máximo sobre el plano octaédrico que pasa por el origen.

Se define como plano meridiano al plano ortogonal al plano octaédrico y que contiene la recta diagonal. Debido a la simetría axial de la superficie, es suficiente conocer la forma de la superficie sobre uno de estos planos.

Con el objeto de analizar mejor el comportamiento de la superficie de fluencia, definida a partir de la condición (3.3.13), se reescribe ésta, en términos de los parámetros ξ , ρ definidos como $\xi = \frac{I_1}{3}$ y $\rho = \sqrt{2J_2}$, donde I_1 representa el primer invariante del tensor de tensiones y J_2 el segundo invariante del desviador. ξ representa el eje de las presiones y ρ el eje desviador. La superficie se escribe ahora como:

$$\hat{\phi}(\rho,\xi,\eta) = \rho^2 + a_1(\eta)\xi^2 - \frac{2}{3}a_2(\eta)\sigma_y^2 = 0$$
 (3.3.16)
que puede verse en el plano meridiano como la ecuación de la siguiente elipse:

$$\left[\frac{\rho}{r_{\rho}}\right]^2 + \left[\frac{\xi}{r_{\xi}}\right]^2 = 1$$

donde

$$r_
ho = \sigma_y \sqrt{rac{2}{3}a_2(\eta)}$$
 $r_\xi = \sigma_y \sqrt{rac{2}{3}rac{a_2(\eta)}{a_1(\eta)}}$ $rac{r_
ho}{r_\xi} = \sqrt{a_1(\eta)}$

• Observación 3.2

Supóngase por un momento que el parámetro a_1 permanece constante. Entonces un cambio en el parámetro a_2 modifica igualmente los valores de r_{ρ} y r_{ξ} haciendo que la elipse aumente o disminuya de tamaño.

Las variaciones en el parámetro a_1 manteniendo a_2 constante sólo modifican el valor de r_{ξ} haciendo que la elipse sea más o menos alargada. Este parámetro modifica esencialmente la forma de la elipse.

Al inicio del proceso de compactación cuando la densidad relativa coincide con la densidad inicial, la superficie de fluencia debe ser un punto $(a_2(\eta_o) = 0)$. Esto coincide con la apreciación física que se tiene del material al inicio del proceso de compactación, ya que es un material que carece de un estado de tensiones elástico, no soporta un nivel apreciable de tracción ni de cortante (se asemeja a un fluido en reposo). A medida que la densidad relativa aumenta, la elipse que describe la superficie crece en función de los parámetros a_1 y a_2 , como se explicó en la observación 3.2 (ver figura 3.2). Este crecimiento en el estado elástico se interpreta como un aumento en la resistencia, en la capacidad para soportar cortante y tracción. Todo esto es debido al trabajo en frío realizado sobre las partículas. Aunque aquí se supondrá, que del lado de la tracción, la superficie evoluciona de forma similar que del lado de la compresión, según se discute en la literatura expuesta en el capítulo 2, la evolución de la superficie no puede crecer indefinidamente, y sería necesario la adición de un criterio de falla a tracción, si el proceso de compactación diera lugar a tracciones relevantes.

Los parámetros a_1 y a_2 de (3.3.13) se ajustan, de tal forma que al final la superficie se asemeja a la superficie de Huber-von Mises, típica de un material metálico homogéneo (un cilindro de longitud infinita cuyo eje coincide con el eje de presión hidrostática, ver figura 3.2). La determinación experimental de estos parámetros se puede obtener de forma similar a la presentada por T. Nakagawa y M Sato en [15] y que fue descrita en el capítulo 2. La forma general de estas funciones puede verse en la figura 3.2.



Figura 3.2 Evolución de la superficie de fluencia

• Reglas de flujo

Se analizan dos reglas de flujo: a) una regla de flujo *no asociada*, donde la dirección del flujo plástico ocurre proporcional a las componentes de la deformación elástica. La ecuación de evolución se escribe como:

$$L_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{e}^{\boldsymbol{p}} = \dot{\lambda}\boldsymbol{e}^{\boldsymbol{e}} = \dot{\lambda}(\boldsymbol{e} - \boldsymbol{e}^{\boldsymbol{p}}) = \dot{\lambda}\boldsymbol{c}^{-1}:\boldsymbol{\tau}$$
(3.3.17)

donde $L_v(\cdot)$ representa la derivada de Lie (ver anexo A4). La expresión de la derecha se deriva de (3.3.10).

b) una regla de flujo asociada, definida como:

$$L_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{e}^{p} = \dot{\lambda} \; \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\tau}} \tag{3.3.18}$$

Como se verá más adelante las dos ecuaciones llevan a una integración cerrada de la ecuación constitutiva. Además permiten calcular la matriz elastoplástica tangente consistente de forma exacta. El parámetro $\dot{\lambda} \ge 0$ es una función escalar no negativa conocida como parámetro de consistencia plástica, que debe cumplir las siguientes condiciones de Kuhn-Tucker [36]:

$$\lambda \geq 0 \qquad \phi(oldsymbol{ au},\eta) \leq 0 \qquad \lambda \phi(oldsymbol{ au},\eta) = 0$$

Las anteriores condiciones se conocen en la terminología clásica[36], como condiciones de carga y descarga. Además, debe cumplirse la siguiente condición de persistencia:

$$\lambda \phi(oldsymbol{ au},\eta)=0$$

• Disipación plástica

La función de energía libre (3.3.8.6) se puede escribir en la configuración de referencia como:

$$\Psi = \Psi^{e}(E - E^{p}) + \Psi^{p}(Q)$$
 (3.3.19)

donde Q representa el conjunto de las variables internas q, escritas en la configuración de referencia. En el modelo que aquí se considera, la componente elástica de (3.3.19) se obtiene a partir de la expresión (3.3.9) de tal forma que:

$$\Psi^{e}(\boldsymbol{E}-\boldsymbol{E}^{p})=\frac{1}{2\rho_{o}}(\boldsymbol{E}-\boldsymbol{E}^{p}):\boldsymbol{\Xi}:(\boldsymbol{E}-\boldsymbol{E}^{p}) \tag{3.3.20}$$

donde el tensor de cuarto orden Ξ , es el *pull back* del tensor elástico *c*, esto es, $\Xi = \phi^*(c)$. La disipación plástica viene dada por el negativo de la derivada de la energía libre respecto a un cambio en las variables internas[37]:

$$\mathcal{D}^{p} := -\frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{E}^{p}} : \dot{\boldsymbol{E}}^{p} - \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{Q}} : \dot{\boldsymbol{Q}}$$
(3.3.21)

Desde el punto de vista de la mecánica de medios continuos, el cumplimiento de la segunda ley de la termodinámica requiere que se cumplan la condición constitutiva y la disipación positiva, esto es [40][37]:

1.
$$S = \rho_o \frac{\partial \Psi^e}{\partial E} = \Xi : (E - E^p)$$

2. $\mathcal{D}^p \ge 0$
(3.3.22)

La primera condición, se cumple directamente, ya que es precisamente el resultado de escribir la ecuación (3.3.10) en la configuración de referencia. En el modelo que se estudia aquí, la segunda condición, se debe comprobar para cada una de las reglas de flujo.

Con base en la definición (3.3.21), la ecuación (3.3.20) y recordando que la única variable interna es la deformación plástica, entonces la condición (3.3.22.b) se reduce a probar que:

$$\mathcal{D}^{p} = \frac{1}{\rho_{o}} \dot{\boldsymbol{E}}^{p} : \boldsymbol{\Xi} : (\boldsymbol{E} - \boldsymbol{E}^{p}) \ge 0 \qquad (3.3.23)$$

a) En el el caso de flujo no asociado, la evolución de E^p viene dada por el *pull back* de la ecuación (3.3.17), por lo tanto se tiene que:

$$\dot{E}^p = \dot{\lambda} (E - E^p)$$
 (3.3.24)

Luego de reemplazar (3.3.24) en (3.3.23) entonces la condición de disipación plástica, se deduce del hecho que el operador Ξ es definido positivo.

b) En el caso de flujo asociado, la evolución de la deformación plástica E^p , se obtiene a partir del *pull back* de la ecuación (3.3.18), entonces se tiene que:

$$\dot{E}^{p} = \dot{\lambda} \frac{\partial \Phi}{\partial S}$$
 (3.3.25)

Partiendo de la ecuación (3.3.14) y haciendo uso de la regla de la cadena se puede probar que el término de la derecha en (3.3.25) viene dado por:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial S} = 2C \cdot \text{DEV}[S] \cdot C + \frac{2}{9} a_1 \text{TR} [S] C \qquad (3.3.26)$$

esta expresión se puede escribir en la configuración espacial, mediante el operador *push forward* como:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\tau}} = 2 \operatorname{dev} \left[\boldsymbol{\tau}\right] + \frac{2}{9} a_1 \operatorname{tr}[\boldsymbol{\tau}] \boldsymbol{g} \qquad (3.3.27)$$

Haciendo uso de las ecuaciones (3.3.25), (3.3.26),(3.3.22.a) y (3.3.23), la disipación plástica \mathcal{D}^p se puede escribir como:

$$\mathcal{D}^{p} = \frac{2}{\rho_{o}} \dot{\lambda} \left[\boldsymbol{C} \cdot \mathrm{DEV}[\boldsymbol{S}] \cdot \boldsymbol{C} + \frac{1}{9} a_{1}(\boldsymbol{C}; \boldsymbol{S}) \boldsymbol{C} \right] : \boldsymbol{S}$$
(3.3.28)

y luego de algunas manipulaciones algebraicas queda:

$$\mathcal{D}^{p} = \frac{2}{\rho_{o}} \dot{\lambda} [\| \text{DEV}[S] \|_{C}^{2} + \frac{1}{9} a_{1} (\text{TR}S)^{2}]$$
(3.3.29)

donde $\|(\cdot)\|_{C}^{2}$ y TR[S] fueron definidos en (3.3.15.a, b). Claramente, la expresión (3.3.29) es positiva, que era lo que se quería demostrar. La condición de disipación plástica, en este caso se hubiera podido deducir directamente del principio de máxima disipación plástica, [37][40], que afirma que en el caso de que el flujo sea asociado, la disipación es positiva y además máxima.

56

• Tensor elastoplástico tangente

El tensor elastoplástico tangente c^{ep} , relaciona la derivada objetiva del tensor de tensiones τ , con la derivada objetiva del tensor de deformaciones e. Esta relación se escribe como:

$$L_v \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{c}^{ep} \colon L_v \boldsymbol{e} \tag{3.3.30}$$

La derivada objetiva que se utiliza aquí es la derivada de Lie [35]. La obtención del tensor c^{ep} se lleva a cabo derivando objetivamente la ecuación (3.3.10) y haciendo uso de la condición de persistencia:

$$\dot{\lambda}\dot{\phi}(\boldsymbol{\tau},\eta) = 0$$
 (3.3.31)

para obtener explícitamente el valor del parámetro λ .

La derivada de Lie de la ecuación (3.3.10) se puede escribir como:

$$L_{v}\tau = L_{v}c:[e - e^{p}] + c:[L_{v}e - L_{v}e^{p}]$$
(3.3.32)

la derivada $L_v c$ representa la derivada de Lie del tensor elástico c. La derivada $L_v e^p$ se puede escribir como:

$$L_{v}e^{p} = \lambda h \tag{3.3.33}$$

donde $h = (e - e^p)$ en el caso de flujo no asociado y $h = \frac{\partial \phi}{\partial \tau}$ en el caso de flujo asociado (ver (3.3.17) y (3.3.18)).

Una expresión de la derivada del tensor elástico c puede encontrarse en el anexo A1 (sección A1.3).

Esta derivada, y en general, el cálculo del tensor elastoplástico tangente, se pueden llevar a cabo de dos formas equivalentes:

1. llevar el tensor elástico a la configuración de referencia mediante el operador *pull back* ϕ^* [35], (ver anexo A4), luego calcular la derivada temporal en dicha configuración material y nuevamente llevar el resultado a la configuración espacial mediante el operador *push forward* ϕ_* .

2. Derivar directamente la expresión del tensor elástico c, en la configuración espacial respecto al tensor métrico g, de tal forma que:

$$L_v c = \frac{\partial c}{\partial g} : L_v g \tag{3.3.35}$$

El producto $L_v c: (e - e^p)$, se puede escribir de la siguiente forma (ver anexo A1, sección A1.3):

$$L_v c: (e - e^p) = d: L_v e \tag{3.3.36}$$

donde el tensor d viene dado por:

$$(d)^{ijkl} = -4\overline{\mu}[(e^e)^{il}\delta^{jk} + \delta^{ik}(e^e)^{lj}] - 2\overline{\lambda}[\delta^{ij}(e^e)^{kl} + \delta^{ik}\delta^{jl}\mathrm{tr}[e^e]]$$
(3.3.37)

Condición de persistencia

La derivada objetiva de $\phi(\tau, \eta)$ se escribe como:

$$L_{v}\phi = rac{\partial\phi}{\partialoldsymbol{ au}}:L_{v}oldsymbol{ au} + rac{\partial\phi}{\partialoldsymbol{g}}:L_{v}oldsymbol{g} + rac{\partial\phi}{\partial\eta}:L_{v}\eta = 0$$
 (3.3.38)

que se iguala a cero al imponer la condición de persistencia. Se puede probar (ver (A.1.31)) que:

$$L_{v}\eta = -\eta g^{-1} : L_{v}e \tag{3.3.39}$$

El siguiente paso es reemplazar la ecuación (3.3.33) en la ecuación (3.3.32) y esta última a su vez en la ecuación (3.3.38), se obtiene así la siguiente expresión para el parámetro $\dot{\lambda}$:

$$\dot{\lambda} = \frac{\left[\frac{\partial\phi}{\partial\tau}: d + \frac{\partial\phi}{\partial\tau}: c + 2\frac{\partial\phi}{\partial g} - \eta\frac{\partial\phi}{\partial\eta}g^{-1}\right]: L_v e}{\frac{\partial\phi}{\partial\tau}: c: h}$$
(3.3.40)

El tensor elastoplástico tangente se obtiene luego de reemplazar la expresión (3.3.40) en la ecuación (3.3.33), que a su vez se reemplaza en la ecuación (3.3.32) obteniéndose que c^{ep} viene dado por:

$$c^{ep} = (c+d) - \frac{(c:h) \otimes \left[\frac{\partial \phi}{\partial \tau}: (c+d) + 2\frac{\partial \phi}{\partial g} - \eta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} g^{-1}\right]}{\frac{\partial \phi}{\partial \tau}: c:h}$$
(3.3.41)

El cuadro 3.1 resume las ecuaciones básicas del modelo constitutivo que se propone en esta tesis.

3.3.3 Integración de la ecuación constitutiva

Dado el intervalo de tiempo de interés, se procede a su discretización en subintervalos no necesariamente del mismo tamaño. Dado un punto X fijo pero arbitrario del cuerpo Ω , el problema que debe resolverse sucesivamente en cada uno de los subintervalos es el siguiente:

Suponiendo conocidas las variables básicas del modelo en el instante t_n encontrar el nuevo valor de las variables básicas en el instante t_{n+1} de tal forma que se satisfagan las ecuaciones del cuadro 3.1. Precisando las ideas anteriores se tiene lo siguiente:

Sea [0,T] el intervalo de tiempo de interés.

Sea

$$[0,T] = \bigcup_{n=0}^{N} [t_n, t_{n+1}]$$

Cuadro 3.1 Modelo constitutivo del pulvimetal

a. Respuesta elástica

$$oldsymbol{ au} = oldsymbol{c}: (oldsymbol{e} - oldsymbol{e}^p) = oldsymbol{c}: oldsymbol{e}^e$$

b. Condición de fluencia

$$\phi(\boldsymbol{\tau},\eta) = \| \operatorname{dev} \boldsymbol{\tau} \|^2 + \frac{1}{9} a_1(\eta) [\operatorname{tr} \boldsymbol{\tau}]^2 - \frac{2}{3} a_2(\eta) \sigma_y^2 \leq 0$$

c. Regla de flujo

$$L_{v}e^{p} = \dot{\lambda}h$$

a.
$$h = c^{-1} : \tau$$
 b. $h = \frac{\partial \phi}{\partial \tau}$

d. Condiciones de Kuhn-Tucker:

$$\dot{\lambda} \geq 0 \qquad \phi(oldsymbol{ au},\eta) \leq 0 \qquad \dot{\lambda} \phi(oldsymbol{ au},\eta) = 0$$

e. Condición de persistencia:

$$\dot{\lambda}\dot{\phi}(oldsymbol{ au},\eta)=0$$

f. Tensor constitutivo tangente:

$$(d)^{ijkl} = -4\overline{\mu}[(e^e)^{il}\delta^{jk} + \delta^{ik}(e^e)^{lj}] - 2\overline{\lambda}[\delta^{ij}(e^e)^{kl} + \delta^{ik}\delta^{jl}\mathrm{tr}[e^e]]$$
$$c^{ep} = (c+d) - \frac{(c:h)\otimes\left[\frac{\partial\phi}{\partial\tau}:(c+d) + 2\frac{\partial\phi}{\partial g} - \eta\frac{\partial\phi}{\partial\eta}g^{-1}\right]}{\frac{\partial\phi}{\partial\tau}:c:h}$$

una discretización temporal posible. El problema que debe resolverse sucesivamente en cada uno de los subintervalos se puede describir de la siguiente forma:

Sea $[t_n, t_{n+1}]$ el subintervalo de interés. Sea $X \in \Omega$ un punto del cuerpo, fijo pero arbitrario. Se supone que el cuerpo en el estado t_n se encuentra en equilibrio y además, que las variables que caracterizan el modelo son conocidas.

٠.

Supóngase que se conoce $\varphi_n(\Omega)$ y las siguientes variables en la configuración material:

$$\{E_n(X), S_n(X), E_n^p(X), \eta_n(X)\}$$
 (3.3.42)

esto equivale a suponer, que se conocen las siguientes variables pero en la configuración espacial, donde $x = \varphi_n(X)$:

$$\{e_n(x), \tau_n(x), e_n^p(x), \eta_n(x)\}$$
 (3.3.43)

Las variables de (3.3.42) se relacionan con las variables de (3.3.43) de forma similar a las relaciones (A4.4) y (A4.5)). Dichas relaciones vienen definidas mediante los operadores *push forward* y *pull back* presentados en el anexo A4, que actúan dependiendo del caracter tensorial de cada variable. Nótese que las transformaciones deben llevarse a cabo por medio del tensor gradiente de la deformación F_n definido en el instante t_n .

Dado el campo de desplazamientos incrementales ΔU_{n+1} , el objetivo es actualizar las variables básicas en el tiempo t_{n+1} de tal forma que se satisfagan las ecuaciones del cuadro 3.1. Adicionalmente, se debe añadir al sistema la ecuación de descomposición del tensor gradiente de la deformación:

$$F_{n+1} = F_{n+1}^e \cdot F_{n+1}^p$$

La configuración definida a partir de $(F_{n+1}^e)^{-1}$, en principio es una incognita adicional del sistema. Debido a que las deformaciones elásticas son pequeñas respecto de las deformaciones plásticas, se supondrá aquí que:

$$F^e \approx 1$$
 y $F^p \approx F$

de esta forma, la configuración intermedia coincide con la deformada y para la integración de las ecuaciones se utiliza directamente el tensor F_{n+1} .

• Actualización de las deformaciones y la densidad relativa

La nueva configuración en el tiempo t_{n+1} y el gradiente de la deformación se actualizan como sigue:

$$\varphi_{n+1}(X) = \varphi_n(X) + \Delta U_{n+1}(X)$$

$$F_{n+1}(X) = F_n(X) + \text{GRAD } \Delta U_{n+1}(X)$$
(3.3.44)

las deformaciones y la densidad relativa vienen dadas por:

$$E_{n+1}(X) = \frac{1}{2} (F_{n+1}^T F_{n+1} - G)$$

$$\eta_{n+1}(X) = \frac{\eta_o(X)}{\det F_{n+1}(X)}$$
(3.3.45)

a. Integración de la ecuación de flujo : flujo no asociado

La ecuación (3.3.17) se puede reescribir como:

$$L_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{e}^p = \dot{\lambda}(\boldsymbol{e} - \boldsymbol{e}^p)$$

por definición de la derivada de Lie $L_{v}(\cdot)$ se sabe que:

$$L_{v}e^{p}=\phi_{*}\left[rac{\partial}{\partial t}\phi^{*}(e^{p})
ight]$$

por lo tanto el primer paso es aplicar el operador *pull back* ϕ^* a los dos lados de la ecuación y se obtiene así una ecuación equivalente pero en la configuración de referencia que puede escribirse como:

$$\frac{\partial \boldsymbol{E}^{p}}{\partial t}(\boldsymbol{X},t) = \dot{\lambda}[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{X},t) - \boldsymbol{E}^{p}(\boldsymbol{X},t)]$$
(3.3.46)

Obsérvese que el término de la izquierda corresponde a la derivada total de la deformación plástica respecto al tiempo. El siguiente paso es realizar una integración implícita (Euler hacia atrás) en el subintervalo de interés, obteniendose así la siguiente expresión para E_{n+1}^p :

$$E_{n+1}^p(X) = E_n^p(X) + \Delta \lambda_{n+1} [E_{n+1}(X) - E_{n+1}^p(X)]$$
(3.3.47)

donde $\Delta \lambda_{n+1} = \Delta t \dot{\lambda}(t_{n+1})$. Agrupando E_{n+1}^p a la izquierda y luego llevando esta expresión a la configuración espacial mediante el operador *push forward* ϕ_*^{n+1} se tiene que:

$$e_{n+1}^p(x) = (1 - \alpha_{n+1})e_{n+1}(x) + \alpha_{n+1}\tilde{e}_n^p(x)$$
 (3.3.48)

donde

$$\alpha_{n+1} = \frac{1}{(1 + \Delta \lambda_{n+1})} \qquad e_{n+1} = \phi^*(E_{n+1}) \qquad \tilde{e}_n^p = \phi_*^{n+1}(E_n^p) \qquad (3.3.49)$$

El operador ϕ_*^{n+1} actúa de acuerdo a la definición (A4.2), en este caso se utiliza el tensor F_{n+1} . A partir de esta ecuación, las tensiones se calculan directamente evaluando la ecuación (3.3.10) como sigue:

$$\tau_{n+1} = c : (e_{n+1} - e_{n+1}^p)$$
(3.3.50)

• Determinación del multiplicador plástico

En las ecuaciones (3.3.48) y (3.3.50) las incognitas son: el tensor de deformaciones plásticas e_{n+1}^p , el tensor de tensiones τ_{n+1} y el parámetro escalar $\Delta \lambda_{n+1}$. Por lo tanto es necesario añadir al sistema anterior las siguientes condiciones de Kuhn-Tucker en su forma discreta:

$$\phi_{n+1} \leq 0 \qquad \Delta \lambda_{n+1} \geq 0 \qquad \Delta \lambda_{n+1} \phi_{n+1} = 0$$
 (3.3.51)

La primera condición exige que el estado de tensiones n+1 sea admisible. La segunda mantiene la condición de irreversibilidad de las variables plásticas y la última afirma que si $\phi_{n+1} < 0$ entonces obligatoriamente $\Delta \lambda_{n+1}$ debe anularse y por lo tanto no hay evolución de las variables plásticas.

• Algoritmo Predictor-Corrector

La solución del sistema anterior formado por las ecuaciones (3.3.48), (3.3.50) y las condiciones de Kuhn-Tucker (3.3.51), puede intentar abordarse de la siguiente forma: Reemplazar la ecuación (3.3.48) en la ecuación (3.3.50) de tal forma que las tensiones aparecen sólo como función del parámetro $\Delta \lambda_{n+1}$. Luego sustituir el valor de las tensiones en la función de fluencia. La dificultad que se tiene ahora es que la condición sobre la función de fluencia viene dada como una desigualdad numérica. Esto motiva el uso del siguiente algoritmo [36] Predictor-Corrector que permite resolver este último problema.

El algoritmo consiste en dividir el problema en dos partes. El primero conocido como predictor elástico, supone que las variables plásticas no evolucionan durante el intervalo de tiempo que se está analizando. El resultado de esta etapa es un valor de ensayo de las variables básicas. Si este valor de ensayo verifica las condiciones de Kuhn-Tucker, se convierte directamente en la solución del problema.

Si no las verifica, se concluye que la hipótesis fue errónea y por lo tanto implica que sí hubo evolución de las variables plásticas. Se continúa entonces con el corrector plástico que consiste en *corregir* el estado de tensiones y calcular el parámetro $\Delta \lambda_{n+1}$ que satisface las condiciones Kuhn-Tucker. En general este último problema es no lineal y requiere técnicas de integración sofisticadas para calcular el estado corregido.

El modelo propuesto en esta tesis, tanto con la regla de flujo *asociada*, y la *no asociada*, se caracteriza por proporcionar el valor del parámetro $\Delta \lambda_{n+1}$ de forma cerrada, lo que facilita enormemente los cálculos.

• Predictor elástico

Suponiendo que la deformación plástica no evoluciona durante el intervalo de interés se tiene que la deformación elástica de prueba en el estado n+1 viene dada por:

$$E^{e^{trai}} = E_{n+1} - E_n^p \tag{3.3.52}$$

Una expresión equivalente pero en la configuración espacial es la siguiente:

$$e_{n+1}^{e^{\text{trial}}} = e_{n+1} - \phi_*^{n+1}(E_n^p) = e_{n+1} - \tilde{e}_n^p \tag{3.3.53}$$

El estado de tensiones y la condición de fluencia de prueba se definen entonces como:

$$\tau_{n+1}^{\text{trial}} = c : e_{n+1}^{e^{\text{trial}}} \phi_{n+1}^{\text{trial}} = \phi(\tau_{n+1}^{\text{trial}}, \eta_{n+1})$$
(3.3.54)

Como se vió en la sección anterior, la superficie de fluencia corresponde a un elipsoide, por lo tanto ϕ como función de las tensiones es convexa. Entonces se tiene que $\phi_{n+1}^{\text{trial}} \ge \phi_{n+1}$ (ver lema 3.1 de [36]) donde $\phi_{n+1} = \phi(\tau_{n+1}, \eta_{n+1})$.

Corrector Plástico

 $(1^{er} \ Caso)$ Supóngase en primer lugar que $\phi_{n+1}^{\text{trial}} < 0$. Entonces $\phi_{n+1} < 0$ por el comentario anterior. Por la condicion 3.3.51.c se tiene que $\Delta \lambda_{n+1} = 0$. Entonces la deformación plástica no evoluciona y el estado de prueba es el correcto. Las variables en el estado n + 1 son por lo tanto:

$$\tau_{n+1} = \tau_{n+1}^{\text{trial}} \\ e_{n+1}^p = \tilde{e}_n^p$$
(3.3.55)

 $(2^{o} \ Caso)$ Supóngase ahora que $\phi_{n+1}^{\text{trial}} > 0$ entonces se trata de un estado no admisible y por lo tanto $\Delta \lambda_{n+1} > 0$ de tal forma que $E_n^p \neq E_{n+1}^p$ y se concluye que $\tau_{n+1} \neq \tau_{n+1}^{\text{trial}}$.

Reemplazando (3.3.48) en la ecuación (3.3.50) se obtiene la siguiente expresión para las tensiones τ_{n+1} :

$$\tau_{n+1} = \alpha_{n+1} \tau_{n+1}^{\text{trial}}$$
 donde $\alpha_{n+1} = \frac{1}{1 + \Delta \lambda_{n+1}}$ (3.3.56)

La condición $\Delta \lambda_{n+1} > 0$, implica que $\phi_{n+1} = 0$ por la condición (3.3.51.c) o sea que el estado es incrementalmente plástico:

$$\dot{\gamma} \phi(\alpha_{n+1} \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}, \eta_{n+1}) = 0$$
 (3.3.57)

a partir de esta igualdad se puede encontrar el siguiente valor para el parámetro α_{n+1} :

$$\alpha_{n+1}^{2} = \frac{\frac{2}{3}a_{2}(\eta_{n+1})\sigma_{y}^{2}}{\|\operatorname{dev} \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\operatorname{trial}}\|^{2} + \frac{1}{9}a_{1}(\eta_{n+1})\left[\operatorname{tr} \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\operatorname{trial}}\right]^{2}}$$
(3.3.58)

El multiplicador plástico $\Delta \lambda_{n+1}$ se encuentra entonces mediante la expresión (3.3.49.a). El caso en que $\phi_{n+1}^{\text{trial}} = 0$, junto con la condición inicial que $\Delta \lambda_{n+1} = 0$ satisface las condiciones de Kuhn-Tucker. Por lo tanto el predictor elástico es correcto y se cae nuevamente en el primer caso.

b. Integración de la ecuación de flujo: flujo asociado

La ecuación de evolución (3.3.18) se escribe en la configuración de referencia como:

$$\frac{\partial E^{p}}{\partial t}(X,t) = \dot{\lambda} \frac{\partial \Phi}{\partial S} \qquad (3.3.59)$$

La ecuación anterior se integra implícitamente en el intervalo de tiempo de interés, obteniéndose así la siguiente expresión para las deformaciones plásticas:

$$\boldsymbol{E}_{n+1}^{p} = \boldsymbol{E}_{n}^{p} + \Delta \lambda_{n+1} \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \boldsymbol{S}_{n+1}} \qquad \Delta \lambda_{n+1} = \Delta t \dot{\lambda}(t_{n+1}) \tag{3.3.60}$$

donde

$$\frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial S_{n+1}} = 2C_{n+1} \cdot \text{DEV}S_{n+1} \cdot C_{n+1} + \frac{2}{9}a_1(\eta_{n+1})\text{TR}[S_{n+1}]C_{n+1}$$
(3.3.61)

esta última expresión resulta de evaluar la ecuación (3.3.26) en el instante t_{n+1} . La aplicación del operador *push forward* ϕ_*^{n+1} a la ecuación (3.3.60) permite formular ésta, en la configuración deformada de la siguiente forma:

$$e_{n+1}^{p} = \tilde{e}_{n}^{p} + 2\Delta\lambda_{n+1} \left[\operatorname{dev}[\tau_{n+1}] + \frac{1}{9}a_{1}\operatorname{tr}[\tau_{n+1}] g \right]$$
(3.3.62)

donde \tilde{e}_n^p fue definido en (3.3.49.c) Los pasos que deben seguirse son muy similares a los empleados en el caso de flujo no asociado. Al sistema de ecuaciones formado por (3.3.50) y (3.3.62) se añaden las condiciones de Kuhn Tucker (3.3.51). Se utiliza el algoritmo predictor corrector descrito en el apartado anterior, para su solución. Se puede probar (ver anexo A1) que el estado de tensiones viene dado por la siguiente función definida por partes:

$$\boldsymbol{\tau}_{n+1} = \begin{cases} \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}} & \phi(\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}, \eta_{n+1}) < 0 \\ \\ \alpha_{n+1} \text{dev}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}] + \beta_{n+1} p_{n+1}^{\text{trial}} \mathbf{1} & \phi(\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}, \eta_{n+1}) \ge 0 \end{cases}$$
(3.3.63)

donde:

$$p_{n+1}^{\text{trial}} = \frac{1}{3} \text{tr}[\boldsymbol{\tau}]_{n+1}^{\text{trial}}$$

$$\alpha_{n+1} = \frac{1}{1 + 4\overline{\mu}\Delta\lambda_{n+1}}$$

$$\beta_{n+1} = \frac{1}{1 + 2\kappa a_1\Delta\lambda_{n+1}}$$
(3.3.64)

 $\overline{\mu}$ es una de las constantes de Lamé (módulo de deformación transversal) y κ es el módulo de deformacción volumétrica del material. El valor del parámetro $\Delta \lambda_{n+1}$ se obtiene reemplazando la ecuación para las tensiones (3.3.63.b) en la condición (3.3.51.c). La ecuación resultante es el siguiente polinomio de cuarto orden (anexo A1):

$$\beta_{n+1}^2 \| \operatorname{dev} \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\operatorname{trial}} \|^2 + \alpha_{n+1}^2 (p_{n+1}^{\operatorname{trial}})^2 - \frac{2}{3} a_2(\eta_{n+1}) \sigma_y^2 = 0 \qquad (3.3.65)$$

La ecuación anterior es efectivamente de cuarto orden en $\Delta \lambda_{n+1}$ porque las variables $1/\alpha_{n+1}^2$ y $1/\beta_{n+1}^2$ son de orden cuadrático cada una. Los cuadros 3.2a y 3.2b resumen los algoritmos propuestos para la integración de la ecuación constitutiva, empleando una regla de flujo asociada y una no asociada respectivamente.

El cálculo del tensor constitutivo tangente c_{n+1}^p para los dos casos expuestos ha sido deducido en el anexo A1.

3.4 TRATAMIENTO DEL CONTORNO: CONTACTO

Existen ciertas geometrías en las cuales el problema de contacto existente entre el pulvimetal y las paredes del molde se puede resolver como un problema de contorno clásico. Esto es, imponiendo unilateralmente el desplazamiento en la dirección normal de los puntos que se encuentran en la frontera. La hipótesis básica que permite llevar a cabo esta simplificación es que debido a la presión externa, a la geometría del molde, y al movimiento de los punzones, el material que se encuentra en el interior, siempre intentará salir del molde. El problema se encuentra con geometrías y movimientos de los punzones más complejos que violan esta hipótesis. Dependiendo de la secuencia de los movimientos, partes del material podrían despegarse y más adelante volver a tomar contacto. Otro caso podría ocurrir cuando la parte superior de la pieza que se desea construir es tal que al inicio del proceso, justo después de enrrasar, no existe contacto entre el material y la superficie de los punzones, entonces, sólo un tiempo después cuando se han desplazado lo suficiente se consigue un contacto completo. La etapa de extracción es otro de los problemas que requiere un buen tratamiento del contacto que, como se verá más adelante, debe venir acompañada de un

Cuadro 3.2a

Integración de la ecuación constitutiva: flujo no asociado 1. Actualización.

- $\varphi_{n+1} = \varphi_n + \Delta U_{n+1}, \qquad F_{n+1} = F_n + \text{GRAD } \Delta U_{n+1}$ $E_{n+1} = \frac{1}{2} (F_{n+1}^T F_{n+1} G), \qquad \eta_{n+1} = \frac{\eta_0}{\det F_{n+1}}$
- 2. Predictor elástico.

$$au_{n+1}^{\text{trial}} = c: e_{n+1}^{e^{\text{trial}}} \text{ donde } e_{n+1}^{e^{\text{trial}}} = \phi_*^{n+1} (E_{n+1} - E_n^p)$$

3. Verificación de la condición de fluencia

Si
$$\phi\left(\tau_{n+1}^{\text{trial}},\eta_{n+1}\right) \leq 0$$
 Entonces
 $\tau_{n+1} = \tau_{n+1}^{\text{trial}}$
 $e_{n+1}^p = \tilde{e}_n^p, \quad \tilde{e}_n^p = \phi_*^{n+1}(E_n^p)$

Si no

$$\begin{split} g_{n+1}^{\text{trial}} &= \| \operatorname{dev} \tau_{n+1}^{\text{trial}} \|^2 + \frac{1}{3} a_1 \operatorname{tr}^2 \left[\tau_{n+1}^{\text{trial}} \right] \\ \Delta \lambda_{n+1} &= \frac{1}{\alpha_{n+1}} - 1 \quad \text{donde} \quad \alpha_{n+1}^2 = \frac{\frac{2}{3} a_2 \sigma_y^2}{g_{n+1}^{\text{trial}}} \\ \tau_{n+1} &= \alpha_{n+1} \tau_{n+1}^{\text{trial}} \\ e_{n+1}^p &= (1 - \alpha_{n+1}) e_{n+1} + \alpha_{n+1} \tilde{e}_n^p, \qquad \tilde{e}_n^p = \phi_*^{n+1} (E_n^p) \end{split}$$

4. Matriz tangente consistente

$$\begin{split} c_{n+1}^{p} &= \alpha_{n+1} \mathbb{C} - \frac{1}{\frac{\partial \phi_{n+1}}{\partial \alpha_{n+1}}} \left[\frac{\partial \phi_{n+1}}{\partial (2J_{2})} A_{n+1} + \frac{\partial \phi_{n+1}}{\partial (I_{1}^{2})} B_{n+1} - \frac{\partial \phi_{n+1}}{\partial \eta_{n+1}} D_{n+1} \right] \\ \text{donde} \quad \mathbb{C}^{ijkl} &= \\ c^{ijkl} - 4\overline{\mu} \left[\delta^{ik} \left(e_{n+1}^{\text{trial}} \right)^{lj} + \delta^{jk} \left(e_{n+1}^{e^{\text{trial}}} \right)^{il} \right] - 2\overline{\lambda} \left[\delta^{ij} \left(e_{n+1}^{e^{\text{trial}}} \right)^{kl} + \delta^{ik} \delta^{jl} \operatorname{tr} \left[e_{n+1}^{e^{\text{trial}}} \right] \right] \\ A_{n+1} &= \tau_{n+1}^{\text{trial}} \otimes J_{n+1}^{\text{trial}} \quad B_{n+1} = 2\operatorname{tr} [\tau_{n+1}^{\text{trial}}] \tau_{n+1}^{\text{trial}} \otimes P_{n+1}^{\text{trial}} \quad D_{n+1} = 2\eta \tau_{n+1}^{\text{trial}} \otimes 1 \\ J_{n+1}^{\text{trial}} &= 2\operatorname{dev} [\tau_{n+1}^{\text{trial}}] \cdot \tau_{n+1}^{\text{trial}} + \operatorname{dev} [\tau_{n+1}^{\text{trial}}] : \mathbb{C}_{n+1} \\ P_{n+1}^{\text{trial}} &= \left[2\tau_{n+1}^{\text{trial}} + 1 : \mathbb{C}_{n+1} \right] \end{split}$$

Formulación matemática del modelo de compactación

modelo de fricción que permita simular los efectos producidos que resultan al extraer la pieza del molde. Estas consideraciones motivan a dotar al modelo de una herramienta numérica adicional que permita resolver problemas de contacto más general. La figura 3.3.a ilustra el problema de contacto durante la etapa de compactación y la figura 3.3.b durante la etapa de extracción. El conjunto Ω representa el material en polvo que se desea compactar, que aquí se analiza como un cuerpo deformable. Los cuerpos $M_1 \dots M_p$ representan el molde y los punzones que se utilizan durante la compactación. Esta primera etapa se diferencia de la etapa de extracción, en que los cuerpos $M_1 \dots M_p$ definen una región cerrada, que al final tendrá la forma de la pieza que se desea fabricar. En cambio durante la extracción, algunos de estos cuerpos se desplazan para permitir la expulsión de la pieza del molde. El contorno rígido se define entonces como la unión de los cuerpos $M_1 \dots M_p$, esto es:

$$M = \bigcup_{j=1}^{p} M_j \tag{3.4.1}$$

El problema general se formula como la minimización de un funcional sobre un espacio que contiene sólo los desplazamientos admisibles. Luego se estudian tres diferentes técnicas para la solución del problema, basadas en la teoría de la optimización: *penalización*, *multiplicadores de Lagranage* y *lagrangiano aumentado*.

3.4.1 El problema de contacto

Al igual que en la sección 3.3, el conjunto Ω representa el cuerpo deformable y la función φ la aplicación que describe su movimiento.

Sea $M \subset \mathbb{R}^N$ (N = 2,3) el conjunto definido en (3.4.1). Supóngase que el conjunto M es tal que existe una función escalar $g : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ que satisface:

$$egin{aligned} g(m{x}) &> 0 & \forall m{x} \in M \ g(m{x}) &= 0 & \forall m{x} \in \partial M \ g(m{x}) &< 0 & ext{en otro caso} \end{aligned}$$
 (3.4.2)

La función g caracteriza al conjunto M de tal forma que, dado un punto $x \in \mathbb{R}^N$, arbitrario, entonces dependiendo del valor de g(x) se puede determinar si el punto está o no dentro del conjunto M. Obsérvese que la zona admisible donde se localiza el cuerpo deformable se caracteriza porque $g(x) \leq 0$.

Denótese por Γ_C la porción de la frontera de Ω que puede estar en contacto con el contorno rígido. La condición de contacto unilateral sobre la porción Γ_C se define entonces como:

$$g(\boldsymbol{x}) \leq 0 \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{\Gamma}_{C}) \quad \mathrm{y} \quad \forall t \in [0,T]$$
 (3.4.3)

Cuadro 3.2b Integración de la ecuación constitutiva: flujo asociado

1. Actualización.

$$\begin{split} \varphi_{n+1} &= \varphi_n + \Delta U_{n+1}, \quad F_{n+1} = F_n + \text{GRAD } \Delta U_{n+1} \\ E_{n+1} &= \frac{1}{2} (F_{n+1}^T F_{n+1} - G), \quad \eta_{n+1} = \frac{\eta_o}{\det F_{n+1}} \end{split}$$

2. Predictor elástico.

$$au_{n+1}^{ ext{trial}} = c: e_{n+1}^{e^{ ext{trial}}} \quad ext{donde} \quad e_{n+1}^{e^{ ext{trial}}} = \phi_*^{n+1}(E_{n+1} - E_n^p)$$

3. Verificación de la condición de fluencia

Si
$$\phi\left(au_{n+1}^{\text{trial}},\eta_{n+1}
ight) \leq 0$$
 Entonces
 $au_{n+1} = au_{n+1}^{\text{trial}}$
 $e_{n+1}^p = e_n^p, \quad \tilde{e}_n^p = \phi_*^{n+1}(E_n^p)$

Si no

$$p_{n+1}^{\text{trial}} = \frac{1}{3} \text{tr}[\tau]_{n+1}^{\text{trial}}$$

$$\Delta \lambda_{n+1} \quad \text{raiz positiva de } (3.3.65)$$

$$\alpha_{n+1} = \frac{1}{1+4\overline{\mu}\Delta\lambda_{n+1}} \qquad \beta_{n+1} = \frac{1}{1+2\kappa a_1\Delta\lambda_{n+1}}$$

$$\tau_{n+1} = \alpha_{n+1} \text{dev } \tau_{n+1}^{\text{trial}} + \beta_{n+1} p_{n+1}^{\text{trial}} \mathbf{1}$$

$$e_{n+1}^p = \tilde{e}_n^p + 2\Delta\lambda_{n+1} \left[\text{dev } \tau_{n+1}^{\text{trial}} + \frac{1}{9}a_1 \text{tr} [\tau]_{n+1}^{\text{trial}} \mathbf{1} \right]$$

4. Matriz tangente consistente

$$\begin{split} c_{n+1}^{ep} &= \alpha_{n+1}\Lambda_{n+1} + \frac{1}{3}\beta_{n+1}\mathbf{1} \otimes P_{n+1}^{\text{trial}} - \frac{2}{3}\beta_{n+1}\text{tr}[\tau]I \\ &+ G_{\alpha\beta} \left[\frac{\partial \phi_{n+1}}{\partial (2J_2)}A_{n+1} + \frac{\partial \phi_{n+1}}{\partial (I_1^2)}B_{n+1} - \frac{\partial \phi_{n+1}}{\partial \eta_{n+1}}D_{n+1} \right] \\ \Lambda_{n+1} &= C_{n+1} + \frac{2}{3}\text{tr}[\tau_{n+1}^{\text{trial}}] I - \frac{1}{3}\mathbf{1} \otimes P_{n+1}^{\text{trial}} \\ C, \ P_{n+1}^{\text{trial}}, \ J_{n+1}^{\text{trial}} \quad \text{están definidos en el cuadro 3.2.a, y donde:} \\ A_{n+1} &= q_{n+1}^{\text{trial}} \otimes J_{n+1}^{\text{trial}} \quad B_{n+1} = 2\text{tr}[\tau_{n+1}^{\text{trial}}] \ q_{n+1}^{\text{trial}} \otimes P_{n+1}^{\text{trial}} \quad D_{n+1} = \eta \ q_{n+1}^{\text{trial}} \otimes \mathbf{1} \\ q_{n+1}^{\text{trial}} &= 4\overline{\mu}\alpha_{n+1}^{2} \text{dev } \tau_{n+1}^{\text{trial}} + 2\kappa a_{1}\beta_{n+1}^{2}p_{n+1}^{\text{trial}}\mathbf{1} \end{split}$$

Formulación matemática del modelo de compactación



Figura 3.3 a. Contacto durante la compactación, b. Contacto durante la extracción

lo que significa que ningún punto del cuerpo deformable puede penetrar la región definida por el cuerpo rígido. Considérese ahora las fuerzas de contacto, evidentemente la componente normal sólo puede ser de compresión:

$$t^N = -\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}} \ge 0 \tag{3.4.4}$$

donde σ es el tensor de Cauchy y \hat{n} la normal en el punto x (figura 3.4). Con base en la definición del primer tensor de Piola-Kirchhoff P, la expresión anterior y la fuerza t^T se pueden escribir como:

$$t^N = -\hat{n}\cdot P\cdot\hat{N}$$
 $t^T = P\cdot\hat{N} + t^N\hat{n} = 0$ (3.4.5)

donde \hat{N} es la normal en la configuración de referencia en el punto X (figura 3.4). La fuerza normal se puede escribir a su vez en términos del segundo tensor de Piola-Kirchhoff S recordando que $P = F \cdot S$.

En conjunto, las condiciones de contacto sobre la porción de la frontera Γ_C se pueden escribir como sigue [51]:

dado $X \in \overset{\cdot}{\Gamma}_C$ y $x = \varphi_t(X)$ su posición actual entonces:

۴.

1.
$$g(x) \le 0$$

2. $-t^{N}(x) \le 0$
3. $t^{N}(x)g(x) = 0$
4. $t^{T}(x) = 0$
(3.4.6)

donde t^N es la fuerza normal por unidad de superficie en el punto x y t^T , que por ahora se supone nula, es la fuerza tangencial.

La condición 1 de (3.4.6), como se dijo antes, establece la impenetrabilidad del contorno rígido por parte del cuerpo deformable. La condición 2, es una restricción sobre la fuerza normal para que sea de compresión. La tercera condición asegura que si no existe contacto entre el cuerpo deformable y el contorno rígido entonces g(x) < 0 y por lo tanto $t^N(x) = 0$, o sea que la fuerza de contacto se anula. La última condición elimina, por ahora, el efecto de la fricción.



Figura 3.4 Condición de contacto entre el cuerpo deformable y el contorno rígido

Por otro lado, el cuerpo Ω debe satisfacer la ecuación de equilibrio, la ecuación constitutiva y el resto de las condiciones en la frontera. El problema completo se puede formular de la siguiente forma:

Encontrar U(X,t), campo de desplazamientos, que satisfaga las siguientes ecuaciones:

Div
$$P + b = 0$$
 en Ω
 $P \cdot \hat{N} = \bar{t}$ en Γ_T (3.4.7)
 $U = \overline{U}$ en Γ_D

P es el primer tensor de Piola Kirchhoff, b representa la fuerza de volumen, $\Gamma_D \subset \partial \Omega$ es la porción de la superficie donde los desplazamientos \overline{U} son conocidos y Γ_T donde las tracciones \overline{t} son conocidas. Las ecuaciones (3.4.7) junto con las condiciones (3.4.6) y las ecuaciones constitutivas del cuadro 3.1 definen el problema estandar. Se procede ahora a definir los conjuntos necesarios para la formulación del problema variacional asociado con el problema estandar.

Defínase \mathcal{V} el conjunto de desplazamientos admisibles como:

Formulación matemática del modelo de compactación

$$\mathcal{V} = \left\{ \boldsymbol{\eta} : \boldsymbol{\Omega} \to \mathbb{R}^N | \boldsymbol{\eta}|_{\Gamma_D} = 0 \right\} \qquad N : 2,3$$
(3.4.8)

El conjunto \mathcal{K} se define como el conjunto de los desplazamientos admisibles que satisfacen las restricciones del contacto:

$$\mathcal{K} = \{ \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V} \mid g(\boldsymbol{\varphi}(X)) \leq 0 \quad \forall X \in \Gamma_C \}$$
 (3.4.9)

donde $\varphi : \Omega \to \mathbb{R}^N$ representa el movimiento admisible definido a partir del desplazamiento η dado por:

$$\varphi(X) = X + \eta(X)$$
 (3.4.10)

• Observación 3.4

Si $g(\varphi(\mathbf{X})) = 0$ y $\eta \in \mathcal{V}$ entonces se puede concluir que $\eta \cdot \hat{n}(\varphi(\mathbf{X})) \leq 0$. Para ver esto, supóngase que η es un desplazamiento admisible, entonces la primera variación de g en la dirección de η se puede escribir como:

$$\delta g(\varphi(\boldsymbol{X})) = \frac{dg}{d\alpha} (\varphi(\boldsymbol{X}) + \alpha \boldsymbol{\eta})|_{\alpha=0} = \nabla g(\varphi(\boldsymbol{X})) \cdot \boldsymbol{\eta}$$
(3.4.11)

obsérvese que g = 0 define una curva de nivel de la función g y por lo tanto, el gradiente es perpendicular a esta curva, que es precisamente la zona de contacto entonces:

$$\nabla g(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})) = \| \nabla g \| \, \hat{\boldsymbol{n}} \tag{3.4.12}$$

y por lo tanto :

$$\delta g(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})) = \|\nabla g\| \, \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{X}) \cdot \hat{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})) \tag{3.4.13}$$

esta última expresión debe ser tal que $\eta(\mathbf{X}) \cdot \hat{\mathbf{n}} \leq 0$ ya que si no fuera así, entonces $\delta g(\varphi(\mathbf{X})) > 0$ en el punto $\varphi(\mathbf{X})$ donde $g(\varphi(\mathbf{X})) = 0$, y por continuidad de la función g, se puede concluir que existe $h_0 > 0$, tal que, $g(\varphi(\mathbf{X}) + h\eta) > 0 \quad \forall h: 0 < h < h_0$, pero esto contradice el hecho que η es un desplazamiento admisible.

Multiplicando la ecuación (3.4.7.a) por $\eta \in \mathcal{K}$ e integrando sobre todo Ω se tiene que:

$$\int_{\Omega} [\operatorname{Div} \boldsymbol{P}] \cdot \boldsymbol{\eta} \, d\boldsymbol{X} + \int_{\Omega} \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{\eta} \, d\boldsymbol{X} = 0 \qquad (3.4.14)$$

Aplicando el teorema de la divergencia al primer término se tiene que:

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{P}(\boldsymbol{U}): \operatorname{GRAD}[\boldsymbol{\eta}] \, d\boldsymbol{X} - \int_{\Omega} \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{\eta} \, d\boldsymbol{X} - \int_{\Gamma} \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{P} \cdot \hat{\boldsymbol{N}} \, d\Gamma = 0 \qquad (3.4.15)$$

por la condición (3.4.7.b) y teniendo en cuenta la definición (3.4.8), se tiene que la integral sobre el contorno se puede escribir como $(\Gamma = \Gamma_T \cup \Gamma_D \cup \Gamma_C)$:

$$\int_{\Gamma} \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{P} \cdot \hat{\boldsymbol{N}} \, d\Gamma = \int_{\Gamma_T} \bar{\boldsymbol{t}} \cdot \boldsymbol{\eta} \, d\Gamma + \int_{\Gamma_C} \boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{P} \cdot \hat{\boldsymbol{N}} \, d\Gamma \qquad (3.4.16)$$

donde Γ_C denota la porción de la frontera que puede estar en contacto con el contorno rígido. Con base en la ecuación (3.4.5.b), el término $\eta \cdot P \cdot \hat{N}$ se puede escribir como $-t^N \eta \cdot \hat{n}$ y teniendo en cuenta (3.4.16) la ecuación (3.4.15) se escribe como:

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{P}(\boldsymbol{U}) : \operatorname{GRAD}[\boldsymbol{\eta}] \ d\boldsymbol{X} - \int_{\Omega} \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{\eta} \ d\boldsymbol{X} - \int_{\Gamma_T} \boldsymbol{\bar{t}} \cdot \boldsymbol{\eta} \ d\Gamma = -\int_{\Gamma_C} t^N \boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\boldsymbol{n}} \ d\Gamma \quad (3.4.17)$$

En los puntos $X \in \Gamma_C$ para los cuales no existe contacto, el producto $t^N \eta \hat{n}$ es nulo, ya que en este caso g(x) < 0 y por la condición (3.4.6.3) entonces $t^N = 0$. Pero si el contacto existe entonces g(x) = 0 y $t^N \eta \hat{n} \leq 0$. Esto es concecuencia de la observación 3.4, luego se tiene que [51]:

$$-\int_{\Gamma_C} t^N \,\boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\boldsymbol{n}} \, d\Gamma \geq 0 \qquad (3.4.18)$$

Entonces el problema variacional (3.4.17) asociado con (3.4.7) y las condiciones de contorno (3.4.6) es el siguiente:

Encontrar $U \in \mathcal{K}$ tal que:

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{P} : \operatorname{GRAD}[\boldsymbol{\eta}] \ d\boldsymbol{X} - \int_{\Omega} \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{\eta} \ d\boldsymbol{X} - \int_{\Gamma_T} \overline{\boldsymbol{t}} \cdot \boldsymbol{\eta} \ d\Gamma \ge 0 \quad \forall \ \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{K} \qquad (3.4.19)$$

Esta última, corresponde a una desigualdad variacional [52][53] a diferencia de las ecuaciones variacionales que se formulan normalmente.

Un estudio general de desigualdades variacionales como la (3.4.19) puede encontrarse en la referencia [53]. La solución del problema (3.4.19) por algún método directo es muy difícil debido a que los elementos del conjunto \mathcal{K} no se pueden obtener explícitamente.

En muchos casos, que dependen básicamente de la ecuación constitutiva que se emplee, el problema (3.4.19) se puede reformular como un problema de optimización. En este caso, el problema es encontrar el mínimo de un funcional sobre un conjunto convexo que contiene las restricciones. La ventaja de esta nueva formulación se encuentra en la posibilidad de utilizar técnicas muy conocidas en la teoría de Optimización para poder resolver el problema.

En los casos en que la ecuación constitutiva puede definirse a partir de un funcional de energía libre ψ como el definido en el apartado 3.3.2, el problema (3.4.19) se puede escribir como un problema de minimización de un funcional sobre un conjunto que contiene las restricciones. En este caso el problema de minimización consiste en encontrar U campo de desplazamientos admisibles, que satisface las restricciones debidas al contacto y que minimice el siguiente funcional J(U). El problema es:

Encontrar $\boldsymbol{U} \in \mathcal{K}$ tal que:

$$J(\boldsymbol{U}) = \min_{\boldsymbol{\eta} \in \mathcal{K}} J(\boldsymbol{\eta})$$
(3.4.20)

donde

$$J(\boldsymbol{\eta}) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \psi(\boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{X})) d\boldsymbol{X} - \int_{\Omega} \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{\eta} \, d\boldsymbol{X} - \int_{\Gamma_T} \boldsymbol{\bar{t}} \cdot \boldsymbol{\eta} dS \qquad (3.4.21)$$

 \mathcal{K} es el campo de desplazamientos admisibles que satisface la condición de contacto definido en (3.4.9) y b representa las fuerzas de volumen.

El problema (3.4.20) Corresponde a un problema de minimización con restricciones. En este caso la restricción viene especificada en el conjunto \mathcal{K} . Físicamente, el problema (3.4.22), se puede interpretar como la minimización de un funcional de energía, pero en este caso con la dificultad adicional, que los desplazamientos deben satisfacer ciertas restricciones. Los métodos que se describen a continuación tienen como objetivo central la eliminación de la restricción, formulando un problema equivalente y cuya solución sea abordable mediante el Método de los Elementos Finitos.

3.4.2 Método de Penalización

El problema general que se desea resolver es el siguiente:

Encontrar $u \in S$ tal que:

$$F(u) = \min_{v \in S} F(v)$$
(3.4.22)

donde $S \subset W$ es un subconjunto cerrado del espacio W y el funcional F es típicamente continuo, convexo y coercivo [52].

El método de penalización consiste en añadir a la función F una función \mathcal{P} de penalización, que tiene las siguientes características:

- $1. \qquad \mathcal{P}: \mathcal{W} \to {\rm I\!R}, \qquad {\rm convexa}$
- $2. \qquad \mathcal{P}(\boldsymbol{v}) \geq 0, \qquad \forall \ \boldsymbol{v} \in \mathcal{W}$
- 3. $\mathcal{P}(v) = 0$ si y solo si $v \in S$

El nuevo funcional $F_{\epsilon}(v): \mathcal{W} \to \mathbb{R}$ viene dado por:

$$F_{\epsilon}(\boldsymbol{v}) = F(\boldsymbol{v}) + \frac{1}{\epsilon} \mathcal{P}(\boldsymbol{v}) \qquad (3.4.23)$$

• Observación 3.5

 F_{ϵ} esta definida para todo valor de ϵ positivo ($\epsilon > 0$), además F_{ϵ} también es continua, convexa y coerciva.

El problema aproximado que se formula es:

Encontrar $u_{\epsilon} \in \mathcal{W}$ tal que:

$$F_{\epsilon}(u_{\epsilon}) = \min_{v \in \mathcal{W}} F_{\epsilon}(v)$$
(3.4.24)

que es un problema de minimización sin restricciones. La solución del problema (3.4.24) debe satisfacer la siguiente ecuación:

$$\nabla F_{\epsilon}(u_{\epsilon}) = \nabla F(u_{\epsilon}) + \frac{1}{\epsilon} \nabla P(u_{\epsilon}) = 0$$
(3.4.25)

La solución u_{ϵ} mejora la aproximación a la restricción en la medida que $\epsilon \to 0$, ya que penaliza cualquier valor diferente de cero de la función \mathcal{P} , que son precisamente los valores que violan la restricción. Un planteamiento riguroso del problema anterior incluyendo un estudio de la existencia y unicidad del problema, puede encontrarse en [52] y para problemas de dimensión finita ver [54][55].

• Aplicación al problema de contacto

Nuevamente se hace uso de la notación introducida en la sección 3.4.1. La definición de la función g en 3.4.2, es un buen candidato como función de penalización para el problema de contacto. Más precisamente, g(x) se puede definir como la distancia del punto x a la frontera de M. Pero el valor de la función de penalización debe anularse dentro de la zona admisible (donde $g(x) \leq 0$) entonces se propone la siguiente función:

$$h(\boldsymbol{x}) = \min_{\boldsymbol{y}: g(\boldsymbol{y}) \leq 0} \| \boldsymbol{x} - \boldsymbol{y} \| = \| \boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}} \|$$
(3.4.26)



Figura 3.5 Función de penalización

Esta función calcula la mínima distancia de cualquier punto del espacio a la frontera ∂M anulándose en las puntos de la región admisible $g(x) \leq 0$ (figura 3.5). El punto \overline{x} denota el lugar donde se alcanza el mínimo. La correcta definición de la función h, exige que la región factible $\{y : g(y) \leq 0\}$ sea convexa para que la solución del mínimo sea única.

En la práctica esta restricción es muy fuerte, por esta razón se extenderá este concepto a conjuntos localmente convexos pero sólo a nivel algorítmico. En el anexo A3, pueden encontrarse más detalles sobre el tema.

El problema de contacto se puede formular entonces de la siguiente forma:

Encontrar $U_{\epsilon} \in \mathcal{V}$ tal que:

$$J_{\epsilon}(U_{\epsilon}) = \min_{\boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}} J_{\epsilon}(\boldsymbol{\eta})$$
(3.4.27)

donde

$$J_{\epsilon}(\boldsymbol{\eta}) = J(\boldsymbol{\eta}) + \frac{1}{2\epsilon} \|h\|_{\Gamma_{C}}^{2} \qquad (3.4.28)$$

El funcional J fue definido en (3.4.21). La norma de la función h restringida a la porción de la frontera Γ_C viene dada por:

$$\|h\|_{\Gamma_{C}}^{2} = \int_{\Gamma_{C}} h^{2}(\varphi_{t}(\boldsymbol{X})) d\Gamma$$
(3.4.29)

La condición de punto extremo del funcional (3.4.27) exige que la siguiente derivada de Gateaux se anule:

$$\delta J_{\epsilon}(\boldsymbol{U}_{\epsilon};\boldsymbol{\eta}) = \lim_{\alpha \to 0} \frac{\partial J_{\epsilon}}{\partial \alpha} (\boldsymbol{U}_{\epsilon} + \alpha \boldsymbol{\eta}) \Big|_{\alpha = 0} = 0 \quad \forall \; \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}$$
(3.4.30)

Esta derivada es una generalización de la derivada direccional en espacios de dimensión finita. En este caso la derivada es en la dirección de η que es un

desplazamiento admisible. En cálculo variacional este concepto se conoce como la primera variación de J_{ϵ} respecto de los desplazamientos. El resultado de esta derivada aplicado al funcional (3.4.28) es el siguiente:

$$\delta J(\boldsymbol{U}_{\epsilon};\boldsymbol{\eta}) + \frac{1}{2\epsilon} \int_{\Gamma_{C}} 2h(\boldsymbol{\varphi}_{t}(\boldsymbol{X})) \delta h(\boldsymbol{\varphi}_{t}(\boldsymbol{X});\boldsymbol{\eta}) d\Gamma = 0 \qquad (3.4.31)$$

se puede probar (ver anexo A2), que la derivada direccional de la función h viene dada por:

$$\delta h(\boldsymbol{\varphi}_t(\boldsymbol{X}); \boldsymbol{\eta}) = \begin{cases} 0 & g(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})) < 0 \\ \\ \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{X}) \cdot \hat{\boldsymbol{n}} & g(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})) > 0 \end{cases}$$
(3.4.32)

entonces debe cumplirse que:

$$\delta J(\boldsymbol{U}_{\boldsymbol{\epsilon}};\boldsymbol{\eta}) + \frac{1}{\epsilon} \int_{\Gamma_{\boldsymbol{C}}} h(\boldsymbol{\varphi}_{t}(\boldsymbol{X})) [\boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{X}) \cdot \hat{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{x})] \ d\Gamma = 0 \quad \forall \ \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V} \quad (3.4.33)$$

El primer término de (3.4.33) se puede identificar con el término de la izquierda de la desigualdad variacional (3.4.19). Obsérvese que la desigualdad se transforma en igualdad al incluir la fuerza normal de contacto, modelada mediante la técnica de penalización, por lo tanto el problema que debe resolverse es:

Encontrar $U_{\epsilon} \in \mathcal{V}$ tal que:

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{P} : \operatorname{GRAD}[\boldsymbol{\eta}] \ d\boldsymbol{X} - \int_{\Omega} \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{\eta} \ d\boldsymbol{X} - \int_{\Gamma_T} \overline{t} \cdot \boldsymbol{\eta} \ d\Gamma + \frac{1}{\epsilon} \int_{\Gamma_C} h \ [\boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}] \ d\Gamma = 0 \qquad (3.4.34)$$

esta ecuación debe valer $\forall \eta \in \mathcal{V}$.

• Observación 3.6

La ecuación (3.4.34) se puede interpretar como la aplicación del principio de los trabajos virtuales al cuerpo Ω . El último sumando de la izquierda se interpreta como la aplicación de una fuerza externa en la dirección normal, de magnitud $t^N = K_{\epsilon}h(x)$, que es proporcional a la mínima distancia h(x) entre el punto x y el contorno rígido. La constante de proporcionalidad viene dada por $K_{\epsilon} = 1/\epsilon$. La solución U_{ϵ} es una aproximación a la solución del problema variacional (3.4.19). La solución correcta sólo se consigue en el límite cuando $\epsilon \to 0$.

3.4.3 Método de los multiplicadores de Lagrange aplicado al Contacto

Antes de aplicar esta técnica al problema de contacto se introduce el siguiente problema de minimización con restricciones de desigualdad en \mathbb{R}^n , $n \in \mathbb{N}$.

Supóngase que $\mathcal{F}: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ es una función continua, convexa y coerciva [52][54]. Supóngase que $\mathcal{M} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid r(x) \leq 0\}$ donde $r : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, $m \in \mathbb{N}$, es una función vectorial que representa las restricciones, en este caso de desigualdad. El problema es:

Encontrar $x \in \mathcal{M}$ tal que:

$$\mathcal{F}(x) = \min_{y \in \mathcal{M}} \mathcal{F}(y)$$
 (3.4.35)

Las condiciones necesarias de primer orden [54], para la solución de este problema, con restricciones de desigualdad, se conocen como condiciones de Kuhn-Tucker y establecen que si x es solución del problema (3.4.35) entonces existe un vector $\mu \in \mathbb{R}^m$ con $\mu \geq 0$ tal que:

$$\nabla \mathcal{F}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\mu}^{T} \cdot \nabla \boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$$

$$\boldsymbol{\mu}^{T} \cdot \boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$$
(3.4.35)

El vector μ se conoce como el vector, multiplicador de Lagrange asociado al problema (3.4.35)

• Aplicación al problema del contacto

La generalización de la técnica anterior, (ver [52]), consiste en extender los conceptos de convexidad, coercividad, existencia de puntos de silla, etc, a espacios de funciones permitiendo así, como en este caso, aplicar esta técnica a problemas de contacto y fricción.

La restricción de desigualdad a la que estan sometidos los desplazamientos admisibles se encuentra especificada en el conjunto \mathcal{K} . Se define el siguiente lagrangiano asociado al problema de contacto:

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\eta},\mu) = J(\boldsymbol{\eta}) + \int_{\Gamma_C} \mu \ g(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})) \ d\Gamma$$
(3.4.36)

donde $\eta \in \mathcal{V}$ y $\mu \in Q$. Éste último se define como:

$$Q = \{ \mu \in L^2(\Gamma_C) \mid \mu \ge 0 \}$$
(3.4.37)

El conjunto Q es el espacio de los multiplicadores de Lagrange y se interpreta como el conjunto de las fuerzas normales (de compresión) admisibles.

Antes de continuar, es necesario definir la función g explícitamente. En este caso se define g de la siguiente forma:

$$g(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} \| \boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}} \| & \text{si } \boldsymbol{x} \in M \\ 0 & \text{si } \boldsymbol{x} \in \partial M \\ - \| \boldsymbol{x} - \overline{\boldsymbol{x}} \| & \text{en otro caso} \end{cases}$$

donde \overline{x} es el punto sobre la frontera ∂M , donde se alcanza la mínima distancia entre x y ∂M . Se puede probar (ver anexo A2), que la primera variación de gse puede escribir como:

$$\delta g(oldsymbol{arphi}(oldsymbol{X});oldsymbol{\eta}) = oldsymbol{\eta}(oldsymbol{X})\!\cdot\!\hat{oldsymbol{n}}$$

El problema que se formula es el siguiente:

Encontrar $(U, \lambda^N) \in \mathcal{V} \times Q$ tales que satisfacen las siguientes condiciones de Kuhn-Tucker:

$$\int_{\Gamma_{C}} \delta J(\boldsymbol{U};\boldsymbol{\eta}) + \int_{\Gamma_{C}} \lambda^{N} \, \boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})) \, d\Gamma = 0 \qquad \forall \, \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}$$

$$\int_{\Gamma_{C}} \lambda^{N} g(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})) \, d\Gamma = 0$$

$$(3.4.38)$$

La primera ecuación corresponde a la derivada de Gateaux de \mathcal{L} respecto a los desplazamientos en la dirección η y la segunda establece que λ^N sólo puede ser diferente de cero si la restricción es activa, o sea si g = 0. Identificando el término $\delta J(U;\eta)$ con el término de la izquierda de la desigualdad variacional (3.4.19), entonces el problema que debe resolverse en este caso es:

Encontrar $(\boldsymbol{U}, \lambda^N) \in \mathcal{V} \times Q$ tal que:

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{P} : \operatorname{GRAD}[\boldsymbol{\eta}] \, d\boldsymbol{X} - \int_{\Omega} \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{\eta} \, d\boldsymbol{X} - \int_{\Gamma_T} \boldsymbol{\overline{t}} \cdot \boldsymbol{\eta} \, d\Gamma + \int_{\Gamma_C} \lambda^N [\boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}] \, d\Gamma = 0$$

$$\int_{\Gamma_C} \lambda^N g(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})) \, d\Gamma = 0$$
(3.4.39)

La ecuación (3.4.39.a) debe valer $\forall \eta \in \mathcal{V}$

• Observación 3.7

El multiplicador de lagrange λ^N , en la ecuación (3.4.39), se interpreta como el valor exacto de la fuerza normal por unidad de superficie que actúa sobre la porción Γ_C . Mientras que el método de penalización aproxima este término por $K_{\epsilon}h(x)$.

78

3.4.4 Lagrangiano Aumentado aplicado al problema del Contacto

El método del Lagrangiano Aumentado combina los métodos de penalización y multiplicadores de Lagrange para tratar de eliminar algunas de las desventajas que tienen los métodos por separado.

Siguiendo a Luenberger [54] se expondrá el método aplicándolo primero al caso con restricciones de igualdad y luego se generaliza a un problema de minimización con restricciones de desigualdad. El método se extenderá finalmente al caso de contacto.

Supóngase que $\mathcal{F} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ es una función continua, convexa y coerciva [52][54]. Supóngase además que:

$$oldsymbol{S} = \{oldsymbol{x} \in {
m I\!R}^n \mid oldsymbol{r}(oldsymbol{x}) = 0\}$$

El problema es encontrar $x \in S$ tal que:

$$F(x) = \min_{y \in S} \mathcal{F}(y)$$
(3.4.40)

Se define el siguiente funcional como el Lagrangiano aumentado correspondiente al problema (3.4.40):

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{\mu}) = \mathcal{F}(\boldsymbol{y}) + \boldsymbol{\mu}^T \cdot \boldsymbol{r}(\boldsymbol{y}) + \frac{1}{2} K_{\epsilon} |\boldsymbol{r}(\boldsymbol{y})|^2$$
(3.4.41)

donde K_{ϵ} es una constante positiva que hace las veces de penalizador. El nuevo problema es:

Encontrar $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ tal que:

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda}) = \min_{\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n} \max_{\boldsymbol{\mu}\in\mathbb{R}^m} \mathcal{L}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{\mu})$$
(3.4.42)

La solución (x, λ) es un punto de silla del Lagrangiano (3.4.41).

Visto como problema de penalización

El objetivo ahora es ver (3.4.42) como un problema de penalización. Para esto supóngase que se tiene el siguiente problema con μ fijo:

$$\min_{\boldsymbol{y}\in S} \left\{ \mathcal{F}(\boldsymbol{y}) + \boldsymbol{\mu}^T \cdot \boldsymbol{r}(\boldsymbol{y}) \right\}$$
(3.4.43)

Se puede probar fácilmente que si x es solución de (3.4.43) también lo es del problema (3.4.40) y viceversa. Por lo tanto el lagrangiano definido en (3.4.41) se puede pensar como el resultado de aplicar la técnica de penalización al problema

(3.4.43), que es equivalente al problema original (3.4.40). Aunque los problemas (3.4.43) y (3.4.40) sean equivalentes, la aplicación del método de penalización a los dos problemas lleva a resultados diferentes. La aplicación del método a (3.4.43) tiene como resultado una función de penalización exacta[†] (siempre y cuando se emplee el valor correcto del multiplicador λ), la función de penalización exacta es precisamente la ecuación (3.4.41). Para ver esto, supóngase que se reemplaza μ por λ en (3.4.41) entonces $\partial_y \mathcal{L}(y, \lambda)$ se anulará en el punto \overline{x} , que en principio es un valor aproximado a la solución x. Esto conduce a la siguiente ecuación:

$$\nabla \mathcal{F}(\overline{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \cdot \nabla r(\overline{x}) + K_{\epsilon} r(\overline{x}) \cdot \nabla r(\overline{x}) = \mathbf{0}$$
(3.4.44)

por otro lado, la aplicación del método de los multiplicadores de Lagrange, al problema inicial (3.4.40) conduce a las siguientes ecuaciones de Euler-Lagrange:

$$abla \mathcal{F}(x) + \lambda^T \cdot
abla r(x) = \mathbf{0}$$
 $r(x) = \mathbf{0}$
(3.4.45)

obsérvese que (x, λ) , solución de (3.4.45) (equivalentemente solución de (3.4.40)) también satisface la ecuación (3.4.44). O sea que el gradiente (3.4.44) se anula en el punto solución x entonces el lagrangiano (3.4.41) (reemplazando μ por λ) es una función de penalización exacta.

• Observación 3.8

El método de penalización aplicado directamentte al problema (3.4.40) transforma el problema en la minimización del siguiente funcional:

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{y}) + \frac{1}{2} K_{\epsilon} |\boldsymbol{r}(\boldsymbol{y})|^2 \qquad (3.4.46)$$

Es necesario que el parámetro de penalización $K_{\epsilon} \to \infty$ para que la aproximación a la solución mejore. Cuando se reemplaza μ por λ (que es el valor correcto del multiplicador de lagrange) en (3.4.41) entonces el mínimo de (3.4.41) es solución del problema original (3.4.40), para cualquier valor de $K_{\epsilon} > 0$ (Debido a que es una función de penalización exacta). Esto elimina entonces la necesidad de que $K_{\epsilon} \to \infty$, pero es conveniente mantenerlo moderadamente grande, para que penalice lo mejor posible la violación de la restricción.

[†] Función de penalización exacta, significa que el punto mínimo, solución del problema se obtiene para un valor finito del parámetro de penalización.

Esquema iterativo (algoritmo de Uzawa)

El esquema iterativo que se usa de forma estandar en teoría de Optimización, para la solución del problema (3.4.42) es el siguiente:

En la iteración k, dado λ_k el primer paso es encontrar x_k tal que minimice:

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{y}) + \boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{k}}^{T} \cdot \boldsymbol{r}(\boldsymbol{y}) + \frac{1}{2} K_{\epsilon} |\boldsymbol{r}(\boldsymbol{y})|^{2} \qquad (3.4.47)$$

el siguiente paso es la actualización de λ_{k+1} . El siguiente análisis motiva un esquema posible de actualización [54].

a) Sustitúyase μ por λ_k en (3.4.43) entonces el nuevo problema es:

$$\min_{\boldsymbol{y}\in\boldsymbol{S}}\left\{\mathcal{F}(\boldsymbol{y})+\boldsymbol{\lambda}_{k}^{T}\cdot\boldsymbol{r}(\boldsymbol{y})\right\}$$
(3.4.49)

Este problema es equivalente al problema inicial (3.4.40). La aplicación del método de los multiplicadores de Lagrange al problema (3.4.49) conduce a las siguientes ecuaciones de Euler-Lagrange:

$$abla \mathcal{F}(\boldsymbol{x}) + \left[oldsymbol{\lambda}_k^T + oldsymbol{ar{\mu}}^T
ight] \cdot
abla \boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}) = oldsymbol{0}$$
 $r(\boldsymbol{y}) = oldsymbol{0}$
(3.4.50)

pero la solución $[\lambda_k + \overline{\mu}, x]$ de estas ecuaciones, debe coincidir con la solución (λ, x) del problema inicial, ya que los problemas son equivalentes, entonces se concluye que:

$$\overline{\mu} = \lambda - \lambda_k \tag{3.4.51}$$

b) por otro lado, el lagrangiano (3.4.41), (reemplazando μ por λ_k) es una función de penalización del problema (3.4.43) entonces el multiplicador de Lagrange se puede aproximar por [54]:

$$K_{\epsilon} \boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}_k)$$
 (3.4.52)

entonces a partir de a) y b) se concluye que:

$$K_{\epsilon} \boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}_k) \approx \overline{\boldsymbol{\mu}} = \boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}_k$$
 (3.4.53)

esto justifica el siguiente esquema iterativo:

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k + K_{\epsilon} r(x_k)$$
(3.4.54)

Desde otro punto de vista, el anterior esquema iterativo se puede considerar como la busqueda del máximo, por el método de la máxima pendiente, de la función dual (ver [72]):

$$\phi(\boldsymbol{\lambda}) = \min\left\{\mathcal{F}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \cdot \boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}K_{\epsilon}|\boldsymbol{r}(\boldsymbol{x})|^2\right\}$$
(3.4.55)

Restricciones de desigualdad

El problema que se desea resolver es el siguiente:

$$\min_{g(\boldsymbol{x}) \leq 0} \mathcal{F}(\boldsymbol{x}) \tag{3.4.56}$$

Este problema se puede formular como el siguiente problema con restricciones de igualdad:

$$\min_{\substack{g(x)+v=0}} \mathcal{F}(x)$$

$$(3.4.57)$$

$$v > 0$$

Aplicando directamente lo estudiado en el caso de restricciones de igualdad, se formula la siguiente función dual:

$$\phi(\mu) = \min_{v \ge 0, x} \left\{ \mathcal{F}(x) + \mu \cdot [g(x) + v] + \frac{1}{2} K_{\epsilon} |g(x) + v|^2 \right\}$$
(3.4.58)

Para cada x fijo, la minimización sobre v se puede llevar a cabo analíticamente, si v > 0 entonces el punto mínimo es tal que la derivada de (3.4.58) respecto a v se anula, entonces v viene dado por:

$$v = \max\left[0, -g(\boldsymbol{x}) - \frac{\mu}{K_{\epsilon}}\right] = \langle -g(\boldsymbol{x}) - \frac{\mu}{K_{\epsilon}} \rangle \qquad (3.4.59)$$

donde <,> representa el simbolo de Macauley, que permite una notación más compacta. El reemplazo de la ecuación (3.4.59) en (3.4.58), permite escribir esta última como:

$$\phi(\mu) = \min_{\boldsymbol{x}} \left\{ \mathcal{F}(\boldsymbol{x}) + P_{K_{\epsilon}}(g(\boldsymbol{x}), \mu) \right\}$$
(3.4.60)

donde $P_{K_{\epsilon}}$ hace las veces de función de penalización dependiente de μ y que se define como:

$$P_{K_{\epsilon}}(g(\boldsymbol{x}),\mu) = \frac{1}{2K_{\epsilon}} < \mu + K_{\epsilon}g >^{2} - \mu^{2}$$
(3.4.61)

El problema final que debe resolverse es la maximización de la función dual (3.4.58):

$$\max_{\mu \ge 0} \{\phi(\mu)\} \tag{3.4.62}$$

la solución se encuentra siguiendo un esquema muy similar al estudiado en el caso de igualdad (método de Uzawa):

Partiendo de un elemento $\lambda^0 \in \mathbb{R}^+$ arbitrario,

se define el par $(\lambda^k, x^k) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^n, \ k \ge 0$ mediante las siguientes fórmulas:

calculo de
$$x^k$$
: $\min_{x} \left\{ \mathcal{F}(x) + P_{K_{\epsilon}}(g(x), \lambda^k) \right\}$
calculo de λ^{k+1} : $\lambda^{k+1} = \langle \lambda^k + K_{\epsilon}g(x^k) \rangle$ (3.4.63)

El punto x^k , solución de (3.4.63.a) viene caracterizado por la siguiente ecuación:

$$\nabla \mathcal{F}(\boldsymbol{x}^k) + \nabla P_{K_{\boldsymbol{\epsilon}}}(g(\boldsymbol{x}^k), \lambda^k) = \boldsymbol{0}$$
(3.4.64)

que se puede escribir como:

$$\nabla \mathcal{F}(\boldsymbol{x}^{k}) + \langle \lambda^{k} + K_{\epsilon}g(\boldsymbol{x}^{k}) \rangle \nabla g(\boldsymbol{x}^{k}) = 0 \qquad (3.4.65)$$

• Aplicación al problema de contacto

El lagrangiano aumentado correspondiente al problema de contacto es el siguiente:

$$L_{\epsilon}(\boldsymbol{\eta},\mu) = J(\boldsymbol{\eta}) + \frac{1}{2K_{\epsilon}} \int_{\Gamma_{C}} (\langle \mu + K_{\epsilon}g \rangle^{2} - \mu^{2}) d\Gamma \qquad (3.4.66)$$

El problema es por lo tanto, encontrar $(U_{\epsilon}, \lambda_{\epsilon}^N) \in \mathcal{V} \times Q$ tal que:

$$L_{\epsilon}(\boldsymbol{U}_{\epsilon}, \lambda_{\epsilon}^{N}) = \max_{\mu \in Q} \min_{v \in \mathcal{V}} \left\{ L_{\epsilon}(\boldsymbol{\eta}, \mu) \right\}$$
(3.4.67)

donde \mathcal{V} fue definido en (3.4.8) y Q en (3.4.37).

Para un valor fijo de μ , el problema de mínimo sobre \mathcal{V} viene caracterizado por la siguiente ecuación:

$$\delta J(\boldsymbol{U};\boldsymbol{\eta}) + \int_{\Gamma_C} \langle \lambda^N + K_{\epsilon}g(\boldsymbol{\varphi}_t(\boldsymbol{X})) \rangle \boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})) d\Gamma = 0 \qquad (3.4.68)$$

La ecuación (3.4.68) debe valer $\forall \eta \in \mathcal{V}$.

De forma similar a los casos de penalización y multiplicadores de Lagrange, el término $\delta J(U;\eta)$ puede identificarse con el lado izquierdo de la desigualdad variacional (3.4.19).

La adaptación del esquema iterativo descrito en el apartado anterior, al problema de contacto, adquiere la siguiente forma:

Supóngase que $\lambda_k^N(X)$ es conocido $\forall X \in \Gamma_C$, entonces el problema es encontrar $U_k \in \mathcal{V}$ campo de desplazamientos, tal que:

$$\delta J(\boldsymbol{U}_{k};\boldsymbol{\eta}) + \int_{\Gamma_{\boldsymbol{C}}} <\lambda_{k}^{N} + K_{\epsilon}g(\boldsymbol{\varphi}_{k}(\boldsymbol{X})) > \boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{\varphi}_{k}(\boldsymbol{X})) \ d\Gamma = 0 \qquad \forall \ \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V} \quad (3.4.69)$$

luego se procede a la actualización del multiplicador de Lagrange, siguiendo un esquema similar a (3.4.63.b):

$$\lambda_{k+1}^{N}(\boldsymbol{X}) = \langle \lambda_{k}^{N}(\boldsymbol{X}) + K_{\epsilon}g(\boldsymbol{\varphi}_{k}(\boldsymbol{X})) \rangle$$
(3.4.70)

El cuadro 3.3, resume el algoritmo resultante de la aplicación del método del lagrangiano aumentado al problema de contacto.

Cuadro 3.3 Método del Lagrangiano Aumentado aplicado al contacto 1. k = 0, $\lambda_0^N = \lambda_{inicial}^N \ge 0$ 2. Encontrar $U_k \in \mathcal{V}$ solución de: $\delta J(U_k; \eta) + \int_{\Gamma_C} \langle \lambda_k^N + K_{\epsilon}g(\varphi_k(X)) \rangle \eta \cdot \hat{n}(\varphi_k(X)) \ d\Gamma = 0$ 3. Si $||g||_{\Gamma_C}^2 \langle TOL$ Entonces FIN si no $\lambda_{k+1}^N = \langle \lambda_k^N + K_{\epsilon}g \rangle$ k = k+14. Volver al paso 2

La etapa 2 del cuadro 3.3, se puede reemplazar sin ninguna dificultad por el esquema iterativo de un problema no lineal. Se puede ver que este algoritmo se reduce en un caso al método de penalización y en otro al método de multiplicadores de Lagrange. Para esto supóngase primero que $\lambda^N = 0$

84

entonces la fuerza normal se aproxima por $K_{\epsilon} < g(x) >$ como en el caso de penalización. Mientras que si la restricción se cumple exactamente entonces se tiene que g(x) = 0 lo que implica que λ^N es el verdadero multiplicador de Lagrange.

El esquema iterativo del cuadro 3.3 permite ir acumulando el verdadero valor de la fuerza normal en la variable λ_k^N , de esta forma a medida que el número de iteraciones aumenta, el valor de λ_k^N tiende al verdadero valor del multiplicador y la restricción g(x) tiende a cero. De esta forma el valor de K_{ϵ} en esta expresión no necesita ser muy grande.

Otra alternativa es la solución directa del sistema (3.4.68), donde λ_N se convierte en una incognita adicional del problema a resolver. Esta técnica se conoce como método mixto [56][57].

3.5 TRATAMIENTO DEL CONTORNO: FRICCIÓN

3.5.1 El problema de la fricción

El fenómeno de la fricción entre cuerpos aparece como un efecto de resistencia al deslizamiento tangencial entre las superficies en contacto. Algunos de los parámetros que intervienen en dicho fenómeno son: Los tipos de material involucrados, la escala de tiempo y frecuencia del contacto, los efectos térmicos, la rugosidad, la historia de las cargas, la existencia de lubricante, el desgaste, etc. Esta gran variedad de parámetros hacen que un modelo general sea extremadamente complejo [65][64].

Durante el proceso de compactación de pulvimetales el efecto de la fricción aparece como la resistencia al deslizamiento del material en polvo debida al contacto con los punzones y las paredes del molde. Aunque las paredes del molde sean bastante finas, la fricción afecta notablemente el proceso de compactación [2][5][6].

El modelo empleado en esta tesis es del tipo fricción de Coulomb (fricción seca), donde se supone básicamente que, si existe un desplazamiento relativo entre las superficies en contacto, entonces la fuerza de fricción es proporcional a la fuerza normal. La constante de proporcionalidad es precisamente el coeficiente de fricción entre las superficies y depende de los tipos de material involucrados en el contacto. Como primera aproximación cualquier efecto térmico se supone despreciable.

A continuación siguiendo Curnier [65], Simo y Laursen [51] se describe el modelo utilizando muchos de los conceptos definidos en plasticidad clásica, lo que facilita su comprensión y análisis computacional. Esta primera formulación resulta ser directamente el método de penalización aplicado al problema de fricción.

3.5.2 Modelo de fricción: Método de penalización

• Cinemática

Un análisis cinemático del problema de contacto y fricción en el caso 3D, involucra el análisis del contacto y deslizamiento de una superficie sobre otra. Este problema general está fuera del alcance de este trabajo, por lo que se restringirá el problema al caso 2D. Sin embargo la condición de deslizamiento y la regla de flujo se describirán sin tener en cuenta esta restricción.

Sea $X \in \Gamma_C$ un punto de la frontera del cuerpo deformable que se supone está en contacto con el contorno rígido M (ver figura 3.6). Supóngase además que existe un intervalo de tiempo $(T_o, T_f) \neq \emptyset$ que depende de X durante el cual la partícula se desplaza sobre ∂M pero siempre permaneciendo en contacto con él durante todo el intervalo.

Sea $\alpha : [0, L_f] \to \mathbb{R}^2$ una curva parametrizada por longitud de arco que representa la porción de la frontera de M que permanece en contacto con la partícula X.



Figura 3.6 Contacto y fricción entre el cuerpo deformable y el contorno rígido

Que la curva esté parametrizada por longitud de arco, significa que la norma de la derivada de α respecto a su parámetro es igual a la unidad. Esto es,

$$\|\dot{\boldsymbol{\alpha}}(s)\| = 1 \quad \forall s \in (0, L_f)$$

El vector $\hat{t}(s) = \dot{\alpha}(s)$ representa la tangente a la curva en el punto $\alpha(s)$. La segunda derivada se escribe como: $\ddot{\alpha}(s) = \kappa(s)\hat{n}(s)$ donde $\kappa(s)$ es el valor de la curvatura en el punto $\alpha(s)$. Por convención se supondrá que la normal \hat{n} a la superficie del cuerpo deformable, apunta hacia el exterior del cuerpo (En la zona de contacto, los vectores normal al cuerpo deformable y al contorno rígido coinciden). El sentido del vector tangente \hat{t} se elige de tal forma que este sistema local (\hat{n}, \hat{t}) tenga la misma orientación del sistema cartesiano global (\hat{x}, \hat{y}) . La consecuencia inmediata de esta elección es que la curvatura tiene signo.

Supóngase que la partícula X se encuentra inicialmente en $\alpha(0)$ y un instante de tiempo después se encuentra en $\alpha(s)$ (ver figura 3.7). La hipótesis básica que se formula a continuación supone que el desplazamiento $u = \alpha(s) - \alpha(0)$ es la suma de dos términos, el primero que representa un desplazamiento elástico (reversible), en general pequeño y el segundo un deslizamiento (irreversible). Esta descomposición vectorial podría hacerse a nivel escalar utilizando para esto el parámetro s de la curva, pero esto conduciría a un modelo difícil de implementar. Por lo tanto la opción que se elige aquí es la siguiente descomposición aditiva (ver figura 3.7):

$$u(X,t) = u^{e}(X,t) + u^{d}(X,t)$$
 (3.5.1)

El vector u^c corresponde al desplazamiento elástico y u^d al deslizamiento sobre la superficie. La ecuación (3.5.1) lleva a la siguiente descomposición de la velocidad relativa en términos de una velocidad elástica y una velocidad de deslizamiento:

$$\dot{u}(X,t) = \dot{u}^e(X,t) + \dot{u}^d(X,t)$$



Figura 3.7 Descomposición aditiva del desplazamiento

Capítulo 3



Figura 3.8 Superficie de deslizamiento

• Observación 3.9

La letra u que representa el desplazamiento relativo al primer punto de contacto se elige en minúscula para no confundir con el desplazamiento total referido a la configuración inicial.

• Respuesta Elástica

Se supone que un incremento en la fuerza tangencial o de fricción es proporcional al incremento en el desplazamiento elástico u_e en la dirección tangente a la curva, o sea que:

$$\dot{t}^{T}(X,t) = -K_{T} [\dot{u}(X,t) - \dot{u}^{d}(X,t)] \cdot \hat{t}(t)$$
 (3.5.2)

La fuerza tangencial t^T se relaciona con el tensor de Cauchy y el primer tensor de Piola-Kirchhoff P, mediante las siguientes expresiónes:

$$t^T = \hat{t} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}} = \hat{t} \cdot \boldsymbol{P} \cdot \hat{\boldsymbol{N}}$$

donde \hat{N} es el vector normal a la superficie de referencia en el punto X y \hat{n} es la normal en el punto de contacto (ver figura 3.6). La constante K_T penaliza la diferencia entre la velocidad relativa y la velocidad de deslizamiento. En el caso límite (cuando $K_T \to \infty$) estos dos valores coinciden.

• Condición de deslizamiento

Esta condición equivale a la condición de fluencia en el caso de plasticidad. La condición se escribe como:

$$\theta(t) = |t^{T}| - \mu |t^{N}| \le 0$$
(3.5.3)

donde la fuerza por unidad de superficie t ha sido descompuesta como $t = (t^N, t^T)$. El término t^T corresponde a la componente tangente en el caso 2D y a la componente sobre el plano tangente en el caso 3D. El término t^N es la componente normal. La igualdad en la ecuación (3.5.3) define la superficie de deslizamiento. Esta superficie (ver figura 3.8), tiene forma de cono con vértice en el origen y se extiende en el sentido de la fuerza de compresión.

88
Los puntos en el interior del cono son estados de fuerzas que no producen deslizamiento, sólo un desplazamiento elástico (reversible). Cualquier estado de fuerzas en el exterior es inadmisible. Sólo puntos sobre las paredes del cono pueden producir deslizamiento. La pendiente de la directriz del cono es inversamente proporcional al coeficiente de fricción. Si $\mu = 0$ el cono se reduce a una línea entonces la fuerza de fricción es nula y sólo pueden existir deslizamientos. En la medida en que μ aumenta, el ángulo del cono aumenta y el estado de fuerzas de no deslizamiento aumenta. Generalizaciones de esta condición de deslizamiento pueden encontrarse en [65][56].

• Regla de flujo

La regla de flujo en el caso de fricción especifica en que dirección ocurre el deslizamiento. Si se siguieran exactamente los pasos dados en plasticidad clásica lo primero que se intentaría formular es una regla de flujo asociada, que en este caso carece de significado físico, ya que este vector de flujo tendría una componente en la dirección de la fuerza normal indicando que las superficies en contacto tienden a modificar su condición de contacto debido al deslizamiento. La regla de flujo que se formula es por tanto no asociada y de hecho en la dirección de la fuerza tangencial (ver figura 3.8.b):

$$\dot{u}^d = -\dot{\zeta} \frac{\partial \theta}{\partial t^T}$$
 $\dot{u}^d = -\dot{\zeta} \frac{\partial \theta}{\partial t^T} \hat{t} = -\dot{\zeta} \operatorname{sign}(t^T) \hat{t}$ (3.5.4)

La expresión de la izquierda se emplea en el caso 3D y la de la derecha en el caso 2D. La función sign(\cdot) representa la función signo. El término ζ es el parámetro de consistencia y al igual que en plasticidad está sujeto al las siguientes condiciones de Kuhn-Tucker:

$$\dot{\zeta} \geq 0, \qquad heta(t) \leq 0, \qquad \dot{\zeta} \theta(t) = 0 \tag{3.5.5}$$

El cuadro 3.4 resume las ecuaciones básicas del modelo de fricción.

3.5.3 Integración del modelo de fricción

La integración del modelo resumido en el cuadro 3.4 se realiza de forma similar a la expuesta en la sección 3.3.3.

Sea $[t_n, t_{n+1}]$ el subintervalo de tiempo de interés. Sea $X \in \Gamma_C$ un punto fijo de la frontera que se encuentra en contacto con el contorno rígido. Supóngase que las siguientes variables son conocidas en el instante t_n :

$$u_n(X), \quad u_n^d(X), \quad t_n^T(X)$$

Ya que el problema global está formulado en términos de los desplazamientos, se puede suponer que $\Delta u_{n+1}(X)$ es conocido. El problema aquí es calcular las Capítulo 3

Cuadro 3.4 Modelo de fricción: Penalización $u(X) = u^e(X) + u^d(X)$ $t = (t^N, t^T)$ $\dot{t}^T = -K_T [\dot{u} - \dot{u}^d] \cdot \hat{t}$ $\theta(t) = |t^T| - \mu |t^N| \le 0$ $\dot{u}^d = -\dot{\zeta} \frac{\partial \theta}{\partial t^T} \hat{t}$ $\dot{\zeta} \ge 0, \quad \theta(t) \le 0, \quad \dot{\zeta} \theta(t) = 0$

variables básicas en el tiempo t_{n+1} de tal forma que se satisfagan las ecuaciones del cuadro 3.4.

Los desplazamientos en t_{n+1} son :

$$\boldsymbol{u}_{n+1} = \boldsymbol{u}_n + \Delta \boldsymbol{u}_{n+1} \tag{3.5.6}$$

La integración implícita de la ecuación de flujo (3.5.4.b) se puede escribir como:

$$u_{n+1}^d = u_n^d - \Delta \zeta_{n+1} \operatorname{sign}(t_{n+1}^T) \hat{t}_{n+1}$$
(3.5.7)

donde sign(·) representa a la función signo. La componente tangencial t_{n+1}^T se calcula a partir (3.5.2) como:

$$t_{n+1}^{T} = t_{n}^{T} - K_{T} \left[\Delta u_{n+1} - \Delta u_{n+1}^{d} \right] \cdot \hat{t}_{n+1}$$
(3.5.8)

La componente en la dirección normal t_{n+1}^N se supone conocida del problema de contacto. Las condiciones de Kuhn-Tucker en forma discreta se escriben como:

$$\theta_{n+1} \le 0, \qquad \Delta \zeta_{n+1} \ge 0 \qquad \Delta \zeta_{n+1} \theta_{n+1} = 0 \tag{3.5.9}$$

• Predictor Elástico

Supóngase que el punto X no desliza, entonces la fuerza tangencial de prueba $t_{n+1}^{T^{\text{trial}}}$, se calcula como:

$$t_{n+1}^{T^{\text{trial}}} = t_n^T - K_T \,\Delta u_{n+1} \cdot \hat{t}_{n+1} \tag{3.5.10}$$

la condición de deslizamiento de prueba se define como:

$$\theta_{n+1}^{\text{trial}} = \theta(t_{n+1}^{T\text{ trial}}, t_{n+1}^{N}) = |t_{n+1}^{T\text{ trial}}| - \mu|t_{n+1}^{N}|$$
(3.5.11)

• Corrector Plástico

 $(1^{er} \ caso)$ Supóngase que $\theta_{n+1}^{\text{trial}} < 0$ entonces $\theta_{n+1} < 0$ y por la condición de Kuhn-Tucker (3.5.9.c) se tiene que $\Delta \zeta_{n+1} = 0$, o sea que $u_{n+1}^d = u_n^d$. Esto significa que no hay deslizamiento y por lo tanto la fuerza tangencial de prueba es correcta.

(2° caso) Supóngase que $\theta_{n+1}^{\text{trial}} > 0$ entonces se trata de un estado no admisible y por las condiciones de Kuhn-Tucker se concluye que $\Delta \zeta_{n+1} > 0$.

Reemplazando la expresión (3.5.7) en (3.5.8) y teniendo en cuenta la definición de $t_{n+1}^{T^{\text{trial}}}$, entonces la fuerza tangencial se puede escribir como:

$$t_{n+1}^{T} = t_{n+1}^{T^{\text{trial}}} - \Delta \zeta_{n+1} K_{T} \operatorname{sign}(t_{n+1}^{T})$$
(3.5.12)

se sabe que:

$$t_{n+1}^{T} = \operatorname{sign}(t_{n+1}^{T})|t_{n+1}^{T}|$$

entonces se puede concluir que:

(1)
$$\operatorname{sign}(t_{n+1}^{T}) = \operatorname{sign}(t_{n+1}^{T^{\operatorname{trial}}})$$

(2) $|t_{n+1}^{T^{\operatorname{trial}}}| = |t_{n+1}^{T}| + \Delta \zeta_{n+1} K_{T}$
(3.5.13)

de esta última expresión se obtiene que:

$$\Delta \zeta_{n+1} = \frac{1}{K_T} \left[|t_{n+1}^T| - |t_{n+1}^T| \right]$$
(3.5.14)

Cuadro 3.5 Integración del modelo de fricción: Penalización 1. Actualización $u_{n+1} = u_n + \Delta u_{n+1}$ $t_{n+1}^{T^{\text{trial}}} = t_n^T - K_T \Delta u_{n+1} \cdot \hat{t}_{n+1}$ $\theta_{n+1}^{\text{trial}} = \theta(t_{n+1}^{T^{\text{trial}}}, t_{n+1}^N) = |t_{n+1}^{T^{\text{trial}}}| - \mu |t_{n+1}^N|$ 2. Si $\theta_{n+1}^{\text{trial}} \leq 0$ entonces $t_{n+1}^T = t_{n+1}^{T^{\text{trial}}}$ $u_{n+1}^d = u_n^d$ Si no $t_{n+1}^T = \mu |t_{n+1}^N| \operatorname{sign}(t_{n+1}^{T^{\text{trial}}})$ $u_{n+1}^d = u_n^d - \frac{1}{K_T} \theta_{n+1}^{\text{trial}} \operatorname{sign}(t_{n+1}^T) \hat{t}_{n+1}$

• Observación 3.10

Reemplazando la ecuación (3.5.14) de $\Delta \zeta_{n+1}$ en la ecuación (3.5.12) se puede escribir t_{n+1}^T en su forma más conocida:

$$t_{n+1}^T = \mu |t_{n+1}^N| \operatorname{sign}(t_{n+1}^T)$$

A partir de la expresión anterior para t_{n+1}^T , se encuentra que $\Delta \zeta_{n+1}$ en (3.5.14) se puede escribir en términos de $\theta_{n+1}^{\text{trial}}$ de la siguiente forma:

$$\Delta \zeta_{n+1} = \frac{1}{K_T} \theta_{n+1}^{\text{trial}}$$

El cuadro 3.5 resume el algoritmo que se utiliza para integración del modelo de fricción. La contribución debida al problema de fricción a la matriz tangente, se ha calculado en el anexo A2.

3.5.4 Fricción : Multiplicadores de Lagrange

Al igual que en el caso de contacto se introduce una nueva variable λ^T (caso 2D) llamada multiplicador de Lagrange y un término adicional a la ecuación (3.4.38) que representa la fuerza de fricción. El problema nuevamente es buscar un punto de silla que se caracteriza por ser solución del siguiente sistema:

$$\begin{split} \delta J(\boldsymbol{U};\boldsymbol{\eta}) + \int\limits_{\Gamma_{C}} \lambda^{N} \; \boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\boldsymbol{n}} \; d\Gamma + \int\limits_{\Gamma_{C}} \lambda^{T} \; \boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\boldsymbol{t}} \; d\Gamma = 0 \qquad \forall \; \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V} \\ \int\limits_{\Gamma_{C}} \lambda^{N} g(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})) \; d\Gamma = 0 \end{split} \tag{3.5.15}$$

 $U \in \mathcal{V}$ y $\lambda^N \in Q$. Adicionalmente, λ^T debe satisfacer las siguientes condiciones: $\theta(\lambda^T \mid \lambda^N) = |\lambda^T| - \mu |\lambda^N| \leq 0$

$$egin{aligned} & (\lambda^{T},\lambda^{N}) = |\lambda^{T}| - \mu |\lambda^{N}| \leq 0 \ & \dot{u} = \dot{\zeta} rac{\partial heta}{\partial \lambda^{T}} \hat{t} = -\dot{\zeta} ext{sign}(\lambda^{T}) \hat{t} \ & \dot{\zeta} \geq 0 \ & \dot{\zeta} heta = 0 \end{aligned}$$

La ecuación (3.5.16.a), coincide con la condición de deslizamiento (3.5.3). La segunda establece que la velocidad relativa tangente debe coincidir con la velocidad de deslizamiento. Las otras dos, corresponden a las condiciones de Kuhn-Tucker aplicadas al parámetro $\dot{\zeta}$.

• Observación 3.11

Como destaca Simo en [51], la diferencia con el caso de penalización está en que aquí se exige que la velocidad relativa coincida con la velocidad de deslizamiento ((3.5.16.b)), mientras que con la técnica de penalización esta igualdad se penaliza mediante el término $\frac{1}{K_T}i^T$ de tal forma que la ecuación (3.5.16.b) se escribiría como:

$$\dot{u} - \dot{\zeta} \frac{\partial \theta}{\partial \lambda^T} = \frac{1}{K_T} \dot{t}^T$$

De forma similar al caso de penalización, la integración implícita del término de velocidad relativa se puede escribir a partir de (3.5.16.b) como :

$$u_{n+1} = u_n + \Delta \zeta_{n+1} \operatorname{sign}(\lambda_{n+1}^T) \hat{t}_{n+1}$$
(3.5.17)

Capítulo 3

donde $\Delta \zeta_{n+1} = \zeta_{n+1} \Delta t \ge 0$. Las condiciones de Kuhn-Tucker vienen dadas por:

$$\theta_{n+1} \le 0, \qquad \Delta \zeta_{n+1} \ge 0 \qquad \Delta \zeta_{n+1} \theta_{n+1} = 0$$
 (3.5.18)

(*Caso 1:*) Supóngase que $\Delta u_{n+1} = u_{n+1} - u_n \neq 0$ entonces a partir de (3.5.17) se concluye que: $\Delta \zeta_{n+1} > 0$, esto implica que:

$$\operatorname{sign}(\lambda_{n+1}^T) = \operatorname{sign}(\Delta u_{n+1}) \tag{3.5.19}$$

y por la condición de Kuhn-Tucker (3.5.18.c), se tiene que $\theta_{n+1} = 0$ entonces de (3.5.16.d) se concluye que:

$$|\lambda_{n+1}^{T}| = \mu |\lambda_{n+1}^{N}| \tag{3.5.20}$$

a partir de (3.5.19) y (3.5.20) se concluye que:



Figura 3.9 Fricción de Coulomb, caso 2D

(*Caso 2:*) Supóngase que $\Delta u_{n+1} = 0$ entonces $\Delta \zeta_{n+1} = 0$ y el valor de λ_{n+1}^T está indeterminado.

• Observación 3.12

Por error numérico es muy difícil que se tenga $\Delta u_{n+1} = 0$. En vez de esto lo que sucede a nivel numérico es que durante las iteraciones del problema no lineal, para pasar del tiempo t_n al tiempo t_{n+1} , el desplazamiento del punto oscila alrededor de la posición de equilibrio u_n , consecuentemente el sentido de la fuerza de fricción se alterna (ver figura 3.9).

El algoritmo que se describe a continuación [16] propuesto como aporte original en esta tesis, tiene por objeto evitar la oscilación a la que se hace referencia en la observación 3.11, y eliminar la indeterminación en el valor del multiplicador de Lagrange.

Sea $X \in \Gamma_C$ un punto del cuerpo deformable que se encuentra en contacto con el contorno rígido. Este punto tiene dos estados posibles: Activo ó inactivo.

Estado Activo significa que el punto puede deslizar sobre la superfie ∂M . Estado inactivo significa que $\Delta u_{n+1}^{(i)} = 0$ donde $\Delta u_{n+1}^{(i)} = u_{n+1}^{(i)} - u_n$. O sea que el desplazamiento incremental correspondiente a la i-esima iteración del problema no-lineal está restringido a la última posición de equilibrio.

El cambio de activo a inactivo se lleva a cabo si se detecta que el punto está oscilando alrededor de la posición de equilibrio. El cambio de inactivo a activo se realiza si el punto no satisface las condiciones de no deslizamiento, o sea si no satisface (3.5.16.a).

Sea $v_n = u_n \cdot \hat{t}_n$ el desplazamiento tangencial de equilibrio. Supóngase que se conocen:

$$\Delta v^{(i-1)} = \Delta u_{n+1}^{(i-1)} \cdot \hat{t}_n, \qquad \Delta v^{(i)} = \Delta u_{n+1}^{(i)} \cdot \hat{t}_n \qquad (3.5.22)$$

que corresponden a los desplazamientos incrementales de las dos últimas iteraciones (i-1), (i) del problema no lineal.

Si

$$\operatorname{sign}(\Delta v^{(i-1)}) \cdot \operatorname{sign}(\Delta v^{(i)}) < 0 \tag{3.5.23}$$

entonces se supone que el punto oscila alrededor del punto de equilibrio y se procede como se describió antes. Si el punto está inactivo, se define como fuerza tangencial de prueba, la componente tangencial de la fuerza interna:

$$\lambda^{T^{\text{trial}}} = F_{int}^{T}$$

mediante la condición (3.5.16.2) se verifica si el punto es efectivamente, un punto inactivo:

$$|\lambda^{T^{\text{trial}}}| - \mu |\lambda^{N}| < 0$$

si se satisface la desigualdad entonces la fuerza tangencial de prueba es correcta. Si no se satisface, entonces la fuerza tangencial se redefine como:

$$\lambda^T = \mu |\lambda^N| \operatorname{sign}(\lambda^T^{\operatorname{trial}})$$

y el punto se convierte en un punto activo en la siguiente iteración.

El cuadro 3.6 resume los pasos del anterior algoritmo.

Cuadro 3.6
Integración numérica del modelo de fricción:
Multiplicadores de Lagrange

$$\Delta v^{(i-1)} = \Delta u_{n+1}^{(i-1)} \cdot \hat{t}_n, \quad \Delta v^{(i)} = \Delta u_{n+1}^{(i)} \cdot \hat{t}_n$$
1. (Estado Activo)

$$s = \operatorname{sign}(\Delta v^{(i-1)}) \cdot \operatorname{sign}(\Delta v^{(i)})$$
Si $s > 0$ entonces

$$\lambda^{T^{(i+1)}} = -\mu |\lambda^{N^{(i+1)}}| \operatorname{sign}(\Delta v^{(i)})$$
Si $s \leq 0$ entonces

$$\Delta u_{n+1}^{(i+1)} = 0 \quad (\operatorname{inactivo en } i+1)$$
2. (Estado Inactivo)

$$\lambda^{T^{\operatorname{trial}}} = F_{int}^T \quad (\operatorname{fuerza interna } \operatorname{tangencial})$$
Si $|\lambda^{T^{\operatorname{trial}}}| - \mu |\lambda^{N^{(i+1)}}| < 0 \text{ entonces}$

$$\lambda^{T^{(i+1)}} = \lambda^{T^{\operatorname{trial}}}$$
Si no

$$\lambda^{T^{(i+1)}} = \mu |\lambda^{N^{(i+1)}}| \operatorname{sign}(\lambda^{T^{\operatorname{trial}}}) \quad (\operatorname{activo en } i+1)$$

3.5.5 Método del Lagrangiano Aumentado aplicado a la fricción

Al igual que en el caso de contacto, el método del Lagrangiano aumentado consiste en mezclar las técnicas de penalización y multiplicadores de Lagrange para eliminar las desventajas que los métodos tienen por separado. Siguiendo el trabajo de Simo [51], se presenta a continuación el algoritmo propuesto para el caso de fricción.

En este caso la verdadera fuerza de fricción t^T viene dada por:

$$t^T = p^T + \lambda^T \tag{3.5.24}$$

donde p^T corresponde a la contribución debida a la penalización y λ^T es el multiplicador de Lagrange. La fuerza de fricción t^T debe satisfacer las siguientes

ecuaciones:

$$\begin{aligned} \theta(t) &= |t^{T}| - \mu |t^{N}| \leq 0\\ \dot{u}_{d} &= -\zeta \frac{\partial \theta}{\partial t^{T}} \hat{t} = -\dot{\zeta} \operatorname{sign}(t^{T}) \hat{t} \end{aligned} \tag{3.5.25}$$

La ecuación (3.5.25.a) corresponde a la condición de deslizamiento, (3.5.25.b) es la misma que se usa en el caso de penalización. Por otro lado p^T que es el término que proviene de la penalización (ver (3.5.2)) viene dado por:

$$\dot{p}^T = -K_T \left[\dot{u} - \dot{u}^d \right] \cdot \hat{t} \tag{3.5.26}$$

A partir de (3.5.24) y de la ecuación (3.5.26) se tiene que

$$\dot{t}^T - \dot{\lambda}^T = -K_T \left(\dot{u} - \dot{u}^d \right) \cdot \hat{t}$$
(3.5.27)

Si la velocidad relativa \dot{u} coincide con la velocidad de deslizamiento \dot{u}^d entonces la variación de la fuerza de fricción \dot{t}^T coincide con $\dot{\lambda}^T$, pero si $\dot{\lambda}^T = 0$ se recupera el método de penalización.

• Observación 3.13

Como se dijo en la observación 3.11, lo que se penaliza es la diferencia entre la velocidad relativa \dot{u} y la velocidad de deslizamiento \dot{u}^d . En el método de penalización es necesario que $K_T \to \infty$ para mejorar la aproximación de la solución. Supóngase que se reemplaza $\dot{\lambda}^T$ en (3.5.27) por el valor correcto $(\lambda^T)^*$ del multiplicador, entonces el lado izquierdo de (3.5.27) se anula, esto es, $t^T = (\lambda^T)^*$ y por lo tanto la condición de las velocidades se cumple para cualquier valor de K_T . El método del lagrangiano aumentado permite ir mejorando la aproximación al valor correcto del multiplicador, de tal forma que el lado izquierdo de (3.5.27) se aproxima a cero sin necesidad de hacer que $K_T \to 0$, basta con que sea moderadamente grande para que mejore la convergencia. \Box

• Integración del nuevo modelo

Para la integración del modelo, se procede de forma similar a la descrita en el caso de penalización (sección 3.5.3). La integración implícita de las ecuaciones (3.5.27) y (3.5.25.b) se puede escribir de la siguiente forma:

$$t_{n+1}^{T} = t_{n}^{T} + \Delta \lambda_{n+1}^{T} - K_{T} \left[\Delta u_{n+1} - \Delta u_{n+1}^{d} \right] \cdot \hat{t}_{n+1}$$

$$\Delta u_{n+1}^{d} = -\Delta \zeta_{n+1} \operatorname{sign}(t_{n+1}^{T}) \hat{t}_{n+1}$$
(3.5.28)

Capítulo 3

donde $\Delta \zeta_{n+1} = \dot{\zeta}_{n+1} \Delta t$. Las condiciones de Kuhn-Tucker vienen dadas por:

$$\theta_{n+1} \le 0, \qquad \Delta \zeta_{n+1} \ge 0 \qquad \Delta \zeta_{n+1} \theta_{n+1} = 0$$

$$(3.5.29)$$

• Predictor elástico

Supóngase que $\Delta u_{n+1}^d = 0$ entonces se define la fuerza de fricción de prueba $t_{n+1}^{T^{\text{trial}}}$ como:

$$t_{n+1}^{T\,\text{trial}} = t_n^T + \Delta \lambda_{n+1}^T - K_T \left[\Delta u_{n+1} \cdot \hat{t}_{n+1} \right]$$
(3.5.30)

y la condición de deslizamiento de prueba como:

$$\theta_{n+1}^{\text{trial}} = \theta(t_{n+1}^{T^{\text{trial}}}, t_{n+1}^{N})$$
(3.5.31)

A partir de (3.5.28) y de la definición (3.5.30), la fuerza de fricción t_{n+1}^T se puede escribir en términos de $t_{n+1}^{T^{\text{trial}}}$ como:

$$t_{n+1}^{T} = t_{n+1}^{T^{\text{trial}}} - \Delta \zeta_{n+1} \operatorname{sign}(t_{n+1}^{T})$$
(3.5.32)

• Corrector plástico

 $(1^{er} \ Caso)$ Supóngase que $\theta_{n+1}^{\text{trial}} < 0$ entonces $\theta_{n+1} < 0$, y por la condición de Kuhn Tucker (3.5.29.c) se tiene que $\Delta \zeta_{n+1} = 0$. Reemplazando este valor en (3.5.32) se concluye que:

$$t_{n+1}^{T} = t_{n+1}^{T^{\text{trial}}}$$
(3.5.33)

 $(2^o\ Caso)$ Supóngase que $\theta_{n+1}^{\text{trial}} > 0$ entonces hay deslizamiento y como en el método de penalización se concluye que:

(1) sign
$$(t_{n+1}^T) = sign(t_{n+1}^T)$$

(2) $|t_{n+1}^T| = |t_{n+1}^T| + \Delta \zeta_{n+1} K_T$
(3.5.34)

Despejando el valor de $\Delta \zeta_{n+1}$ de (3.5.34.2) y haciendo uso de las ecuaciones (3.5.32) y (3.5.34.1) se tiene que la fuerza de fricción t_{n+1}^T se puede escribir como:

$$t_{n+1}^{T} = \mu |t_{n+1}^{N}| \operatorname{sign}(t_{n+1}^{T^{\operatorname{trial}}})$$
(3.5.35)

• Actualización del multiplicador

En contraste con el caso de contacto del apartado 3.4.4, la actualización del multiplicador de lagrange no se hace sobre su valor total si no sobre su incremento. Esto es consecuencia de que aquí intervienen ecuaciones de evolución con el tiempo mientras que en el problema de contacto el tiempo es indiferente [51].

A partir de (3.5.33) y (3.5.35) el valor de la fuerza de fricción en la k-esima iteración del problema no lineal se puede escribir como:

$$t_{n+1}^{T^{(k)}} = \begin{cases} t_{n+1}^{\text{trial}^{(k)}} & \text{si } \theta_{n+1}^{\text{trial}^{(k)}} < 0\\ \\ \mu \ |t_{n+1}^{N^{(k)}}| \ \text{sign}(t_{n+1}^{\text{trial}^{(k)}}) & \text{en otro caso} \end{cases}$$
(3.5.36)

donde

$$t_{n+1}^{\text{trial}^{(k)}} = t_n^T + \Delta \lambda_{n+1}^{T^{(k)}} - K_T \,\Delta u_{n+1}^{(k)} \cdot \hat{t}_{n+1}$$
(3.5.37)

Por otro lado si λ_{n+1}^T es el valor correcto del multiplicador de Lagrange entonces, $\Delta t_{n+1}^T = \Delta \lambda_{n+1}^T$. Esto motiva la actualización de $\Delta \lambda_{n+1}^T$ como:

$$\Delta \lambda_{n+1}^{T^{(k+1)}} = \Delta \lambda_{n+1}^{T^{(k)}}$$
(3.5.38)

donde el término $\Delta \lambda_{n+1}^{T^{(k)}}$ se calcula a partir de (3.5.37).

Supóngase que el valor de t_{n+1}^N de la ecuación (3.5.36) se calcula también mediante el método de Lagrangiano aumentado presentado en la sección 3.4 entonces para la correcta aplicación de (3.5.34) se deben tener en cuenta que los nuevos valores de los multiplicadores $\lambda_{n+1}^{T^{(k+1)}}, \lambda_{n+1}^{N^{(k+1)}}$ deben satisfacer la condición de deslizamiento (3.5.25).

Defínase $\Theta_{n+1}^{\text{trial}^{(k)}} = |t_{n+1}^{\text{trial}^{(k)}}| - \mu |\lambda_{n+1}^{N^{(k+1)}}|$ entonces supóngase en primer lugar que $\Theta_{n+1}^{\text{trial}^{(k)}} < 0$ entonces una mirada al primer caso en (3.5.36) sugiere que:

$$\Delta \lambda_{n+1}^{T^{(k+1)}} = \Delta \lambda_{n+1}^{T^{(k)}} - K_T \,\Delta u_{n+1}^{(k)} \cdot \hat{t}_{n+1}^{(k)}$$
(3.5.39)

En el otro caso, si $\Theta_{n+1}^{\text{trial}^{(k)}} > 0$ entonces el segundo caso de (3.5.33), restando a los lados t_n^T , sugiere que:

$$\Delta \lambda_{n+1}^{T^{(k+1)}} = \mu |\lambda_{n+1}^{N^{(k+1)}}| \operatorname{sign} \left(t_{n+1}^{\operatorname{trial}^{(k)}} \right) - t_n^T$$
(3.5.40)

Nótese que $t_{n+1}^{N^{(k)}}$ ha sido reemplazado en este caso por el multiplicador de lagrange $\lambda_{n+1}^{N^{(k+1)}}$. El siguiente algoritmo resume los pasos explicados anteriormente para la solución del problema de fricción mediante la técnica de Lagrangiano aumentado.

Cuadro 3.7 Integración del modelo de fricción: Lagrangiano Aumentado

1. Actualización

$$\lambda_{n+1}^{N^{(0)}} := \lambda_n^N, \qquad \Delta \lambda_{n+1}^{T^{(0)}} = 0, \qquad k = 0$$

2. Problema no-lineal:

Encontrar $u_{n+1}^{(k)}$ tal que $orall \, \eta \in \mathcal{V}$ se tiene que:

$$\delta J[\boldsymbol{u}_{n+1}^{(k)};\boldsymbol{\eta}] + \int_{\Gamma_{C}} <\lambda^{N^{(k)}} + K_{\epsilon}g(\varphi_{k}(\boldsymbol{X})) > \boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\boldsymbol{n}} \ d\Gamma + \int_{\Gamma_{C}} t_{n+1}^{\boldsymbol{\tau}^{(k)}} \boldsymbol{\eta} \cdot \hat{\boldsymbol{t}} \ d\Gamma = 0$$

 $t_{n+1}^{T^{(k)}}$ viene dado por (3.5.36) $t^{N^{(k)}} = \langle K_{\epsilon} a(\omega_{k}) + \lambda_{n+1}^{N^{(k)}} \rangle$

$$t_{n+1}^{N^{(k)}} = \langle K_{\epsilon}g(\varphi_k) + \lambda_{n+1}^{N^{(k)}} \rangle$$

3. si a. $\| < g > \|_{\Gamma_C}^2 < \text{TOL}_1$ (condición de contacto)

b.
$$\left\{ \| (u_{n+1}^{(k)} - u_n) \cdot \hat{t}_n \| < \text{TOL}_2, \text{ si } \theta_{n+1}^{(k)} (t_{n+1}^{\mathcal{I}^{(k)}}, t_{n+1}^{N^{(k)}}) < 0 \ \forall \ X \in \Gamma_C \right\}$$

Entonces

FIN

si no

$$\begin{split} \lambda_{n+1}^{N^{(k+1)}} &= <\lambda_{n+1}^{N^{(k)}} + K_{\epsilon} \ g > \\ t_{n+1}^{\text{trial}^{(k)}} &= t_{n}^{T} + \Delta \lambda_{n+1}^{T^{(k)}} - K_{T} \left[\Delta u_{n+1}^{(k)} \cdot \hat{t}_{n+1}^{(k)} \right] \\ \Theta_{n+1}^{\text{trial}^{(k)}} &= t_{n+1}^{\text{trial}^{(k)}} - \mu |\lambda_{n+1}^{N^{(k+1)}}| \\ \Delta \lambda_{n+1}^{T^{(k+1)}} &= \begin{cases} \Delta \lambda_{n+1}^{T^{(k)}} - K_{T} \Delta u_{n+1}^{(k)} \cdot \hat{t}_{n+1} & \text{si } \Theta_{n+1}^{\text{trial}^{(k)}} < 0 \\ \\ \mu \mid \lambda_{n+1}^{N^{(k+1)}} \mid \text{sign}(t_{n+1}^{\text{trial}^{(k)}}) - t_{n}^{T} & \text{en otro caso} \end{cases} \\ k = k+1 \end{split}$$

4. Continuar en etapa 2

ANEXO A1

CÁLCULO DEL TENSOR CONSTITUTIVO TANGENTE

El objetivo de este anexo es la derivación de una expresión para el tensor constitutivo tangente consistente, correspondiente a cada uno de los esquemas presentados en los cuadros 3.2a y 3.2b. Esta derivación se desarrolla en las secciones A1.1 y A1.2. La sección A1.3 contiene algunos de los cálculos necesarios para la obtención del tensor constitutivo tangente continuo definido al final de la sección 3.3.2.

A1.1 TENSOR CONSTITUTIVO TANGENTE : FLUJO NO ASO-CIADO

Se procede de la forma convencional [36][38], que consiste en realizar los cálculos en la configuración material y el resultado final se lleva a la configuración espacial mediante el operador push forward ϕ_*^{n+1} .

Las tensiones de prueba en la configuración espacial, vienen dadas por la siguiente expresión (ver (3.3.38.a)):

$$au_{n+1}^{\text{trial}} = c: e_{n+1}^{e^{\text{trial}}} \qquad e_{n+1}^{e^{\text{trial}}} = \phi_*^{n+1}(E_{n+1}^{e^{\text{trial}}})$$
 (A.1.1)

El tensor c es el tensor elástico de cuarto orden, el operador ϕ_*^{n+1} actúa dependiendo del carácter tensorial del argumento (ver anexo A4), en este caso lo hace de la siguiente forma:

$$e_{n+1}^{e^{ ext{trial}}} = \phi_*^{n+1}(E_{n+1}^{e^{ ext{trial}}}) = F_{n+1}^{-T} \cdot E_{n+1}^{e^{ ext{trial}}} \cdot F_{n+1}^{-1}$$

La ecuación (A.1.1.2) puede escribirse en la configuración material mediante el operador pull back ϕ_{n+1}^* como:

$$S_{n+1}^{\text{trial}} = \Xi_{n+1} : \phi_{n+1}^* (e_{n+1}^{e^{\text{trial}}})$$
 (A.1.2)

donde el tensor Ξ_{n+1} es el tensor elástico escrito en la configuración material, dado por:

$$\Xi_{n+1}^{abcd} = \phi_{n+1}^*(c) = (F_i^a)_{n+1}^{-1} (F_j^b)_{n+1}^{-1} (F_k^c)_{n+1}^{-1} (F_l^d)_{n+1}^{-1} c^{ijkl}$$
(A.1.3)

El tensor constitutivo tangente c_{n+1}^{ep} , se define como la derivada (derivada de Fréchet) del campo de tensiones respecto a las deformaciones en el tiempo t_{n+1} :

$$d\boldsymbol{\tau}_{n+1} = c_{n+1}^{ep} : de_{n+1}$$

El tensor c_{n+1}^{ep} se relaciona con el tensor constitutivo tangente de la configuración material mediante una expresión similar a la ecuación (A.1.3). El tensor de tensiones τ_{n+1} se define en términos de la siguiente función por partes (ver (3.3.39.a) y (3.3.40)):

En el primer caso, cuando $\phi(\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{ ext{trial}},\eta_{n+1}) < 0$ entonces el tensor constitutivo tangente c^{ep} es la derivada de las tensiones de prueba respecto a las deformaciones. El resultado de esta derivada, se resume en el siguiente lema:

♦ LEMA A1.1

La derivada del tensor de tensiones (A.1.1.a) respecto al tensor e_{n+1} viene dada por:

$$d\tau_{n+1}^{\text{trial}} = C_{n+1} : de_{n+1}$$
 (A.1.5)

donde el tensor constitutivo tangente C_{n+1}^{ijkl} , tangente viene dado por la siguiente expresión:

$$\frac{e^{ijkl} - 4\overline{\mu} \left[\delta^{ik} \left(e^{e^{trial}}_{n+1} \right)^{lj} + \delta^{jk} \left(e^{e^{trial}}_{n+1} \right)^{il} \right] - 2\overline{\lambda} \left[\delta^{ij} \left(e^{e^{trial}}_{n+1} \right)^{kl} + \delta^{ik} \delta^{jl} \operatorname{tr}[e^{e^{trial}}_{n+1}] \right]}{\operatorname{donde}} \qquad E^{e^{trial}}_{n+1} = E_{n+1} - E^{p}_{n} \qquad e^{e^{trial}}_{n+1} = F^{-T}_{n+1} E^{e^{trial}}_{n+1} \quad F^{-1}_{n+1} \qquad \Box$$

donde

En cualquier otro caso, se debe derivar la siguiente ecuación que calcula las tensiones corregidas:

$$oldsymbol{ au}_{n+1} = lpha_{n+1} oldsymbol{ au}_{n+1}^{ ext{trial}}$$

que en la configuración material se escribe como:

$$S_{n+1} = \alpha_{n+1} S_{n+1}^{\text{trial}}$$
 (A.1.6)

La derivada de (A.1.6) respecto a E_{n+1} se calcula mediante la regla de la cadena:

$$d\boldsymbol{S}_{n+1} = d\alpha_{n+1}\boldsymbol{S}_{n+1}^{\text{trial}} + \alpha_{n+1}d\boldsymbol{S}_{n+1}^{\text{trial}}$$

En la configuración espacial, esta ecuación se expresa como:

$$d\boldsymbol{\tau}_{n+1} = d\alpha_{n+1}\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}} + \alpha_{n+1}d\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}$$
(A.1.7)

El cálculo de la derivada de α_{n+1} respecto a las deformaciones es el objetivo del siguiente lema:

\Diamond LEMA A1.2

La derivada del parámetro α_{n+1} respecto a e_{n+1} viene dada por:

$$d\alpha_{n+1} = \frac{1}{\frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \alpha_{n+1}}} \left[-\frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial (2J_2)} J_{n+1}^{\text{trial}} - 2 \text{tr}[\tau] \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial I_1^2} P_{n+1}^{\text{trial}} + 2\eta_{n+1} \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \eta_{n+1}} \mathbf{1} \right] : de_{n+1}$$

donde J_{n+1}^{trial} y P_{n+1}^{trial} representan tensores de segundo orden que se definen como:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}_{n+1}^{\text{trial}} &= 2 \text{dev}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}] \cdot \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}} + \text{dev}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}] : \boldsymbol{C}_{n+1} \\ \boldsymbol{P}_{n+1}^{\text{trial}} &= \left[2 \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}} + 1 : \boldsymbol{C}_{n+1} \right] \end{aligned}$$

las derivadas de la función de fluencia Φ vienen dadas por las siguientes expresiones:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial (2J_2)} \end{bmatrix}_{n+1}^{\text{trial}} = \alpha_{n+1}^2$$
$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial I_1^2} \end{bmatrix}_{n+1}^{\text{trial}} = \frac{1}{9} a_1 \alpha_{n+1}^2$$
$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha} \end{bmatrix}_{n+1}^{\text{trial}} = 2\alpha_{n+1} \left[(2J_2) + \frac{1}{9} a_1 (I_1)^2 \right]_{n+1}^{\text{trial}}$$
$$\frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \eta_{n+1}} = \frac{1}{9} a_1' (\eta) (I_1^{\text{trial}})^2 - \frac{2}{3} a_2' (\eta) \sigma_y^2$$

El siguiente paso es reemplazar los resultados de los lemas A1.1, A1.2 en la ecuación A.1.7, se obtiene así la siguiente expresión para el tensor constitutivo tangente consistente:

$$d\tau_{n+1} = c_{n+1}^{ep} : de_{n+1} \tag{A.1.9}$$

$$c_{n+1}^{ep} = \alpha_{n+1}C_{n+1} - \frac{1}{\frac{\partial\phi_{n+1}}{\partial\alpha_{n+1}}} \left[\frac{\partial\phi_{n+1}}{\partial(2J_2)} A_{n+1} + \frac{\partial\phi_{n+1}}{\partial(I_2^2)} B_{n+1} - \frac{\partial\phi_{n+1}}{\partial\eta_{n+1}} D_{n+1} \right]$$

donde:

$$\boldsymbol{A}_{n+1} = \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}} \otimes \boldsymbol{J}_{n+1}^{\text{trial}} \qquad \boldsymbol{B}_{n+1} = 2\text{tr}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}]\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}} \otimes \boldsymbol{P}_{n+1}^{\text{trial}} \qquad \boldsymbol{D}_{n+1} = 2\eta\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}} \otimes 1$$

Para finalizar esta primera parte, se presentan las pruebas de los lemas A1.1 y A1.2 que consisten básicamente en la aplicación de la regla de la cadena.

DEMOSTRACIÓN DEL LEMA A1.1

La derivada de (A.1.2) respecto a las deformaciones E_{n+1} se puede expresar como:

$$dS_{n+1}^{\text{trial}} = \Xi_{n+1} : dE_{n+1}^{e^{\text{trial}}} + E_{n+1}^{e^{\text{trial}}} : d\Xi_{n+1}$$
(A.1.10)

donde $E_{n+1}^{e^{\text{trial}}} = E_{n+1} - E_n^p$. El tensor Ξ_{n+1} se puede escribir en términos del tensor C_{n+1} de la siguiente forma:

$$\Xi_{n+1} = \left[2\mu I_{C^{-1}} + \lambda C^{-1} \otimes C^{-1}\right]_{n+1} \tag{A.1.11}$$

donde $I_{C^{-1}}$ viene dado por:

$$(\mathbf{I}_{C^{-1}})^{abcd} = \frac{1}{2} \left[(C^{-1})^{ac} (C^{-1})^{bd} + (C^{-1})^{ad} (C^{-1})^{bc} \right]$$
(A.1.12)

Esta expresión corresponde a la aplicación de la fórmula (A.1.3) sobre el tensor elástico de la configuración deformada.

La derivada de $d \equiv_{n+1}$ respecto a E_{n+1} es:

$$d \Xi_{n+1} = [2\mu \ dI_{C^{-1}} + \lambda \ dG_{n+1}]_{n+1}$$
(A.1.13.a)

El tensor dG_{n+1} se define como:

$$dG_{n+1} = [dC^{-1} \otimes C^{-1} + C^{-1} \otimes dC^{-1}]_{n+1}$$
(A.1.13.b)

la derivada de $I_{C^{-1}}$ respecto a C se obtiene directamente de la aplicación de la regla de la cadena a la ecuación (A.1.12):

$$\begin{split} [dI_{C^{-1}}]^{abcd} &= \frac{1}{2} \left[dI_1^{acbd} + dI_2^{adbc} \right] \\ dI_1^{acbd} &= [dC^{-1}]^{ac} [C^{-1}]^{bd} + [C^{-1}]^{ac} [dC^{-1}]^{bd} \\ dI_2^{adbc} &= [dC^{-1}]^{ad} [C^{-1}]^{bc} + [C^{-1}]^{ad} [dC^{-1}]^{bc} \end{split}$$

$$(A.1.14)$$

La derivada de la inversa de C_{n+1} se obtiene aplicando la regla de la cadena a la identidad $C_{n+1}^{-1}C_{n+1} = 1$:

$$dC_{n+1}^{-1} = -C_{n+1}^{-1} dC_{n+1} C_{n+1}^{-1}$$

= $-2C_{n+1}^{-1} dE_{n+1} C_{n+1}^{-1}$ (A.1.15)

Reemplazando la ecuación (A.1.15.b) en la definición de dG_{n+1} , (A.1.13.b) se tiene que:

$$dG_{n+1} = -2\left[C^{-1}dEC^{-1}\otimes C^{-1} + C^{-1}\otimes C^{-1}dEC^{-1}\right]_{n+1}$$
(A.1.15.c)

Se puede probar que:

$$\phi_*^{n+1}(E_{n+1}^{e^{\text{trial}}}:d \Xi_{n+1}) = \phi_*^{n+1}(E_{n+1}^{e^{\text{trial}}}):\phi_*^{n+1}(d\Xi)$$

$$= e_{n+1}^{e^{\text{trial}}}:a_{n+1}$$
(A.1.16)

donde el tensor a_{n+1} de cuarto orden, viene dado por:

$$a_{n+1} = 2\overline{\mu}\phi_*^{n+1}(dI_{C^{-1}}) + \overline{\lambda}\phi_*^{n+1}(dG_{n+1})$$

Luego de aplicar el operador ϕ_*^{n+1} , el tensor a_{n+1} se puede escribir de la siguiente forma:

$$a_{n+1}^{ijkl} = -4\overline{\mu}(de^{ik}\ \delta^{jl} + \delta^{ik}\ de^{jl} + de^{il}\ \delta^{jk} + \delta^{il}\ de^{jk})_{n+1} - 2\overline{\lambda}(de^{ij}\ \delta^{kl} + \delta^{ij}\ de^{kl})_{n+1}$$

La ecuación (A.1.10), se escribe en la configuración espacial como:

$$d\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}} = c_{n+1} : d\boldsymbol{e}_{n+1} + \boldsymbol{e}_{n+1}^{\boldsymbol{e}^{\text{trial}}} : \boldsymbol{a}_{n+1}$$
(A.1.17)

la ecuación anterior se puede reescribir de tal forma que:

$$d\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}} = \mathbb{C}_{n+1} : de_{n+1}$$
(A.1.18)

donde C viene dado por:

$$\mathbf{C}^{ijkl} = c^{ijkl} - 4\overline{\mu} \left(\delta^{ik} \left(e^{e^{\text{trial}}}_{n+1} \right)^{lj} + \delta^{jk} \left(e^{e^{\text{trial}}}_{n+1} \right)^{il} \right) - 2\overline{\lambda} \left(\delta^{ij} \left(e^{e^{\text{trial}}}_{n+1} \right)^{kl} + \delta^{ik} \delta^{jl} \operatorname{tr} e^{e^{\text{trial}}}_{n+1} \right)$$

DEMOSTRACIÓN DEL LEMA A1.2

La derivada se calcula empleando la condición de persistencia en su forma discreta, dada por:

$$\Delta \lambda_{n+1} d\Phi_{n+1} = 0 \qquad \Delta \lambda_{n+1} > 0 \qquad (A.1.19)$$

Linealización del primer invariante

La traza I_1 del tensor τ en la configuración material se calcula como:

$$I_1 = \tau_{ii} = F_{ik} S_{kl} F_{li}^T = C : S$$
(A.1.20)

por lo tanto la derivada de I_1^2 respecto a E es:

,

$$d[I_1^2] = 2(\boldsymbol{C}:\boldsymbol{S})\left[2\boldsymbol{S} + \boldsymbol{C}:\frac{\partial \boldsymbol{S}}{\partial \boldsymbol{E}}\right]:d\boldsymbol{E}$$
(A.1.21)

Escribiendo esta expresión en términos de la tensión de prueba en el instante t_{n+1} se tiene que:

$$d[I_1^2]_{n+1}^{\text{trial}} = 2(C_{n+1}:S_{n+1}^{\text{trial}}) \left[2S + C_{n+1}:\frac{\partial S}{\partial E}\right]_{n+1}^{\text{trial}} : dE_{n+1}$$
(A.1.22)

La ecuación (A.1.22) en la configuración espacial se escribe como:

$$d[I_{1}^{2}]_{n+1}^{\text{trial}} = 2 \operatorname{tr}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}] \boldsymbol{P}_{n+1}^{\text{trial}} : d\boldsymbol{e}_{n+1}$$

$$\boldsymbol{P}_{n+1}^{\text{trial}} = 2\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}} + 1 : \boldsymbol{C}_{n+1}$$
(A.1.23)

Linealización del segundo invariante del desviador

Defínase J_2 como el segundo invariante del tensor desviador. Este se puede escribir respecto a las tensiones en la configuración material mediante la siguiente fórmula:

$$2J_{2} = \| \operatorname{dev} \boldsymbol{\tau} \|^{2} = \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\tau} - \frac{1}{3} [\operatorname{tr} \boldsymbol{\tau}]^{2}$$

= $CS : CS - \frac{1}{3} [C : S]^{2}$
= $\| \operatorname{DEV} S \|_{C}^{2}$ (A.1.24)

Este resultado se puede obtener también, llevando el tensor desviador a la configuración material:

$$DEV[S] = S - \frac{1}{3}[C:S]C^{-1}$$
 (A.1.25)

y calculando la norma de este via el tensor C_{n+1} , esto es:

$$\| \text{DEV } \boldsymbol{S} \|_{\boldsymbol{C}}^{2} = [\boldsymbol{C} \cdot \text{ DEV } [\boldsymbol{S}]] : [\boldsymbol{C} \cdot \text{DEV } [\boldsymbol{S}]]$$
(A.1.26)

La derivada de la ecuación (A.1.24) respecto a E_{n+1} es la siguiente:

$$d[2J_2] = 2 \frac{\partial \| \operatorname{DEV} S \|_C^2}{\partial E} : dE$$

= $\left[2 \operatorname{DEV}[S] \cdot C \cdot S + [C \cdot S \cdot C] : \frac{\partial S}{\partial E} \right] : dE$ (A.1.27)

La derivada anterior se escribe en la configuración espacial y en términos de las tensiones de prueba del instante t_{n+1} como:

$$d[2J_2]_{n+1} = J_{n+1}^{\text{trial}} : de_{n+1} J_{n+1}^{\text{trial}} = 2[2\text{dev}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}] \cdot \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}} + \text{dev}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}] : \boldsymbol{C}_{n+1}]$$
(A.1.28)

El tensor \mathbb{C}_{n+1} se ha calculado en el lema A1.1.

Linealización de la densidad relativa

La densidad relativa se puede escribir en términos de C_{n+1} como:

$$\eta_{n+1}^2 = \frac{\eta_o^2}{Det \ C_{n+1}} \tag{A.1.29}$$

entonces la derivada respecto a C_{n+1} viene dada por:

$$\left[\frac{d\eta}{dC}\right]_{n+1} = -\eta_{n+1} \ C_{n+1}^{-1}$$

Esta derivada se basa en el siguiente resultado: Sea $\varphi(A)$ una función de variable tensorial $A \in \mathcal{T}^{\dagger}$ definida como:

$$arphi(oldsymbol{A}) = \mathrm{Det}(oldsymbol{A}) \qquad orall oldsymbol{A} \ \in \ \mathcal{T}$$

entonces la derivada de φ respecto de A viene dada por [47]:

$$D\varphi(\boldsymbol{A})[\boldsymbol{U}] = \operatorname{Det}(\boldsymbol{A})\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{U}\boldsymbol{A}^{-1}
ight] \qquad orall \ \boldsymbol{U} \in \mathcal{T}$$

[†] \mathcal{T} es el espacio de todos los tensores de orden 2.

Anexo A1

La derivada de la densidad relativa respecto a las deformaciones es:

$$d\eta_{n+1} = -\eta_{n+1} \left[C_{n+1}^{-1} : dE_{n+1} \right]$$
(A.1.30)

que a su vez se escribe en la configuración espacial como:

$$d\eta_{n+1} = -\eta_{n+1} \left[1 : de_{n+1} \right]$$
(A.1.31)

Condición de persistencia

La función de fluencia en la configuración material toma la siguiente forma:

$$\Phi_{n+1} = \Phi(S_{n+1}, \eta_{n+1})$$

= $\|\text{DEV} S_{n+1}\|^2 + \frac{1}{9}a_1(\eta_{n+1})[\text{TR} S_{n+1}]^2 - \frac{2}{3}a_2(\eta_{n+1})\sigma_y^2 = 0$ (A.1.32)

Reemplazando (A.1.6) en (A.1.32) y escribiendo esta última en términos de los invariantes, se tiene que:

$$\Phi_{n+1} = \alpha_{n+1}^2 \left[(2J_2) + \frac{1}{9} a_1 I_1^2 \right]_{n+1}^{\text{trial}} - \frac{2}{3} a_2 \sigma_y^2 = 0$$

La condición de persistencia se escribe como:

$$d\Phi_{n+1} = \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial (2J_2)} d[2J_2]_{n+1}^{\text{trial}} + \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial I_1^2} d[I_1^2]_{n+1}^{\text{trial}} + \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \alpha_{n+1}} d\alpha_{n+1} + \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \eta_{n+1}} d\eta_{n+1} = 0$$
(A.1.33)

Las expresiones para las derivadas del primer y segundo invariante al igual que la densidad relativa vienen dadas por (A.1.23), (A.1.28), (A.1.31). Las derivadas restantes vienen dadas por las siguientes expresiones:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial (2J_2)} \end{bmatrix}_{n+1}^{\text{trial}} = \alpha_{n+1}^2$$
$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial I_1^2} \end{bmatrix}_{n+1}^{\text{trial}} = \frac{1}{9} a_1 \alpha_{n+1}^2$$
$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha} \end{bmatrix}_{n+1}^{\text{trial}} = 2\alpha_{n+1} \left[(2J_2) + \frac{1}{9} a_1 (I_1)^2 \right]_{n+1}^{\text{trial}}$$

la derivada $\frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \eta_{n+1}}$ viene dada por:

$$\frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \eta_{n+1}} = \alpha_{n+1}^2 \frac{1}{9} a_1'(\eta) (I_1^{\text{trial}})^2 - \frac{2}{3} a_2'(\eta) \sigma_y^2$$

La derivada de α_{n+1} se encuentra, despejando $d\alpha_{n+1}$ de la ecuación (A.1.33) cuyo resultado se escribe a continuación como:

$$d\alpha_{n+1} = \frac{1}{\frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \alpha_{n+1}}} \left[-\frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial (2J_2)} J_{n+1}^{\text{trial}} - 2 \operatorname{tr}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}] \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial I_1^2} \boldsymbol{P}_{n+1}^{\text{trial}} + 2\eta_{n+1} \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \eta_{n+1}} \boldsymbol{1} \right] : d\boldsymbol{e}_{n+1}$$

A1.2 TENSOR CONSTITUTIVO TANGENTE : FLUJO ASO-CIADO

Al igual que en el caso de flujo no asociado, los cálculos se realizan en la configuración material y el resultado final se lleva a la configuración espacial mediante el operador ϕ_*^{n+1} . El tensor de tensiones viene dado por el siguiente lema:

♦ LEMA A 1.3

El tensor de tensiones se puede escribir en términos de la siguiente función definida por partes:

$$\boldsymbol{\tau}_{n+1} = \begin{cases} \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}} & \phi(\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}, \eta_{n+1}) < 0 \\ \\ \alpha_{n+1} \text{dev}[\boldsymbol{\tau}]_{n+1}^{\text{trial}} + \beta_{n+1} p_{n+1}^{\text{trial}} \mathbf{1} & \phi(\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}, \eta_{n+1}) \ge 0 \end{cases}$$
(A.2.1)

donde α_{n+1} y β_{n+1} vienen dados por:

$$\alpha_{n+1} = \frac{1}{1 + 4\overline{\mu}\Delta\lambda_{n+1}} \qquad \beta_{n+1} = \frac{1}{1 + 2\kappa a_1\Delta\lambda_{n+1}} \qquad (A.2.2)$$

El tensor de tensiones de prueba viene dado por (A.1.1) y p_{n+1}^{trial} se define como un tercio del primer invariante de las tensiones.

(1) Suponga que $\phi(\tau_{n+1}^{\text{trial}}, \eta_{n+1}) < 0$ entonces el tensor constitutivo tangente se obtiene directamente de la aplicación del lema A1.1.

(2) Suponga que $\phi(\tau_{n+1}^{\text{trial}}, \eta_{n+1}) > 0$ entonces el tensor constitutivo tangente, en este caso se obtiene derivando objetivamente la expresión (A.2.1.b) en términos de las deformaciones. Esta derivada se puede escribir como:

Anexo A1

$$d\boldsymbol{\tau}_{n+1} = \alpha_{n+1} d \left[\operatorname{dev} \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\operatorname{trial}} \right] + d\alpha_{n+1} \operatorname{dev} \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\operatorname{trial}} + \beta_{n+1} d \left[p_{n+1}^{\operatorname{trial}} \right] \mathbf{1} + d\beta_{n+1} p_{n+1}^{\operatorname{trial}} \mathbf{1} - \frac{2}{3} \beta_{n+1} \operatorname{tr}[\boldsymbol{\tau}]_{n+1} de_{n+1} \qquad (A.2.3)$$

Derivada de la presión

El término de presiones se define como $p^{\text{trial}} = \frac{1}{3}I_1^{\text{trial}}$, entonces basados en el resultado obtenido en (A.1.23), la derivada se escribe como:

$$dp_{n+1}^{\text{trial}} = \frac{1}{3} P_{n+1}^{\text{trial}} : de_{n+1}$$
 (A.2.4)

donde el tensor P_{n+1}^{trial} esta definido en (A.1.23.b).

Derivada del tensor desviador

El tensor desviador en la configuración material viene dado por (A.1.25). Su derivada respecto a las deformaciones se escribe como:

$$d\left[\text{DEV}\boldsymbol{S}_{n+1}^{\text{trial}}\right] = d\boldsymbol{S}_{n+1}^{\text{trial}} - \frac{1}{3} \left[dI_{n+1}^{\text{trial}} \ \boldsymbol{C}_{n+1}^{-1} + I_{n+1}^{\text{trial}} \ d\boldsymbol{C}_{n+1}^{-1} \right]$$
(A.2.5)

El siguiente paso es reemplazar la ecuación (A.1.15) en (A.2.5) y llevar el resultado a la configuración espacial mediante el operador ϕ_*^{n+1} . Finalmente, la aplicación del lema 1, conduce al siguiente resultado:

$$d [\operatorname{dev} \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\operatorname{trial}}] = \boldsymbol{\Lambda}_{n+1} : de_{n+1} \\ = \left[\boldsymbol{C}_{n+1} + \frac{2}{3} \operatorname{tr}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\operatorname{trial}}] \ \boldsymbol{I} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \boldsymbol{P}_{n+1}^{\operatorname{trial}} \right] : de_{n+1}$$
(A.2.6)

Condición de persistencia

Las otras dos derivadas $d\alpha_{n+1}$ y $d\beta_{n+1}$ se obtienen a partir de la condición de persistencia. La función de fluencia en la configuración material viene dada por:

$$\Phi_{n+1} = \Phi(S_{n+1}, \eta_{n+1})$$

= $\alpha_{n+1}^2 [2J_2^{\text{trial}}] + \beta_{n+1}^2 a_1(\eta_{n+1}) [p_{n+1}^{\text{trial}}]^2 - \frac{2}{3} a_2(\eta_{n+1}) \sigma_y^2 = 0$ (A.2.7)

entonces la condición de persistencia se formula como:

$$d\Phi_{n+1} = \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial (2J_2)} d[2J_2]_{n+1}^{\text{trial}} + \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial I_1^2} d[I_2^2]_{n+1}^{\text{trial}} +$$

$$\frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \alpha_{n+1}} d[\alpha_{n+1}] + \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \beta_{n+1}} d[\beta_{n+1}] + \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \eta_{n+1}} d\eta_{n+1} = 0 \qquad (A.2.8)$$

Las derivadas del primer y segundo invariante vinen dadas por (A.1.23) y (A.1.28) respectivamente. Las derivadas de la izquierda de cada uno de los sumandos vienen dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial (2J_2)} &= \alpha_{n+1}^2 \\ \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial I_1^2} &= \frac{1}{9} \beta_{n+1}^2 \mathbf{a}_1(\eta_{n+1}) \\ \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \alpha_{n+1}} &= 2\alpha_{n+1} [2J_2] \\ \frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \beta_{n+1}} &= 2\mathbf{a}_1(\eta_{n+1}) \beta_{n+1} [p_{n+1}^{\text{trial}}]^2 \end{aligned}$$
(A.2.9)

En este caso la derivada $\frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \eta_{n+1}}$ viene dada por:

$$\frac{\partial \Phi_{n+1}}{\partial \eta_{n+1}} = \left[\beta_{n+1}^2 a_1'(\eta) + 2\beta_{n+1} a_1 \frac{\partial \beta}{\partial \eta}\right] \left(p_{n+1}^{\text{trial}}\right)^2 - \frac{2}{3} a_2'(\eta) \sigma_y^2 \tag{A.2.10}$$

donde:

$$\frac{\partial \beta_{n+1}}{\partial \eta_{n+1}} = -2\kappa \Delta \lambda_{n+1} \beta_{n+1}^2 a_1'(\eta) \qquad (A.2.11)$$

Las derivadas de α_{n+1} y β_{n+1} respecto al parámetro de consistencia, se calculan como:

$$d\alpha_{n+1} = g_{\alpha} \ d(\Delta\lambda_{n+1}) := -4\overline{\mu}\alpha_{n+1}^2 d(\Delta\lambda_{n+1})$$

$$d\beta_{n+1} = g_{\beta} \ d(\Delta\lambda_{n+1}) := -2\kappa a_1\beta_{n+1}^2 \ d(\Delta\lambda_{n+1})$$
(A.2.12)

El reemplazo de (A.1.23), (A.1.28) y (A.2.12) en (A.2.8) permite encontrar la siguiente expresión para $d(\Delta \lambda_{n+1})$:

$$d(\Delta\lambda_{n+1}) = G_{\alpha\beta} \left[\frac{\partial\phi}{\partial(J_2)} J + 2\mathrm{tr}[\tau] \frac{\partial\phi}{\partial(I_1^2)} P - 2\eta \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \mathbf{1} \right]_{n+1}^{\mathrm{trial}} de_{n+1}$$

donde:

$$G_{\alpha\beta} = \frac{-1}{g_{\alpha}\frac{\partial\phi}{\partial\alpha} + g_{\beta}\frac{\partial\phi}{\partial\beta}}$$

$$d\boldsymbol{\tau}_{n+1} = \boldsymbol{c}_{n+1}^{ep} : d\boldsymbol{e}_{n+1}$$

$$\boldsymbol{c}_{n+1}^{ep} = \alpha_{n+1}\boldsymbol{\Lambda}_{n+1} + \frac{1}{3}\beta_{n+1}\boldsymbol{1} \otimes \boldsymbol{P}_{n+1}^{\text{trial}} - \frac{2}{3}\beta\text{tr}[\boldsymbol{\tau}]\boldsymbol{I}$$

$$+ G_{\alpha\beta} \left[\frac{\partial\phi_{n+1}}{\partial(2J_2)}\boldsymbol{A}_{n+1} + \frac{\partial\phi_{n+1}}{\partial(I_1^2)}\boldsymbol{B}_{n+1} - \frac{\partial\phi_{n+1}}{\partial\eta_{n+1}}\boldsymbol{D}_{n+1}\right]$$

El reemplazo de la ecuación anterior en las ecuaciones (A.2.12.a), (A.2.12.b) y éstas a su vez en (A.2.3) permiten junto con (A.2.4), (A.2.5) y (A.2.12) formular la siguiente expresión para el tensor constitutivo tangente:

donde:

$$A_{n+1} = q_{n+1}^{\text{trial}} \otimes J_{n+1}^{\text{trial}}$$
$$B_{n+1} = 2 \text{tr}[\tau_{n+1}^{\text{trial}}] q_{n+1}^{\text{trial}} \otimes P_{n+1}^{\text{trial}}$$
$$D_{n+1} = \eta q_{n+1}^{\text{trial}} \otimes 1$$
(A.2.15)

y donde el tensor q_{n+1}^{trial} se define como:

$$q_{n+1}^{\text{trial}} = g_{\alpha} \operatorname{dev}[\tau_{n+1}^{\text{trial}}] + g_{\beta} \, p_{n+1}^{\text{trial}} \, \mathbf{1} \tag{A.2.16}$$

DEMOSTRACIÓN DEL LEMA A1.3

La integración de las deformaciones plásticas en el intervalo de interés viene dada por:

$$e_{n+1}^p = \tilde{e}_n^p + 2\Delta\lambda_{n+1} \left[\operatorname{dev} \tau_{n+1} + \frac{1}{9}a_1 \operatorname{tr}[\tau] 1 \right]$$
 (A.2.17)

$$\tilde{e}_{n}^{p} = \phi_{*}^{n+1}(E_{n}^{p})$$
 (A.2.18)

Por definición, las tensiones vienen dadas por:

$$\boldsymbol{\tau}_{n+1} = c : (e_{n+1} - e_{n+1}^p) \tag{A.2.19}$$

reemplazando (A.2.17) en (A.2.19) se tiene que:

$$\boldsymbol{\tau}_{n+1} = \boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}} - 2\Delta\lambda_{n+1} \left[\boldsymbol{c} : \operatorname{dev}\left[\boldsymbol{\tau}_{n+1}\right] + \frac{1}{9}a_{1}\operatorname{tr}\left[\boldsymbol{\tau}_{n+1}\right]\boldsymbol{c} : 1 \right]$$
(A.2.20)

El tensor $\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}$ fue definido en (A.1.1). Se prueba fácilmente que:

$$c: \operatorname{dev} [\boldsymbol{\tau}_{n+1}] = 2 \,\overline{\mu} \operatorname{dev} [\boldsymbol{\tau}_{n+1}]$$

$$c: 1 = 3\kappa \, 1$$
(A.2.21)

El valor κ es el módulo de deformación volumétrica del material. Aplicando el operador traza, a los lados en (A.2.20) se encuentra que tr $[\tau_{n+1}]$ viene dada por:

$$\operatorname{tr}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}] = \frac{1}{1 + 2a_1 \Delta \lambda_{n+1} \kappa} \operatorname{tr}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\operatorname{trial}}]$$
(A.2.22)

De forma similar, aplicando el operador desviador a los dos lados de (A.2.20) se obtiene que:

$$\operatorname{dev}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}] = \frac{1}{1 + 4\Delta\lambda_{n+1}\overline{\mu}} \operatorname{dev}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\operatorname{trial}}]$$
(A.2.23)

En términos del primer y segundo invariante del desviador, las tensiones de prueba se pueden escribir como:

$$\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}} = \operatorname{dev}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}] + \frac{1}{3} \operatorname{tr}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}] \mathbf{1}$$
(A.2.24)

Reemplazando (A.2.24) y las expresiones (A.2.23), (A.2.22) que se tienen para el desviador y la traza del tensor de tensiones, en la ecuación (A.2.20), se pueden escribir las tensiones como:

$$\boldsymbol{\tau}_{n+1} = \alpha_{n+1} \operatorname{dev}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\operatorname{trial}}] + \beta_{n+1} p_{n+1}^{\operatorname{trial}} \mathbf{1}$$
(A.2.25)

donde:

$$p_{n+1}^{\text{trial}} = \frac{1}{3} \text{tr}[\boldsymbol{\tau}_{n+1}^{\text{trial}}] \qquad \alpha_{n+1} = \frac{1}{1 + 4\overline{\mu}\Delta\lambda_{n+1}} \qquad \beta_{n+1} = \frac{1}{1 + 2\kappa a_1\Delta\lambda_{n+1}} \qquad (A.2.26)$$

A1.3 TENSOR CONSTITUTIVO TANGENTE CONTINUO

\Diamond LEMA A1.4

La derivada objetiva del tensor constitutivo elástico c, viene dada por la siguiente expresión:

$$(L_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{c})^{ijkl} = -4\overline{\mu}(de^{ik}\,\delta^{jl} + \delta^{ik}\,de^{jl} + de^{il}\,\delta^{jk} + \delta^{il}\,de^{jk}) - 2\overline{\lambda}(de^{ij}\,\delta^{kl} + \delta^{ij}\,de^{kl}) \quad (A.3.1)$$

DEMOSTRACIÓN

El tensor constitutivo elástico c se puede escribir en la configuración material (mediante el operador *pull back* ϕ^*) como:

$$\boldsymbol{\Xi} = [2\mu \boldsymbol{I}_{C^{-1}} + \lambda C^{-1} \otimes C^{-1}] \tag{A.3.2}$$

donde

$$(I_{C^{-1}})^{abcd} = \frac{1}{2} \left[(C^{-1})^{ac} (C^{-1})^{bd} + (C^{-1})^{ad} (C^{-1})^{bc} \right]$$
(A.3.3)

la derivada de Ξ se puede escribir como:

$$d \mathbf{\Xi} = [2\mu \ d\mathbf{I}_{C^{-1}} + \lambda \ d\mathbf{G}] \tag{A.3.4}$$

donde

$$dG = -2 \left[C^{-1} dE C^{-1} \otimes C^{-1} + C^{-1} \otimes C^{-1} dE C^{-1} \right]$$
 (A.3.4)

Las derivadas $dI_{C^{-1}}$ y dG vienen dadas por A.1.14 y A.1.15.c. Entonces la derivada L_vc viene dada por el tensor:

$$L_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{c} = 2\overline{\mu}\phi_*(d\boldsymbol{I}_{C^{-1}}) + \overline{\lambda}\phi_*(d\boldsymbol{G}) \tag{A.3.5}$$

que se puede escribir como:

$$(L_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{c})^{ijkl} = -4\overline{\mu}(de^{ik}\,\delta^{jl} + \delta^{ik}\,de^{jl} + de^{il}\,\delta^{jk} + \delta^{il}\,de^{jk}) - 2\overline{\lambda}(de^{ij}\,\delta^{kl} + \delta^{ij}\,de^{kl}) \quad (A.3.6)$$

donde de representa la derivada de las deformaciones en la configuración espacial.

\diamond LEMA A1.5

El producto doblemente contraido $L_v c \cdot (e - e^p)$ viene dado por:

$$L_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{c}\cdot(\boldsymbol{e}-\boldsymbol{e}^{\boldsymbol{p}})=\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{L}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{e} \tag{A.3.7}$$

donde

$$d^{ijkl} = -4\overline{\mu}[(e^e)^{il}\delta^{jk} + \delta^{ik}(e^e)^{lj}] - 2\overline{\lambda}[\delta^{ij}(e^e)^{kl} + \delta^{ik}\delta^{jl}\mathrm{tr}[e^e]]$$
(3.3.8)

DEMOSTRACIÓN

La expresión anterior se obtiene fácilmente a partir del lema A1.4.

ANEXO A2

CONTRIBUCIÓN A LA MATRIZ TANGENTE DEBIDO AL CONTACTO Y A LA FRICCIÓN

El objetivo de este anexo es calcular las contribuciones a la matriz tangente del problema global, debidas al contacto y a la fricción. En la primera parte se describen brevemente los pasos a seguir para la obtención de la matriz tangente global. Luego se analizará la contribución a la matriz debida a cada uno de los métodos empleados para la simulación del contacto y la fricción.

A2.1 Cálculo de la matriz tangente global

Continuando con la notación introducida al inicio del capítulo 3, se supone que Ω_t denota el cuerpo deformable en el instante t. La función φ describe su movimiento, que se relaciona con el campo de desplazamientos mediante la expresión: $\varphi(X,t) = X + U(X,t)$. El tensor F representa el tensor gradiente da la deformación. El teorema de los trabajos virtuales en la configuración material se puede escribir como:

$$G(\boldsymbol{U}) = G^{\mathrm{int}}(\boldsymbol{U}) - G^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{U}) = 0 \quad \forall \ \delta \boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{V}$$
 (A.2.1)

donde

$$G^{\text{int}}(\boldsymbol{U}) = \int_{\Omega} \boldsymbol{P} : \text{GRAD}(\delta \boldsymbol{\varphi}) \, dV$$
$$G^{\text{ext}}(\boldsymbol{U}) = \int_{\Omega} \rho_o \boldsymbol{B} \cdot \delta \boldsymbol{\varphi} \, dV + \int_{\Gamma_{\overline{t}}} \overline{\boldsymbol{t}} \cdot \delta \boldsymbol{\varphi} \, d\Gamma + \int_{\Gamma_c} \boldsymbol{t} \cdot \delta \boldsymbol{\varphi} \, d\Gamma$$
(A.2.2)

El conjunto Ω representa el cuerpo en la configuración de referencia. El conjunto \mathcal{V} contiene todos los desplazamientos virtuales admisibles:

$$\mathcal{V} = \left\{ \delta oldsymbol{arphi}: oldsymbol{\Omega} o {
m I\!R}^2 \mid \ \delta oldsymbol{arphi}|_{\Gamma_D} = oldsymbol{0}
ight\}$$

El tensor P representa el primer tensor de Piola-Kirchhoff, que se relaciona con el segundo tensor de Piola-Kirchhoff S, mediante la siguiente expresión:

$$P = F \cdot S$$

Anexo A2

El vector B(X) representa las fuerzas de volumen que actúan sobre el cuerpo. \bar{t} corresponde a las fuerzas de superficie conocidas, que actúan sobre $\Gamma_{\bar{t}}$. El vector t representa a las fuerzas de contacto y fricción que actúan sobre la porción Γ_C de la frontera.

• Observación A2.1

El integrando de G^{int} se puede escribir en términos de las deformaciones virtuales que se obtienen a partir de los desplazamientos virtuales. Una expresión para este campo de deformación virtual se puede obtener mediante la aplicación de la derivada de Gateaux, en la dirección del campo de desplazamientos virtuales:

$$\delta \boldsymbol{E}(\boldsymbol{\varphi}, \delta \boldsymbol{\varphi}) = \left. \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial \alpha} (\boldsymbol{\varphi} + \alpha \delta \boldsymbol{\varphi}) \right|_{\alpha = 0} = \left. \frac{1}{2} \left[\boldsymbol{F}^T \cdot \nabla (\delta \boldsymbol{\varphi}) + \nabla (\delta \boldsymbol{\varphi})^T \cdot \boldsymbol{F} \right]$$
(A.2.3)

Mediante (A.2.3) se puede formular (A.2.1) en su forma clásica :

$$\int_{\Omega} \mathbf{S} : \delta \mathbf{E} \, dV - \int_{\Omega} \rho_o \mathbf{B} \cdot \delta \varphi \, dV - \int_{\Gamma_{\overline{t}}} \overline{t} \cdot \delta \varphi \, d\Gamma - \int_{\Gamma_c} t \cdot \delta \varphi \, d\Gamma = 0 \qquad (A.2.5)$$

La expresión (A.2.1), define en general una ecuación no lineal en términos de los desplazamientos U. La linealización de dicha ecuación puede obtenerse mediante el cálculo de la derivada de Gateaux [36] en la dirección de ΔU que representa un incremento en los desplazamientos. Esta derivada se puede expresar como [47] [36]:

$$\delta G(\boldsymbol{U}; \Delta \boldsymbol{U}) = \frac{\partial}{\partial \alpha} G(\boldsymbol{U} + \alpha \Delta \boldsymbol{U}) \Big|_{\alpha = 0}$$
(A.2.6)

entonces:

$$\delta G(\boldsymbol{U};\Delta \boldsymbol{U}) = \delta G^{\mathrm{int}}(\boldsymbol{U};\Delta \boldsymbol{U}) + \delta G^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{U};\Delta \boldsymbol{U})$$
 (A.2.7)

El resultado de la derivada del primer término se resume en el siguiente lema:

♦ LEMA A2.1

La derivada de Gateaux de $G^{int}(U)$ en la dirección de ΔU viene dada por:

$$\delta G^{\text{int}} = \int_{\Omega} \nabla(\delta \varphi) : \left[\nabla(\Delta U) \cdot S + F \cdot C^{\epsilon p} : F^T \cdot \nabla(\Delta U) \right] dV$$
(A.2.7)

donde el tensor $C^{\epsilon p}$ es el tensor constitutivo tangente escrito en la configuración material.

El cálculo de la derivada direccional de $G^{\text{ext}}(U)$ se reduce a calcular la derivada del último término de (A.2.2b) que corresponde a las fuerzas de contacto y fricción.

A2.2 Contribución debida al contacto y a la fricción

Dado un punto $X \in \Gamma_C$, (porción de la frontera en contacto con el contorno rígido) se supondrá en general que:

$$t = t(U) \tag{A.2.8}$$

Se supondrá además que t se puede escribir en coordenadas locales de la siguiente forma:

$$\boldsymbol{t} = \boldsymbol{t}(\boldsymbol{U}) = t^{N}(\boldsymbol{U})\hat{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{U}) + t^{T}(\boldsymbol{U})\hat{\boldsymbol{t}}(\boldsymbol{U})$$
 (A.2.9)

donde (t^N, t^T) corresponden a las fuerzas normal y tangencial respectivamente. La primera, debida al contacto y la segunda, debida a la fricción. En principio, el vector \hat{n} corresponde a la normal al cuerpo deformable en el punto $\varphi(X)$. Pero en la práctica, se utiliza el vector normal definido sobre la superficie del contorno rígido en el punto $\overline{\varphi(X)}$ que corresponde al punto de mínima distancia entre $\varphi(X)$ y el contorno rígido. Por lo tanto se tiene que:

$$\hat{n}(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})) = \hat{n}(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X}))$$
 (A.2.10)

La convexidad de M^c garantiza la correcta solución del problema de mínima distancia. La dirección tangente \hat{t} se elige de tal forma que el sistema (\hat{n}, \hat{t}) tiene el mismo sentido que el sistema de coordenadas global. La derivada de $G^{\text{ext}}(U)$ se puede escribir como:

$$\delta G^{\text{ext}}(\boldsymbol{U};\Delta \boldsymbol{U}) = \int_{\Gamma_{\boldsymbol{C}}} \delta t(\boldsymbol{U};\Delta \boldsymbol{U}) \cdot \delta \boldsymbol{\varphi} \ d\boldsymbol{\Gamma}$$
(A.2.11)

donde $\delta t(U; \Delta U)$ se calcula partiendo de la expresión (A.2.9). El resto del anexo se concentra en el cálculo de esta derivada para cada uno de los métodos empleados para la solución del problema de contacto y fricción.

Anexo A2

Penalización

Como se explicó en la sección 3.4.2, la fuerza de contacto viene dada por la siguiente expresión:

$$t^{N}(\varphi(X)) = -K_{N} \left[\varphi(X) - \overline{\varphi(X)}\right] \cdot \hat{n}(\overline{\varphi(X)})$$
 (A.2.12)

donde $\varphi(X) = X + U(X)$, y el punto $\overline{\varphi(X)}$ es el lugar sobre el contorno donde se alcanza la distancia mínima, el vector $\hat{n}(\overline{\varphi(X)})$ es la normal sobre el contorno en el punto $\overline{\varphi(X)}$ (ver figura A2.1).

• Observación A2.2

La ecuación (A.2.12) sólo es valida en el caso en que se viola la condición de contacto, en cualquier otro caso, la fuerza normal es cero. $\hfill \Box$



Figura A2.1 Cuerpo deformable, contorno rígido

El objetivo ahora es encontrar una expresión para $\delta t^N(U; \Delta U)$ o equivalentemente una expresión para $\delta t^N(\varphi; \delta \varphi)$.

Por construcción, $\varphi(X) - \overline{\varphi(X)}$ es un vector en la dirección $\hat{n}(\overline{\varphi(X)})$, por lo tanto t^N se puede expresar como:

$$t^{N}(\boldsymbol{\varphi}) = K_{N} \| \boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X}) - \overline{\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})} \| = K_{N} h(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X}))$$
 (A.2.13)

donde h es la función de mínima distancia introducida en la sección 3.4.2. La variación de esta última se resume en el siguiente lema: Matriz tangente

\diamond LEMA A2.2

La derivada de Gateaux de la función h en la dirección ΔU viene dada por:

$$\delta h(oldsymbol{arphi};\Delta oldsymbol{U}) = - \hat{oldsymbol{n}}(oldsymbol{arphi}(oldsymbol{X})) \cdot \Delta oldsymbol{U}$$
 (A.2.14)

Con base en el lema anterior se concluye que la derivada de t^N en la dirección de ΔU viene dada por:

$$\delta t^{N}(\boldsymbol{\varphi};\Delta \boldsymbol{U}) = -K_{N} \, \hat{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})) \cdot \Delta \boldsymbol{U} \qquad (A.2.15)$$

La fuerza de fricción que actúa en la dirección tangencial en el instante t_{n+1} viene dada por (ver cuadro 3.5):

$$t_{n+1}^{T} = \begin{cases} t_{n+1}^{\text{trial}} & \theta_{n+1}^{\text{trial}} < 0 \\ \\ \mu & |t_{n+1}^{N}| \operatorname{sign}(t_{n+1}^{\text{trial}}) & \theta_{n+1}^{\text{trial}} \ge 0 \end{cases}$$
(A.2.16)

a. Supóngase que $\theta_{n+1}^{\text{trial}} \geq 0$ entonces:

$$\delta t_{n+1}^{T} = \mu \operatorname{sign}(t_{n+1}^{N}) \operatorname{sign}(t_{n+1}^{\operatorname{trial}}) \delta t_{n+1}^{N}$$
(A.2.17)

reemplazando la ecuación (A.2.15) en (A.2.17) se encuentra que:

$$\delta t_{n+1}^T = -\mu \operatorname{sign}(t_{n+1}^N) \operatorname{sign}(t_{n+1}^{\operatorname{trial}}) K_N \,\hat{n} \cdot \Delta U_{n+1}$$
(A.2.18)

b. Supóngase que $\theta_{n+1}^{\text{trial}} < 0$ entonces por (3.5.10) se sabe que:

$$t_{n+1}^T = t_{n+1}^{\text{trial}} = t_n^T - K_T \, \hat{t} \cdot \Delta U_{n+1}$$
 (A.2.19)

donde Δu_{n+1} ha sido reemplazado por ΔU_{n+1} ya que este valor coincide mientras se mantenga el contacto. La derivada se formula como:

$$\delta t_{n+1}^{T}(\boldsymbol{\varphi}_{n};\Delta \boldsymbol{U}_{n+1}) = \frac{\partial}{\partial \alpha} t_{n+1}^{T}(\boldsymbol{\varphi}_{n} + \alpha \Delta \boldsymbol{U}_{n+1}) \Big|_{\alpha=0}$$
(A.2.20)

pero con base en (A.2.19) se tiene que:

$$t_{n+1}^{T}(\boldsymbol{\varphi}_{n}+\alpha\Delta \boldsymbol{U}_{n+1}) = t_{n}^{T}-\alpha K_{T} \Delta \boldsymbol{U}_{n+1} \cdot \hat{\boldsymbol{t}}_{n+1} \qquad (A.2.21)$$

luego de derivar (A.2.21) respecto a α y evaluar en $\alpha = 0$ se tiene que:

$$\delta t_{n+1}^T (\boldsymbol{\varphi}_n; \Delta \boldsymbol{U}_{n+1}) = -K_T \Delta \boldsymbol{U}_{n+1} \cdot \hat{\boldsymbol{t}}_{n+1}$$
(A.2.22)

Con base en los resultados obtenidos en (A.2.15), (A.2.18),(A.2.22) y el lema A2.3entonces la derivada de Gateaux de la ecuación (A.2.9) se puede escribir de la siguiente forma:

Si $\theta_{n+1}^{\text{trial}} < 0$ entonces:

$$\delta t_{n+1} = \left[-K_N \, \hat{n} \otimes \hat{n} - K_T \, \hat{t} \otimes \hat{t} - \kappa \beta \, t^N \, \hat{t} \otimes \hat{t} + \kappa \beta \, t^T \, \hat{n} \otimes \hat{t} \right] : \Delta U \qquad (A.2.23)$$

Si $\theta_{n+1}^{\text{trial}} \geq 0$ entonces:

$$\delta t_{n+1} = \left(-K_N \,\hat{n} \otimes \hat{n} + \mu \, K_N \, \operatorname{sign}(t_{n+1}^{\operatorname{trial}}) \, \operatorname{sign}(t_{n+1}^N) \, \hat{t} \otimes \hat{t} - \kappa \, \beta \, t^N \, \hat{t} \otimes \hat{t} + \kappa \, \beta \, t^T \, \hat{n} \otimes \hat{t} \right) : \Delta U \tag{A.2.24}$$

Multiplicadores de Lagrange

Como se explicó en la sección 3.4.3, el método consiste en incluir dos nuevas variables (λ^N, λ^T) conocidas como multiplicadores de Lagrange, que representan a las fuerzas de contacto y fricción respectivamente. En principio, el sistema de ecuaciones original se vé incrementado debido a estas dos variables, pero en el esquema de solución propuesto en esta tesis, en la sección 3.4.3, se evita este inconveniente. En el caso del cálculo de la fuerza normal de contacto, se supondrá (cuando dicho contacto exista) que es el negativo de la fuerza interna en la dirección normal. Por lo tanto se tiene que:

$$t^N(oldsymbol{arphi}(oldsymbol{X})) = \hat{oldsymbol{n}}(oldsymbol{arphi}(oldsymbol{X})) \cdot oldsymbol{F}^{ ext{int}}$$
 (A.2.24)

La fuerza de fricción se calcula mediante la siguiente expresión:

$$t^{T}(\varphi(\boldsymbol{X})) = \mu \operatorname{sign}(t^{\operatorname{trial}}) |t^{N}(\varphi(\boldsymbol{X}))|$$
 (A.2.25)

La contribución a la matriz tangente debido a las dos expresiones anteriores, se llevará a cabo en el anexo 3, donde se presenta la discretización por Elementos Finitos.

Lagrangiano Aumentado

Este método, analizado en detalle en las secciones 3.4.4 y 3.5.4, combina las técnicas de penalización y multiplicadores de Lagrange, evitando así algunas desventajas que tienen estos por separado. Al igual que en el caso de los multiplicadores de Lagrange, el sistema de ecuaciones a resolver aumenta. Las nuevas incognitas (λ^N, λ^T) representan las fuerzas de contacto y de fricción respectivamente.

En los algoritmos descritos en los cuadros 3.3 y 3.6 se evita que el número de ecuaciones aumente, pero a cambio se añade un lazo externo que controla la actualización de los multiplicadores de lagrange. Durante cada una de estas iteraciones, los multiplicadores no varian, por lo tanto, el problema (en general no lineal) que se resuelve es muy similar al caso de penalización. Entonces no aparece ninguna contribución a la matriz de rigidez debido a los multiplicadores, solo se mantiene la contribución debida a la penalización.

♦ DEMOSTRACION DEL LEMA A2.1

Luego de evaluar la ecuación (A.2.2a) en $W = U + \alpha \Delta U$ se tiene que:

$$G^{\text{int}}(\boldsymbol{W}) = \int_{\Omega} \boldsymbol{F}(\boldsymbol{W}) \cdot \boldsymbol{S}(\boldsymbol{W}) : \nabla(\Delta \boldsymbol{U}) dV \qquad (A.2.26)$$

la derivada respecto a α se expresa como:

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial \alpha} F(W) \cdot S + F(W) \cdot \frac{\partial}{\partial \alpha} S(W) \right] : \nabla(\Delta U) \, dV \qquad (A.2.27)$$

por un lado se tiene que:

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U} + \alpha \ \Delta \boldsymbol{U}) = \boldsymbol{I} + \nabla \boldsymbol{U} + \alpha \nabla (\Delta \boldsymbol{U}) \tag{A.2.28}$$

entonces:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} F(U + \alpha \Delta U) \Big|_{\alpha = 0} = \nabla(\Delta U)$$
(A.2.29)

del otro lado se tiene que por regla de la cadena:

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha} = \frac{\partial S}{\partial E} : \frac{\partial E}{\partial \alpha}$$
(A.2.30)

Se prue ba facilmente que la derivada de las deformaciones respecto a α viene dada por:

$$\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial \alpha}\Big|_{\alpha=0} = \frac{1}{2} \left[\nabla(\Delta \boldsymbol{U}) + \nabla^{T}(\Delta \boldsymbol{U}) + \nabla^{T}(\Delta \boldsymbol{U}) \cdot \nabla \boldsymbol{U} + \nabla^{T}(\boldsymbol{U}) \cdot \nabla \Delta \boldsymbol{U} \right] \quad (A.2.31)$$

Se define $C^{ep} = \partial S / \partial E$ como el tensor constitutivo tangente, escrito en la configuración material. (El cálculo de dicho tensor fue el objetivo central del apéndice 1).

Entonces la derivada de S respecto a α se puede escribir como:

$$\frac{\partial \boldsymbol{S}}{\partial \alpha} = \frac{1}{2} \boldsymbol{C}^{ep} : \left[\nabla (\Delta \boldsymbol{U}) + \nabla^T (\Delta \boldsymbol{U}) + \nabla^T (\Delta \boldsymbol{U}) \cdot \nabla \boldsymbol{U} + \nabla^T (\boldsymbol{U}) \cdot \nabla \Delta \boldsymbol{U} \right] \quad (A.2.32)$$

Anexo A2

Bajo la hipótesis de que el tensor constitutivo C^{ep} es simétrico en sus dos últimos indices, la expresión anterior se puede escribir en forma más compacta como:

$$\frac{\partial \boldsymbol{S}}{\partial \alpha} = C^{ep} : \left[\boldsymbol{F}^T \cdot \nabla(\Delta \boldsymbol{U}) \right] \tag{A.2.33}$$

finalmente, haciendo uso de (A.2.29) y (A.2.32), la derivada de G^{int} se puede escribir como:

$$\delta G^{\text{int}}(\boldsymbol{U};\Delta \boldsymbol{U}) = \int_{\Omega} \nabla(\Delta \boldsymbol{U}) \cdot \left[\nabla(\Delta \boldsymbol{U}) \cdot \boldsymbol{S} + \boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{C}^{\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{F}^{T} \cdot \nabla(\Delta \boldsymbol{U})\right] dV \quad (A.2.34)$$

♦ DEMOSTRACIÓN DEL LEMA A2.2

A continuación se formula una caracterización de la función de mínima distancia h, que facilitará la obtención de su derivada.

Dado el punto $\varphi(X)$, entonces, $\overline{\varphi(X)}$ es la solución del siguiente problema:

$$\min_{\boldsymbol{x}:g(\boldsymbol{x})\leq 0} \|\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X})-\boldsymbol{y}\| \qquad (A.2.35)$$

donde la función $g: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ caracteriza al conjunto M de la siguiente forma:

$$egin{aligned} g(oldsymbol{X}) &> 0 & ext{si} \ oldsymbol{X} \in oldsymbol{M} \ g(oldsymbol{X}) &= 0 & ext{si} \ oldsymbol{X} \in \partial M \ g(oldsymbol{X}) &< 0 & ext{si} \ oldsymbol{X}
otin oldsymbol{M} \end{aligned}$$
 (A.2.36)

Entonces el problema de minimización (A.2.35) se puede formular como la busqueda de un punto de silla del siguiente lagrangiano:

$$L(\boldsymbol{y},\lambda) = \|\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X}) - \boldsymbol{y}\| + \lambda g(\boldsymbol{y}) \qquad (A.2.37)$$

Dicho punto, debe ser solución del siguiente par de ecuaciones, que representan el gradiente del lagrangiano L:

$$\partial_{y}L = -\frac{\varphi(X) - y}{\|\varphi(X) - y\|} + \lambda \frac{\partial g}{\partial y}(y) = 0$$

$$(A.2.38)$$
 $\partial_{\lambda}L = g(y) = 0$

La segunda condición, claramente implica que la solución al problema de mínimo se encuentra en la frontera del contorno rígido.

Supóngase que la porción de la frontera de interés se puede parametrizar por longitud de arco mediante una curva $\alpha(s)$ con s como parámetro. Entonces, $\dot{\alpha}(s) = \hat{t}(s)$ y $\ddot{\alpha}(s) = \kappa(s)\hat{n}(s)$, donde $\kappa(s)$ representa la curvatura en el punto $\alpha(s)$. El problema de mínima distancia se puede reescribir de la siguiente forma: Encontrar s^* parámetro de la curva, tal que es solución del siguiente problema:

$$s^* = ARG\left\{\min_{s} \|\varphi(\mathbf{X}) - \alpha(s)\|\right\}$$
(A.2.39)

La diferencia con problema (A.2.35) es que este último es una minimización sin restricciones y su solución se caracteriza porque su derivada respecto a s se anula en el punto mínimo, así:

$$-\frac{\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X}) - \boldsymbol{\alpha}(s)}{\|\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X}) - \boldsymbol{\alpha}(s)\|} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}}(s) = 0$$
(A.2.40)

que se puede escribir más simplemente como:

$$[\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{X}) - \boldsymbol{\alpha}(s)] \cdot \hat{t}(s) = 0 \tag{A.2.41}$$

El valor del parámetro s^* solución de (A.2.41), define automáticamente el punto $\varphi(X) = \alpha(s^*)$ solución del problema original.

derivada de la función h

El objetivo aquí es obtener una expresión para $\delta h(\varphi; \Delta U)$. Por comodidad, se introducen las siguientes definiciones:

Sea $V = \varphi + \alpha \Delta U$ y $\overline{V} = \overline{\varphi + \alpha \Delta U}$ el punto donde se alcanza la mínima distancia. Sea $w = V - \overline{V}$. Entonces la derivada respecto a α se puede escribir como:

$$\frac{\partial h}{\partial \alpha} = \frac{\partial h(w)}{\partial w} \cdot \frac{\partial w}{\partial \alpha} = \frac{\partial h(w)}{\partial w} \cdot \left[\Delta U - \frac{\partial \overline{V}}{\partial \alpha} \right] \tag{A.2.42}$$

Por otro lado el punto $V = \varphi + \alpha \Delta U$ debe satisfacer una condición similar a (A.2.41) por lo tanto:

$$(\boldsymbol{\alpha}(s) - V) \cdot \hat{\boldsymbol{t}}(s) = [\boldsymbol{\alpha}(s) - (\boldsymbol{\varphi} + \alpha \Delta \boldsymbol{U})] \cdot \hat{\boldsymbol{t}}(s) = 0 \qquad (A.2.43)$$

La derivada de (A.2.43) respecto a α se puede escribir como:

$$rac{ds}{dlpha}\dot{oldsymbol{lpha}}(s)\cdot\hat{oldsymbol{t}}+\kappaoldsymbol{lpha}(s)\hat{oldsymbol{n}}-(oldsymbol{arphi}+lpha\Deltaoldsymbol{U})rac{d\hat{oldsymbol{t}}}{ds}rac{ds}{dlpha}-\Deltaoldsymbol{U}\cdot\hat{oldsymbol{t}}=0$$

(recuérdese que $\frac{d\hat{t}}{ds} = \kappa \hat{n}$), de esta última expresión se puede despejar $\partial s / \partial \alpha$ como:

Anexo A2

$$\frac{\partial s}{\partial \alpha} = \beta(s) \ \Delta U \cdot \hat{t} \tag{A.2.44}$$

donde

$$\beta(s) = \frac{1}{1 + \kappa \left[\boldsymbol{\alpha}(s) - (\boldsymbol{\varphi} + \alpha \Delta \boldsymbol{U}) \right] \cdot \hat{\boldsymbol{n}}}$$
(A.2.45)

Por la regla de la cadena se tiene que:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha}(\overline{V}) = \frac{\partial \alpha(s^*)}{\partial \alpha} = \frac{\partial s^*}{\partial \alpha} \hat{t}(s^*) \tag{A.2.46}$$

El cálculo termina reemplazando (A.2.44) en (A.2.46) y a su vez esta última en (A.2.42). La derivada direccional se obtiene luego de evaluar esta última expresión en $\alpha = 0$:

$$\delta h(\boldsymbol{\varphi}; \Delta \boldsymbol{U}) = -\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \left[\boldsymbol{I} - \beta \hat{\boldsymbol{t}} \otimes \hat{\boldsymbol{t}} \right] \cdot \Delta \boldsymbol{U}$$

$$\delta h(\boldsymbol{\varphi}; \Delta \boldsymbol{U}) = -\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \Delta \boldsymbol{U}$$
(A.2.47)

♦ LEMA A2.3

,

Las derivadas de Gateaux de los vectores unitarios \hat{n}, \hat{t} vienen dadas por:

$$\begin{split} \delta \hat{n}(\boldsymbol{\varphi}; \Delta \boldsymbol{U}) &= -\kappa \beta(\hat{t} \otimes \hat{t}) \cdot \Delta \boldsymbol{U} \\ \delta \hat{t}(\boldsymbol{\varphi}; \Delta \boldsymbol{U}) &= \kappa \beta(\hat{n} \otimes \hat{t}) \cdot \Delta \boldsymbol{U} \end{split} \tag{A.2.48}$$

DEMOSTRACIÓN

La normal en el punto $\varphi + \alpha \Delta U$ esta definida como la normal en el punto $\overline{\varphi + \alpha \Delta U}$, esto es:

$$\hat{n}(\boldsymbol{\varphi} + \alpha \ \Delta \boldsymbol{U}) = \hat{n}(\overline{\boldsymbol{\varphi} + \alpha \ \Delta \boldsymbol{U}})$$
 (A.2.49)

Por regla de la cadena, la derivada de esta última respecto a α es:

$$\frac{\partial \hat{n}}{\partial \alpha} = \frac{\partial \hat{n}}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial \alpha} \left| \frac{1}{\varphi + \alpha \Delta U} \right|$$
(A.2.50)

reemplazando el resultado obtenido en la ecuación (A.2.44) en (A.2.50) y evaluando en $\alpha = 0$ se tiene que:

$$\delta \hat{n}(\boldsymbol{\varphi}; \Delta \boldsymbol{U}) = -\kappa \beta(\hat{t} \otimes \hat{t}) \cdot \Delta \boldsymbol{U}$$
 (A.2.51)

La derivada de \hat{t} se obtiene apartir de la identidad:

$$\hat{t} \cdot \hat{n} = 0$$
 $\delta \hat{t} \cdot \hat{n} + \hat{t} \cdot \delta \hat{n} = 0$ (A.2.52)

$$\delta \hat{t}(oldsymbol{arphi};\Delta oldsymbol{U}) = \kappa eta(\hat{oldsymbol{n}}\otimes \hat{oldsymbol{t}}) \cdot \Delta oldsymbol{U}$$

entonces:
ANEXO A3

DISCRETIZACIÓN E IMPLE-MENTACIÓN POR ELEMENTOS FINITOS

El objetivo de este anexo es realizar algunos comentarios acerca de la discretización e implementación por Elementos Finitos de los algoritmos descritos en el capítulo 3 y el anexo A2. En general la discretización se lleva a cabo de la forma estandar [70]. Los comentarios se centrarán en la manera propuesta aquí para calcular los términos que tienen que ver con el contacto y la fricción.

Sea $\Omega^h = \bigcup_{e=1}^{n_e} \Omega^e$ una posible discretización del cuerpo deformable Ω donde n_e es el número de elementos y donde n_p será el número de nodos asociados a dicha discretización. Cada componente del campo de desplazamientos U(X) se puede aproximar mediante la siguiente función de interpolación:

$$U_i(X) \approx U_i^h(X) = \sum_{m=1}^{n_p} N_m(X) \hat{u}_{im}$$
 $i: 1...n_{dim}$ (A.3.1)

El conjunto $\{N_m, m: 1...n_p\}$ corresponde a las funciones de base del espacio que se utiliza para interpolar el campo de desplazamientos. El conjunto $\{\hat{u}_{im}\}$ corresponde a los valores que toma la variable en cada uno de los nodos.

Se supone aquí que los desplazamientos virtuales $\delta \varphi$ se interpolan mediante una expresión similar a (A.3.1) (método de Galerkin) entonces:

$$(\delta \boldsymbol{\varphi})_i \approx \varphi_i^h(\boldsymbol{X}) = \sum_{m=1}^{n_p} N_m(\boldsymbol{X}) \delta \hat{\varphi}_{im}$$
 (A.3.2)

donde $\delta \hat{\varphi}_{im}$ corresponde al desplazamiento virtual del nodo m en la dirección i.

El gradiente de (A.3.2) se puede escribir como:

$$\nabla(\delta \boldsymbol{\varphi}^{h}) = \sum_{m=1}^{n_{p}} \nabla N_{m}(\boldsymbol{X}) \delta \hat{\boldsymbol{\varphi}}_{m}$$
(A.3.3)

Luego de sustituir (A.3.2) y (A.3.3) en (A.2.1) y teniendo en cuenta que esta última debe valer para todo $\delta \hat{\varphi}$, se llega a la siguiente forma discreta del teorema de los trabajos virtuales:

$$\boldsymbol{F}^{\mathrm{res}}(\boldsymbol{U}^h) = \boldsymbol{F}^{\mathrm{int}}(\boldsymbol{U}^h) - \boldsymbol{F}^{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{U}^h) = \boldsymbol{0}$$
 (A.3.4)

donde

$$\begin{aligned} \boldsymbol{F}_{p}^{\text{int}}(\boldsymbol{U}^{h}) &= \int_{\Omega^{h}} \boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}^{h}) \cdot \boldsymbol{S}(\boldsymbol{U}^{h}) : \nabla N_{p}(\boldsymbol{X}) \ dV \\ \boldsymbol{F}_{p}^{\text{ext}}(\boldsymbol{U}^{h}) &= \int_{\Omega^{h}} \rho_{o} N_{p} \boldsymbol{B} \ dV \ + \int_{\Gamma^{h}_{\overline{t}}} N_{p} \overline{t} \ d\Gamma \ + \int_{\Gamma^{h}_{C}} N_{p} t \ d\Gamma \end{aligned}$$

$$(A.3.5)$$

 $F_p^{\text{int}}(U^h)$ representa la fuerza interna en el nodo p y $F_p^{\text{ext}}(U^h)$ representa la fuerza externa actual sobre dicho nodo.

El problema (en general no lineal) es: Encontrar U^h o más precisamente $\{\hat{u}_{im}\}$ conjunto de desplazamientos nodales que satisfacen la ecuación (A.3.4). La linealización por el método de Newton del sistema (A.3.4) coincide con la linealización formulada en (A2.6).

La linealización del término del fuerzas internas se resume en el siguiente lema:

♦ LEMA A3.1

La derivada de $F_p^{\text{int}}(U^h)$ en la dirección de ΔU^h se puede escribir como:

$$\delta \hat{\boldsymbol{\varphi}} : \delta \boldsymbol{F}^{\text{int}}(\hat{\boldsymbol{U}}; \Delta \hat{\boldsymbol{U}}) : \Delta \hat{\boldsymbol{U}} = \delta \hat{\boldsymbol{\varphi}} : [f_{\Omega}(\boldsymbol{G} + \boldsymbol{H}) dV] : \Delta \hat{\boldsymbol{U}}$$
(A.3.6)

donde $(\delta \hat{\boldsymbol{\varphi}})_{im} = \delta \hat{\varphi}_{im}, \quad (\Delta \hat{\boldsymbol{U}})_{lp} = \Delta \hat{U}_{lp} \quad \mathrm{y}$

$$G_{imlp} = \delta_{il} \frac{\partial N_m}{\partial x_j} \frac{\partial N_p}{\partial x_k} S_{kj} \qquad H_{imlp} = \frac{\partial N_m}{\partial x_j} F_{ik} C_{kjsr}^{ep} F_{ls} \frac{\partial N_p}{\partial x_r}$$

La matriz H se conoce como la componente material de la matriz tangente y G se conoce como la matriz geométrica. Obsérvese que subindicando cada una de éstas, mendiante los cuatro indices $(i : 1 ... n_{dim}, m : 1 ... n_p, l : 1 ... n_{dim}, p : 1 ... n_p)$, se consiguen expresiones bastante compactas, que facilitan su análisis e implementación.

DEMOSTRACIÓN DEL LEMA A3.1

En el lema A2.1 se probó que la derivada de $G^{int}(U)$ en la dirección de ΔU viene dada por:

$$\delta G^{\text{int}} = \int_{\mathbf{\Omega}} \nabla(\delta \boldsymbol{\varphi}) : \left[\nabla(\Delta \boldsymbol{U}) \cdot \boldsymbol{S} + \boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{C}^{ep} : \boldsymbol{F}^{T} \cdot \nabla(\Delta \boldsymbol{U}) \right] dV \qquad (A.3.7)$$

El incremento en los desplazamientos se puede aproximar como:

$$\Delta U_i(\boldsymbol{X}) \approx \Delta U_i^h(\boldsymbol{X}) = \sum_{m=1}^{n_p} N_m(\boldsymbol{X}) \Delta \hat{U}_{im} \qquad i: \ 1 \dots n_{dim} \qquad (A.3.8)$$

126

entonces

$$\nabla(\Delta U_i(\boldsymbol{X})) \approx \nabla(\Delta U_i^h(\boldsymbol{X})) = \sum_{m=1}^{n_p} \nabla N_m(\boldsymbol{X}) \Delta \hat{U}_{im} \qquad i: \ 1 \dots n_{dim} \qquad (A.3.9)$$

Defínase $\Delta \hat{U}$ como el vector de incognitas nodales, cuyas componentes vienen dadas por:

$$\Delta \hat{U}_{im} \quad i:1\ldots n_{dim}, \quad m:1\ldots n_p \tag{A.3.10}$$

De forma similar se define el vector $(\delta \varphi)_{im} = \Delta \hat{\varphi}_{im}$.

Con base en las anteriores definiciones se tiene que:

$$\nabla(\delta\varphi):\nabla(\Delta U)\cdot S = \delta\hat{\varphi}:G:\hat{\Delta U} = \delta\hat{\varphi}_{im}G_{imlp}\Delta\hat{U}_{lp}$$
(A.3.11)

$$i, l: 1 \dots n_{dim}, \qquad m, p: 1 \dots n_p$$

y donde

$$G_{imlp} = \delta_{il} \frac{\partial N_m}{\partial x_j} \frac{\partial N_p}{\partial x_k} S_{kj}$$

Por otro lado se tiene que:

$$\boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{C}^{ep} : \boldsymbol{F}^{T} \cdot \nabla(\Delta \boldsymbol{U}) = \delta \hat{\boldsymbol{\varphi}} : \boldsymbol{H} : \Delta \hat{\boldsymbol{U}} = \delta \hat{\varphi}_{im} H_{imlp} \Delta \hat{\boldsymbol{U}}_{lp}$$
(A.3.12)

 ${\rm donde}$

$$H_{imlp} = \frac{\partial N_m}{\partial x_j} F_{ik} C_{kjsr}^{ep} F_{ls} \frac{\partial N_p}{\partial x_r}$$
(A.3.13)

La sustitución de (A.3.11) y (A.3.12) en (A.3.7) conduce a la siguiente expresión para la derivada δF^{int} :

$$\delta \hat{\boldsymbol{\varphi}} : \delta \boldsymbol{F}^{\text{int}}(\hat{\boldsymbol{U}}; \Delta \hat{\boldsymbol{U}}) : \Delta \hat{\boldsymbol{U}} = \delta \hat{\boldsymbol{\varphi}} : \left[\int_{\Omega_h} (\boldsymbol{G} + \boldsymbol{H}) d\boldsymbol{V} \right] : \Delta \hat{\boldsymbol{U}}$$
(A.3.14)

Anexo A3



Figura A3.1 Aproximación del contorno rígido

COMENTARIOS ACERCA DE LA IMPLEMENTACIÓN

La implementación tanto del vector de fuerzas internas como de su contribución a la matriz tangente se realizan de forma estandar. El término que ofrece algunas dificultades es el vector que representa las fuerzas de contacto. Por una parte su implementación requiere el uso de coordenadas locales y el cálculo de la función de mínima distancia (necesaria con los métodos de penalización y lagrangiano aumentado) entre los nodos que representan el cuerpo deformable y el contorno rígido. Por otro lado la contribución a la matriz de rigidez requiere el cálculo de la curvatura (necesaria con los métodos de penalización y lagrangiano aumentado).

Función de mínima distancia

Como una primera aproximación se supone aquí, que el contorno rígido se puede aproximar mediante segmentos poligonales. La sucesión de puntos $y_1 \dots y_k$ de la figura A3.1 representa uno de tales contornos. Los nodos $p_1 \dots p_l$ representan una porción del cuerpo deformable que deben cumplir las condiciones del contacto. Como se explicó en el anexo A1, a cada nodo se asocian las direcciones normal y tangencial del punto donde se alcanza la mínima distancia al contorno rígido. Se asocia además el nodo con el segmento donde se alcanza dicho mínimo. Como se vé en la figura A3.1, la hipótesis de convexidad se ha eliminado, entonces no existe ninguna garantia de que la solución del problema de mínima distancia tenga una solución única. En la práctica, los nodos $p_1 \dots p_{n_p}$ que representan el cuerpo deformable se encuentran lo suficientemente cerca de los segmentos que representan el contorno deformable como para garantizar la unicidad de la solución. Entonces para cada nodo p_k la mínima distancia se calcula como la mínima distancia entre el nodo y los segmentos. Por ejemplo para los puntos p_{k-1}, p_k y p_{k+1} la mínima distancia se encuentra directamente como la proyección sobre el segmento correspondiente. En el caso del punto p_r cercano a la esquina B, la mínima distancia se podría alcanzar en dos puntos. Cuando esto sucede, se prefiere no modificar el segmento al que ya pertenecía.

Cálculo de las fuerzas de contacto y fricción

En el caso del método de penalización, la fuerza normal se puede calcular como:

$$t_p^N = K_N \langle g(\boldsymbol{\varphi}_p - \overline{\boldsymbol{\varphi}}_p) \rangle$$
 (A.3.15)

donde

$$< g(oldsymbol{arphi}_p - \overline{oldsymbol{arphi}}_p) > = egin{cases} 0 & ext{si}(oldsymbol{arphi}_p - \overline{oldsymbol{arphi}}_p) \cdot \hat{oldsymbol{n}} < 0 \ \|oldsymbol{arphi}_p - \overline{oldsymbol{arphi}}_p\| & ext{si}(oldsymbol{arphi}_p - \overline{oldsymbol{arphi}}_p) \cdot \hat{oldsymbol{n}} \geq 0 \ \end{bmatrix}$$

El cáculo de la fuerza de fricción se lleva a cabo mediante la expresión (ver cuadro 3.5):

$$t_{n+1}^{T} = \begin{cases} t_{n+1}^{\text{trial}} & \theta_{n+1}^{\text{trial}} < 0\\ \\ \mu & |t_{n+1}^{N}| \operatorname{sign}(t_{n+1}^{\text{trial}}) & \theta_{n+1}^{\text{trial}} \ge 0 \end{cases}$$
(A.3.16)

por lo tanto la fuerza exterior que actúa en el nodo p, viene dada por:

$$\boldsymbol{F}_{p}^{\text{ext}} = \boldsymbol{t}_{p}^{N} \hat{\boldsymbol{n}}_{p} + \boldsymbol{t}_{p}^{T} \hat{\boldsymbol{t}}_{p} \tag{A.3.17}$$

Cuando se utiliza el método del Lagrangiano Aumentado, las expresiones para (t^N, t^T) se encuentran en los cuadros 3.3 y 3.7. Dichas expresiones incluyen los términos correspondientes a los multiplicadores de Lagrange del problema.

Cálculo de la curvatura

Las expresiones (A.2.23) y (A.2.24) corresponden a las contribuciones a la matriz tangente del problema global, debidas a las fuerzas de contacto y de fricción. En dichas expresiones se necesita calcular el término $\kappa \cdot \beta$ donde κ es la curvatura y β esta definido en (A.2.45). A continuación se propone una forma de aproximar esta expresión mediante la variación del vector normal (o equivalentemente, de la variación de la tangente)

Supóngase que el punto $\varphi(X)$ se mueve de la iteración k a la iteración k+1 como se ilustra en la figura A3.2. La siguiente ecuación permite estimar el valor de la curvatura en el instante k+1:

$$rac{\partial \hat{t}}{\partial s} = \kappa(s)\hat{n}(s)$$
 (A.3.18)

Anexo A3



Figura A3.2 Aproximación de la curvatura

El vector \hat{t}_{k+1} se puede aproximar como:

$$\hat{t}_{k+1} = \hat{t}_k + \kappa_{k+1} \hat{n}_{k+1} \Delta s_{k+1}$$
 (A.3.19)

entonces

$$\kappa_{k+1} = \frac{\hat{n}_{k+1} \cdot \Delta t_{k+1}}{\Delta s_{k+1}} \tag{A.3.20}$$

La contribución a la matriz de rigidez (ver (A.2.23) y (A.2.24)) esta dada por:

$$\beta_{k+1}\kappa_{k+1} = \frac{1}{\frac{1}{\kappa_{k+1}} + \left[\overline{\varphi}_{k+1} - \varphi_{k+1}\right] \cdot \hat{n}_{k+1}}$$
(A.3.21)

Esta última se puede escribir como:

$$\beta_{k+1}\kappa_{k+1} = \frac{1}{R_{k+1} + \delta_{k+1}} \tag{A.3.22}$$

donde $R_{k+1} = 1/\kappa_{k+1}$ se define como el radio de curvatura y δ_{k+1} como la distancia mínima entre φ_{k+1} y el contorno. El valor de Δs_{k+1} , en principio, es la distancia entre $\overline{\varphi}_k$ y $\overline{\varphi}_{k+1}$ a lo largo de la curva. Pero para facilitar su cálculo se aproximará con el valor de la distancia entre estos dos puntos, o sea que:

$$\Delta s_{k+1} \approx \left\| \overline{\varphi}_k - \overline{\varphi}_{k+1} \right\| \tag{A.3.23}$$

entonces se tiene que:

$$\beta_{k+1}\kappa_{k+1} = \begin{cases} 0 & \text{si } \kappa_{k+1} = 0\\ \frac{1}{R_{k+1} + \delta_{k+1}} & \text{si } \kappa_{k+1} \neq 0 \end{cases}$$
(A.3.24)

ANEXO A4

OPERADORES PUSH FORWARD, PULL BACK Y DERIVADA DE LIE

A continuación se describe brevemente la relación geométrica que existe entre los tensores definidos en la configuración material y los definidos en la configuración espacial. La relación viene dada mediante los operadores *push* forward y pull back introducidos en [35]. Se introduce también el concepto de derivada de Lie.

• Relación geométrica

El tensor de deformaciones E de Green-Lagrange es una medida de cuanto cambian las distancias entre puntos del cuerpo en la configuración deformada, referidas a las distancias entre los mismos en la configuración de referencia.

La misma idea física pero referida a la configuración espacial, permite definir el tensor de Almansi e. Se observa facilmente que estos tensores se encuentran relacionados por la siguiente expresión [36][48]:

$$E(X,t) = F^{T}(X,t) \cdot e(x,t) \cdot F(X,t)$$
 donde $x = \varphi_{t}(X,t)$

de forma equivalente, se tiene la siguiente relación inversa:

$$\boldsymbol{e}(\boldsymbol{x},t) = \boldsymbol{F}^{-T}(\boldsymbol{X},t) \cdot \boldsymbol{E}(\boldsymbol{X},t) \cdot \boldsymbol{F}^{-1}(\boldsymbol{X},t)$$

Se pueden probar relaciones similares a las anteriores, como las siguientes:

$$C = F^{T} \cdot g \cdot F \qquad E^{p} = F^{T} \cdot e^{p} \cdot F \qquad C^{p} = F^{T} \cdot b^{e^{-1}} \cdot F$$

$$g = F^{-T} \cdot C \cdot F^{-1} \qquad e^{p} = F^{-T} \cdot E^{p} \cdot F^{-1} \qquad b^{e^{-1}} = F^{-T} \cdot C^{p} \cdot F^{-1}$$
(A4.1)

La siguiente definición de los operadores push forward ϕ_* y pull back ϕ^* ([35]) permite generalizar las anteriores relaciones pero entre espacios tensoriales.

Supóngase que $T(X) \in E^{r}_{s}(\mathbb{R}^{N})$ es un campo tensorial definido en la configuración de referencia, contravariante de orden r y covariante de orden s.

Anexo A4

Mediante el operador push forward ϕ_* , se define $t(x) \in E^r_s(\mathbb{R}^N)$ campo tensorial en la configuración deformada, contravariante de orden r y covariante de orden s, como:

$$t^{a_1...a_r}{}_{b_1...b_s} = (\phi_*T)^{a_1...a_r}{}_{b_1...b_s}$$

$$= F^{a_1}{}_{i_1} \cdots F^{a_r}{}_{i_r} \left[T^{i_1...i_r}{}_{j_1...j_s} \right] (F^{-1})^{j_1}{}_{b_1} \cdots (F^{-1})^{j_s}{}_{b_s}$$
(A4.2)

El tensor F es el tensor gradiente de la deformación definido en (3.3.2).

El operador pull back ϕ^* define la operación inversa y viene dado por:

$$T^{i_{1}...i_{r}}_{j_{1}...j_{s}} = (\phi^{*}t)^{i_{1}...i_{r}}_{j_{1}...j_{s}}$$

$$= (F^{-1})^{i_{1}}_{a_{1}}\cdots(F^{-1})^{i_{r}}_{a_{r}} \left[t^{a_{1}...a_{r}}_{b_{1}...b_{s}}\right] F^{b_{1}}_{j_{1}}\cdots F^{b_{s}}_{j_{s}}$$
(A4.3)

Los tres casos que se estudian a continuación corresponden a las aplicaciones más frecuentes de los operadores anteriores.

1. Supóngase que $T \in E^{o_2}(\mathbb{R}^N)$ es un tensor covariante de orden dos, definido en la configuración de referencia. Los tensores de deformaciones, Cauchy-Green, métrico etc, son tensores de este tipo.

Mediante los operadores push forward ϕ_* y pull back ϕ^* se puede definir un otro tensor t covariante de orden dos, en la configuración deformada, que se relaciona con T de la siguiente forma:

$$t_{ij} = (\phi_* \mathbf{T})_{ij} = T_{ab} (\mathbf{F}^{-1})^a{}_i (\mathbf{F}^{-1})^b{}_j$$
$$T_{ab} = (\phi^* \mathbf{t})_{ab} = t_{ij} \mathbf{F}^i{}_a \mathbf{F}^j{}_b$$

Las anteriores expresiones se pueden escribir de forma compacta como:

$$t = F^{-T} \cdot T \cdot F^{-1}$$

$$T = F^{T} \cdot t \cdot F$$
 (A4.4)

El tipo de relación coincide a la empleada en (A4.1).

2. Supóngase que $T \in E^2_o(\mathbb{R}^N)$ es un tensor contravariante de orden dos en la configuración de referencia. En este caso se define t tensor contravariante de orden dos, que satisface las siguientes relaciones:

$$t^{ij} = (\phi_* T)^{ij} = F^a{}_i F^b{}_j t^{ij}$$

 $T^{ab} = (\phi^* t)^{ab} = (F^{-1})^a{}_i (F^{-1})^b{}_j t^{ij}$

Estas expresiones se escriben más comodamente como:

$$t = F \cdot T \cdot F^{-T}$$

$$T = F^{-1} \cdot t \cdot F^{-T}$$
(A4.5)

El tensor de tensiones de Kirchhoff τ y el segundo tensor de tensiones de Piola-Kirchhoff S satisfacen una relación similar a (A4.5).

3. Supóngase que $T \in E^4_o(\mathbb{R}^N)$ es un tensor contravariante de cuarto orden. En este caso se tiene que:

$$t^{ijkl} = (\phi_* T)^{ijkl} = F^i{}_a F^j{}_b F^k{}_c F^l{}_d T^{abcd}$$

$$T^{abcd} = (\phi^* t)^{abcd} = (F^{-1})^a{}_i (F^{-1})^b{}_j (F^{-1})^c{}_k (F^{-1})^d{}_l t^{ijkl}$$
 (A4.6)

Los tensores constitutivos (elástico y elasto-plástico) son ejemplos de las anteriores relaciones. Un estudio riguroso de los anteriores operadores puede encontrarse en [35].

• Derivada de Lie

Sea $\chi(X,t)$ un movimiento del cuerpo Ω . Sea $\psi(X,t) = Q(t)\chi(X,t) + q(t)$ otro movimiento del cuerpo que resulta de superponer al primero un movimiento de cuerpo rígido, que en este caso viene descrito por Q(t) tensor de rotación y q(t) vector de translación. Un tensor espacial τ definido en la configuración resultante del movimiento χ es objetivo [40][47] si el tensor $\hat{\tau}$ definido en la configuración resultante del movimiento ψ se relaciona con τ de la siguiente forma: $\hat{\tau} = Q\tau Q^T$. El principio de objetividad que se exige a muchas propiedades tensoriales es muy importante desde el punto de vista físico. Las tensiones en un cuerpo no estarían bien definidas si como consecuencia de la rotación del cuerpo los valores medidos fueran diferentes.

Como se verá más adelante aquí y en general en todos los modelos de plasticidad, el comportamiento constitutivo del material se describe en términos de variables internas que en muchos casos son campos tensoriales. En general, no se tiene una expresión explícita para éstas, sino una ecuación de su evolución en el tiempo. Un problema que se tiene es que en general la derivada material de un campo tensorial no es objetiva [40]. La derivada de Lie elimina este problema llevando el tensor de la configuración espacial a la material, luego calculando allí su derivada material y por último llevando el resultado nuevamente a la configuración espacial.

La derivada de Lie de un tensor espacial t relativa al flujo asociado con el campo vectorial de velocidades v se define como [35][48]:

$$L_{v} t = \phi_{*} \left[\frac{\partial}{\partial t} \phi^{*} t \right]$$
(A4.7)

Los operadores push forward ϕ_* y pull back ϕ^* actuan dependiendo del caracter tensorial de la variable t, como fue explicado en el apartado anterior. Facilmente se pueden verificar los siguentes resultados:

$$\frac{1}{2}L_{\boldsymbol{v}} \boldsymbol{g} = \boldsymbol{d}, \quad L_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0}, \quad L_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{e} = \boldsymbol{d}$$
(A4.8)

Un análisis riguroso de estos conceptos se encuentra en [35][48].

/