



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE LA COMPUTACIÓN

USO DEL COMPUTO PARA LA SIMULACIÓN DE LA DEFORMACIÓN Y RECUPERACIÓN DE
FORMA EN UNA BARRA DE PU-SMP MM2520.

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE LA COMPUTACIÓN

PRESENTA:
EDEBALDO PEZA ORTÍZ

Directora de tesis
DRA. SUEMI RODRÍGUEZ ROMO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN, UNAM

CIUDAD UNIVERSITARIA, CIUDAD DE MÉXICO ENERO, 2019



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Agradecimientos

Al posgrado en Ciencia e Ingeniería de la computación de la Universidad Nacional Autónoma de México por brindarme la oportunidad de crecimiento y desarrollo profesional en este campo del conocimiento.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por los recursos otorgados mismos que sin los cuales no hubiera sido posible este trabajo.

A la Ing. Melisa Carmen Vargas Olivia, por su amistad y apoyo para el desarrollo de esta tesis y enriquecerla con sus conocimientos y experiencia.

A mis compañeras de generación con las que tuve el placer de convivir y compartir las experiencias que nos dio este posgrado.

A todas aquellas personas que con su valiosa presencia me han acompañado y animado a continuar con mi crecimiento académico.

Al proyecto PAPIIT 101817 por los recursos proporcionados para la adquisición de equipo tanto hardware como software.

ÍNDICE

RESUMEN	6
INTRODUCCIÓN.....	9
Objetivos.....	11
Objetivo general.....	11
Objetivos particulares.....	11
1. ANTECEDENTES.....	12
1.1 PU-SMP MM2520.....	16
1.1.1 Características y propiedades del PU-SMP MM2520	16
2. MARCO TEÓRICO.....	18
2.1 Modelo de Ocho cadenas.....	18
2.2 Transición entre fases rígida y gomosa en el volumen unitario del polímero	20
2.3 Descomposición de la deformación de un polímero que experimenta transición entre fases y esfuerzos proporcionados por cada fase	21
2.4 Modelo constitutivo tridimensional para materiales hiper-elásticos	23
3. MÉTODOS NUMÉRICOS	26
3.1 Método de Elementos Finitos	26
3.2 Discretización del volumen y Función de forma.....	27
3.3 Ecuaciones de elementos finitos para elementos sólidos 3D.....	29
3.3.1 Mapeo isoparamétrico.....	29
3.3.2 Mapeo Jacobiano.....	30
3.3.3 Relación esfuerzo-deformación	32
3.3.4 Matriz de rigidez y Vector de fuerza.....	32
3.3.5 Integración numérica.....	34
3.4 Procedimientos de solución para ecuaciones algebraicas no lineales.....	35
3.4.1 El Método de Newton-Raphson	35
3.4.2 Método de Newton-Raphson modificado.....	37
3.4.3 Método Incremental de la secante.....	37
3.4.4 Método de fuerza incremental	40
3.5 Pasos en la solución del análisis de elementos finitos no lineales.....	40
3.5.1 Determinación del estado	41
3.5.2 Calculo residual	41

3.5.3 Verificación de convergencia.....	42
3.5.4 Solución.....	43
3.5.5 Ecuación Variacional y Linealización.....	43
3.6 Método de Runge-Kutta.....	46
3.6.1 Métodos de Runge-Kutta de cuarto orden.....	47
4. Modelado numérico.....	49
5. SIMULACIÓN Y RESULTADOS.....	62
5.1 Evaluación del modelo constitutivo.....	62
5.2 Resultados de la simulación por el método de elementos finitos en 1D y 3D	68
CONCLUSIONES.....	77
BIBLIOGRAFIA	79
GLOSARIO.....	82

ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA 1. MODELO DE OCHO CADENAS DE POLÍMERO PARA GOMAS ELÁSTICAS, ARRUDA M. Y BOYCE C. [10].	12
FIGURA 2 REPRESENTACIÓN REOLÓGICA DEL MODELO VISCOELÁSTICO DE CUATRO ELEMENTOS, TOBUSHI ET AL. [4].	13
FIGURA 3 REPRESENTACIÓN DE LOS SEGMENTOS DUROS Y BLANDOS EN UN VOLUMEN UNITARIO PARA TPU, H.J. QI Y BOYCE M.C. [11].	13
FIGURA 4 CICLO TERMOMECAÁNICO TÍPICO. STENT I DESPUÉS DE LA CARGA MECÁNICA, II DESPUÉS DE LA CARGA TÉRMICA, III DESPUÉS DE LA DESCARGA MECÁNICA Y IV DESPUÉS DE LA DESCARGA TÉRMICA. S. REESE, M. BÖL Y D. CHRIST [1]	14
FIGURA 5 REPRESENTACIÓN DE LA DESCOMPOSICIÓN DE LA DEFORMACIÓN EN CUATRO ELEMENTOS. MOSTAFA BAGHANI ET AL. [3].	15
FIGURA 6 RED DEL MODELO PROPUESTO EN LA CONFIGURACIÓN DE REFERENCIA, [3].	18
FIGURA 7 EVOLUCIÓN SUPUESTA DE LAS FRACCIONES GOMOSA Y RÍGIDA EN UNA BARRA DE PU-SMP MM2520 [1].	21
FIGURA 8 DIAGRAMA DE LA RED QUE CONSTITUYE EL DOMINIO RÍGIDO EN UN POLÍMERO CON TRANSICIÓN DE FASES.	22
FIGURA 9 REPRESENTACIÓN DEL FENÓMENO DE VISCOSIDAD EN EL DOMINIO COMPLETO DE UN POLÍMERO [9]. ..	22
FIGURA 10 A) DOMINIO CONTINUO, B) DOMINIO DISCRETIZADO POR ELEMENTOS DE HEXAEDRO Y C) CARAS DE LOS HEXAEDROS EN EL DOMINIO DISCRETIZADO.	27
FIGURA 11 ELEMENTO DE BLOQUE HEXAEDRO.	28
FIGURA 12 ELEMENTO SÓLIDO ISOPARAMÉTRICO TRIDIMENSIONAL DE OCHO NODOS. (A) ELEMENTO FINITO. (B) ELEMENTO DE REFERENCIA. J. N. REDDY [25]	29
FIGURA 13 MÉTODO INCREMENTAL DE LA FUERZA. J. N. REDDY [25].	40
FIGURA 14 ALGORITMO DEL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS PARA RESOLVER LA RELACIÓN ESFUERZO-DEFORMACIÓN EN EL PU-SMP MM2520.	50
FIGURA 15 ALGORITMO DEL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS PARA RESOLVER LA RELACIÓN ESFUERZO-DEFORMACIÓN EN EL PU-SMP MM2520.	51
FIGURA 16 ALGORITMO PARA CALCULAR LA MATRIZ GKF Y LOS ESFUERZOS EN EL ELEMENTO FINITO.	54
FIGURA 17 DIAGRAMA DE FLUJO PARA CALCULAR LA FUNCIÓN DE FORMA DE UN ELEMENTO HEXAEDRO Y EL DETERMINANTE DEL ELEMENTO DE REFERENCIA.	55
FIGURA 18 DIAGRAMA DE FLUJO PARA LA CONSTRUCCIÓN DE LAS MATRICES BN Y BG	56
FIGURA 19 DIAGRAMA DE FLUJO PARA CONVERTIR EL ESFUERZO DE CUACHY EN EL SEGUNDO ESFUERZO DE PIOLA-KIRCHOFF.	57
FIGURA 20 ALGORITMO PARA VERIFICAR QUE LA CONECTIVIDAD NODAL SEA CORRECTA Y EL ELEMENTO FINITO EN TURNO TENGA VOLUMEN.	58
FIGURA 21. ALGORITMO PARA RESOLVER LA RELACIÓN ESFUERZO DEFORMACIÓN EN UN ELEMENTO FINITO DE PU-SMP MM2520.	59
FIGURA 22. ALGORITMO PARA RESOLVER LA RELACIÓN ESFUERZO DEFORMACIÓN EN UN ELEMENTO FINITO DE PU-SMP MM2520.	60
FIGURA 23 ALGORITMO PARA CALCULAR EL ESFUERZO EN LAS REGIONES CON COMPORTAMIENTO HÍPER-ELÁSTICO	61
FIGURA 24 ALGORITMO PARA CALCULAR EL ESFUERZO EN LAS REGIONES CON COMPORTAMIENTO VISVO-PLÁSTICO.	61
FIGURA 25 ALGORITMO PARA APROXIMAR EL VALOR DE LA MATRIZ DE RIGIDEZ DEL PUSMP MM2520.	61
FIGURA 26 RESULTADOS DE LA EVALUACIÓN NUMÉRICA DEL MODELO EN 3D DEL EL PU-SMP MM2520 A DIFERENTES VELOCIDADES DE DEFORMACIÓN Y TEMPERATURA CONSTANTE.	63

FIGURA 27 5.1 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN PARA UNA DEFORMACIÓN DE 15.48MM, UNA VELOCIDAD DE 0.002 1/S. TOMA 365 SEGUNDOS ALCANZAR LA DEFORMACIÓN, LA SIMULACIÓN CONSIDERANDO UNA TEMPERATURA DE 5°C. $\sigma_{max} = 44.7 MPa$	64
FIGURA 28 5.2 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN PARA UNA DEFORMACIÓN DE 15.48MM, UNA VELOCIDAD DE 0.002 1/S. TOMA 365 SEGUNDOS ALCANZAR LA DEFORMACIÓN, LA SIMULACIÓN CONSIDERANDO UNA TEMPERATURA DE 25°C. $\sigma_{max} = 13.12 MPa$	64
FIGURA 29 5.3 FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN PARA UNA DEFORMACIÓN DE 15.48MM, UNA VELOCIDAD DE 0.002 1/S. TOMA 365 SEGUNDOS ALCANZAR LA DEFORMACIÓN, LA SIMULACIÓN CONSIDERANDO UNA TEMPERATURA DE 19°C. $\sigma_{max} = 22.45 MPa$	65
FIGURA 30 5.4 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN PARA UNA DEFORMACIÓN DE 15.48MM, UNA VELOCIDAD DE 0.002 1/S. TOMA 365 SEGUNDOS ALCANZAR LA DEFORMACIÓN, LA SIMULACIÓN CONSIDERANDO UNA TEMPERATURA DE 45°C. $\sigma_{max} = 4.89 MPa$	65
FIGURA 31 5.5 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN PARA UNA VELOCIDAD DE DEFORMACIÓN DE $2x1001S$ PARA LA CUAL LE TOMA 0.6 SEGUNDOS ALCANZAR 1.19 UNIDADES DE DEFORMACIÓN VERDADERA. EL TIEMPO DE RECUPERACIÓN ES DE 0.65 SEGUNDOS $\sigma_{max} = 70.1 MPa$	66
FIGURA 32 5.6 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN PARA UNA VELOCIDAD DE DEFORMACIÓN DE $2x10 - 21S$ PARA LA CUAL LE TOMA 60 SEGUNDOS ALCANZAR 1 UNIDAD DE DEFORMACIÓN VERDADERA. EL TIEMPO DE RECUPERACIÓN ES DE 65 SEG. $\sigma_{max} = 32.1 MPa$	66
FIGURA 33 5.7 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN PARA UNA VELOCIDAD DE DEFORMACIÓN DE $2x10 - 11S$ PARA LA CUAL LE TOMA 6 SEGUNDOS ALCANZAR 1.18 UNIDADES DE DEFORMACIÓN VERDADERA. EL TIEMPO APROXIMADO DE RECUPERACIÓN ES DE 6 SEGUNDOS $\sigma_{max} = 60.76 MPa$	67
FIGURA 34 5.8. RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN PARA UNA VELOCIDAD DE DEFORMACIÓN DE $2x10 - 31S$ PARA LA CUAL LE TOMA 600 SEGUNDOS ALCANZAR 0.7 UNIDADES DE DEFORMACIÓN VERDADERA. EL TIEMPO DE RECUPERACIÓN ES DE 200 SEGUNDOS $\sigma_{max} = 15.9 MPa$	67
FIGURA 35 5.9 RESULTADOS DE UNA SIMULACIÓN PARA DEFORMACIÓN UNIAxIAL Y UNIDIMENSIONAL CON 15 ELEMENTOS DE UNA TIRA DE PU-SMP MM2520.	69
FIGURA 36 5.10 INICIO DE LA SIMULACIÓN, LOS ESFUERZOS VALEN CERO	71
FIGURA 37 5.11 LA TIRA DE PU-SMP MM2520 SE HA ESTIRADO 3 MM.....	71
FIGURA 38 5.12 LA TIRA DE PU-SMP MM2520 SE HA ESTIRADO 8 MM.....	72
FIGURA 39 5.13 LA TIRA DE PU-SMP MM2520 SE HA ESTIRADO 11 MM.....	72
FIGURA 40 5.14 LA TIRA DE PU-SMP MM2520 HA ALCANZADO LA DEFORMACIÓN MÁXIMA, 15 MM, $\sigma_{max} = 73.15 MPa$	73
FIGURA 41 5.15 LA TIRA DE PU-SMP MM2520 HA RECUPERADO 1 MM.....	73
FIGURA 42 5.16 LA TIRA DE PU-SMP MM2520 HA RECUPERADO 3.5MM.....	74
FIGURA 43 5.17 LA TIRA DE PU-SMP MM2520 HA RECUPERADO 4.5 MM.....	74
FIGURA 44 5.18 FIN DE LA SIMULACIÓN, LA TIRA DE PU-SMP MM2520 RECUPERO 5.5 MM.....	75

RESUMEN

Esta tesis tiene como objetivo principal realizar simulaciones computacionales del efecto de la memoria de forma en una tira de PU-SMP MM2520 sometida a tensión uniaxial, bajo diferentes condiciones de velocidad de deformación y cambios de temperatura. Para ello se utilizan los métodos numéricos de Elementos Finitos, Newton Raphson, Runge-Kutta, Integración por cuadratura de Gauss y un modelo constitutivo tridimensional propuesto por Pieczyska1 et al [9] para materiales hiper-elásticos para describir la respuesta termomecánica para la deformación finita del PU-SMP MM2520.

Los resultados obtenidos muestran las curvas de esfuerzo deformación, y la distribución de esfuerzos dentro de un modelo tridimensional de elementos finitos que aproximan una tira de PU-SMP MM2520.

Los resultados de las simulaciones del comportamiento de una tira de PU-SMP MM2520 se comparan con respecto a las medidas experimentales de esfuerzo-deformación, los cuales dan una certeza de que los métodos numéricos aplicados son aproximadamente convergentes a los de Pieczyska1 et al [9] los cuales son datos experimentales.

Como consecuencia de la implementación de los métodos numéricos se obtiene un algoritmo para simular la deformación uniaxial y la distribución de esfuerzos en el material PU-SMP MM2520 el cual puede servir como base o complemento para análisis computacional del comportamiento mecánico de este material y para analizar el modelo constitutivo utilizado.

INTRODUCCIÓN

El de efecto de memoria de forma (SME por sus siglas en inglés) es un comportamiento observado en metales, cerámicos y polímeros [12], es responsable de que una pieza fabricada con cualquiera de estos materiales sea deformada de forma permanente y que al aplicarle un estímulo recupere la forma original.

Para los polímeros, este comportamiento ofrece usos prometedores en áreas tales como medicina, alimentos, ingeniería aeroespacial y textil [13].

El PU-SMP MM2520 es un polímero con memoria de forma fabricado por SMP Technologies Inc., empresa japonesa ubicada en la ciudad de Tokyo en Japon, forma parte de una gama de polímeros siendo DiAPLEX su nombre comercial y los cuales están patentados por Mitsubishi Heavy Industries [14].

SMP Technologies Inc., el Institute of fundamental Technological Research, Petru Point Institute of Macromolecular Chemistry y el Aichi Institute of Technology [9], realizan investigación para caracterizar y modelar el comportamiento de polímeros con memoria de forma incluyendo el PU-SMP MM2520.

Además SMP Technology sugiere aplicaciones para sus polímeros con memoria de forma, por lo tanto adquiere relevancia averiguar qué posibilidades ofrece este tipo de materiales en cuanto al trabajo que pueden ser capaces de realizar explotando su memoria de forma.

El enfoque de esta tesis es utilizar un sistema de cómputo para implementar los métodos numéricos de Elementos Finitos, Newton-Raphson, Runge-Kutta, Integración por cuadratura de Gauss y el modelo constitutivo tridimensional (3D) para describir la respuesta termo-mecánica de deformación finita de las SMP, propuesto por H. Jerry Qi et al. [7], con el objetivo de simular el efecto de memoria en una tira de PU-SMP MM2520.

Cabe aclarar que las investigaciones tomadas como referencia para una tira de PU-SMP MM2520, se limitan a una evaluación unidimensional de los modelos constitutivos, Pieczyska1 et al [9].

Esta tesis aporta la implementación del modelo constitutivo tridimensional (3D) para describir la respuesta termo-mecánica de deformación finita de las SMP (H. Jerry Qi et al. [7]) dentro del marco del método de elementos finitos, a fin de obtener simulaciones de deformación, recuperación y distribución de esfuerzos dentro de una tira de PU-SMP MM2520 en tres dimensiones.

La tesis se organiza de la siguiente manera: El capítulo uno se enfoca en dar un panorama general de las investigaciones que se han desarrollado sobre polímeros con memoria de forma tanto en modelación, experimentación y simulación.

En el capítulo dos se describe el marco teórico del modelado matemático para la relación esfuerzo-deformación desarrollados para polímeros. Además, se estudia el modelo constitutivo de ocho cadenas que se utiliza como base para la formulación de un modelo matemático más complejo que predice el comportamiento de esfuerzo deformación bajo cargas uniaxiales de polímeros con memoria de forma de una manera más realista.

En el capítulo tres se presenta una descripción de los métodos numéricos empleados para implementar la simulación de la recuperación de forma en una tira de PU-SMP MM2520.

En el capítulo cuatro se reportan los resultados de las simulaciones computacionales de las pruebas de tensión uniaxial en una tira de PU-SMP MM2520 obtenidos de la compilación de los algoritmos planteados en el capítulo 4.

En el capítulo cinco, se reportan los resultados de las simulaciones computacionales de las pruebas de tensión uniaxial en una tira de PU-SMP MM2520 obtenidos de la compilación de los algoritmos planteados en el capítulo 4.

En el capítulo seis se presentan las conclusiones finales con respecto a la simulación, la comprensión adquirida sobre el modelo utilizado, la experiencia de implementar los métodos numéricos de elementos finitos, Newton-Raphson, Runge-kutta e Integración por cuadratura de Gauss.

Finalmente en el capítulo seis y siete se establecen las referencias y el glosario respectivamente.

Objetivos

Objetivo general

Predecir el ciclo de memoria de forma en una tira de PU-SMP MM2520 utilizando métodos numéricos de elementos finitos, Runge-Kutta, Newton-Raphson e integración por cuadratura de Gauss.

Objetivos particulares

1. Análisis de las investigaciones publicadas del comportamiento esfuerzo-deformación de polímeros con memoria de forma.
2. Estudio de la teoría de la mecánica del medio continuo para la comprensión de modelos hiper-elásticos de la deformación aplicado a polímeros con efecto de memoria de forma.
3. Implementación computacional de métodos numéricos de elementos finitos, Newton Raphson, Runge-kutta e integración por cuadratura de Gauss en un lenguaje de programación de alto nivel.

1. ANTECEDENTES

Con el fin de tomar como base lo efectuado hasta el momento, en este capítulo se muestran los trabajos e investigaciones referentes al estado del arte perteneciente a polímeros con memoria de forma. Los cuales están enfocados al modelado matemático del comportamiento y potenciales aplicaciones.

También se presentan estudios sobre diversos trabajos relacionados con simulación numérica y caracterización de polímeros con memoria de forma para la generación de esfuerzos y deformaciones en que proporcionan predicciones de la funcionalidad de diversos dispositivos.

El estudio de los polímeros con memoria de forma ha adquirido interés en los últimos años, ya que se han encontrado aplicaciones, por ejemplo, el cambio de propiedad reversible en los tejidos inteligentes, impermeables y transpirables [14]. Estas telas inteligentes son capaces de controlar la humedad en el espacio entre el cuerpo y el tejido. Mientras que a temperaturas bajas las telas son menos permeables y retienen el calor corporal, a altas temperaturas aumenta la permeabilidad a la humedad y se libera calor.

Otro tipo de aplicaciones está en las fibras de polímeros con memoria de forma (SMP) compatibles con tejidos vivos que se pueden usar como suturas quirúrgicas inteligentes, que por sí mismas ajustan o libreran los nudos según la demanda [15].

Los sistemas con materiales que cambian de forma pueden ser sometidos a grandes esfuerzos, de tensión y compresión, por lo cual tienen un gran potencial como músculos artificiales [15] para prótesis o exoesqueletos.

Haciendo un análisis del estado del arte se tienen para estas aplicaciones los trabajos de investigación teórica, experimental y de simulación, que se centran en predecir y describir el comportamiento de los polímeros con memoria de forma. Su objetivo es el describir la relación esfuerzo-deformación en polímeros en los que se consideran dos fases volumétricas que a continuación se mencionan.

En 1993 Arruda M. y Boyce C. [10] plantean un modelo de ocho cadenas para predecir el esfuerzo generado en materiales de goma elástica sometidos a grandes deformaciones uniaxiales. Se basa en la idea de considerar que dentro de un cubo unitario de este tipo de materiales se extienden ocho cadenas moleculares, las cuales parten del centro hasta cada una de las ocho esquinas del cubo, por ello el nombre de “modelo de ocho cadenas”, como se muestra en la figura 1.

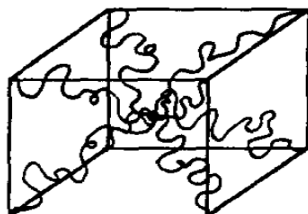


Figura 1. Modelo de ocho cadenas de polímero para gomas elásticas, Arruda M. y Boyce C. [10].

En 1997 Tobushi et al. [4] proponen un modelo constitutivo para describir la memoria de forma en poliuretanos sometidos a pequeñas deformaciones. Toman como base el modelo estándar de la visco-elasticidad lineal compuesto por dos elementos elásticos E_1 , E_2 y un elemento viscoso μ al que agregan un término para el deslizamiento, ε_s , debido a la fricción interna del material, y uno para la expansión térmica, como se observa en la figura 2.

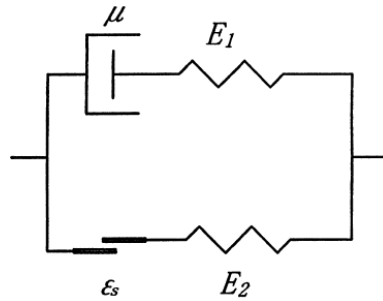


Figura 2 Representación reológica del modelo viscoelástico de cuatro elementos, Tobushi et al. [4].

H.J. Qi y Boyce M.C. [11] presentan en 2004 un estudio de poliuretanos termoplásticos, que son copolímeros compuestos de segmentos duros y blandos (figura 3). Los segmentos duros y blandos se separan para formar una microestructura de dominios duros y blandos en una escala de longitud de unas pocas decenas de nanómetros. Sus estudios han revelado que esta estructura de dominio, evoluciona con la deformación; y creen que esta evolución es la principal fuente de histéresis y ablandamiento cíclico en el material.

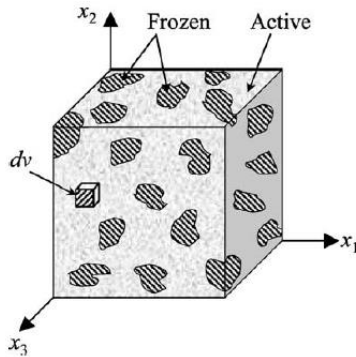


Figura 3 Representación de los segmentos duros y blandos en un volumen unitario para TPU, H.J. Qi y Boyce M.C. [11].

El modelo constitutivo de H.J. Qi y Boyce M.C. [11] captura las principales características del comportamiento de esfuerzo-deformación de los TPU (poliuretanos termoplásticos), incluido el comportamiento hiper-elástico no lineal, la dependencia del tiempo, la histéresis y el reblandecimiento. Su modelo se basa en las observaciones morfológicas de los TPU durante la deformación.

En 2006 Yiping Liu et al. [6] realizan un estudio de la termomecánica del almacenamiento de la forma y la recuperación de una resina epoxi, para detectar pequeñas deformaciones (dentro de $\pm 10\%$) en tensión uniaxial y compresión uniaxial después de la pre-deformación inicial a alta temperatura, la tensión se mantiene constante para el almacenamiento de la forma mientras se monitorea la evolución de la tensión. En su estudio seleccionan tres casos de recuperación calentada: recuperación de tensión libre sin restricciones, recuperación de tensión bajo

restricción total en el nivel de deformación previa a la deformación (sin descarga a baja temperatura) y recuperación de tensión bajo restricción completa a un nivel de deformación fijado a baja temperatura descarga.

Los resultados obtenidos por Yiping Liu et al. [6] para la recuperación de la tensión libre indican que el polímero puede recuperar completamente la forma original cuando se recalienta por encima de su temperatura de transición vítrea (T_g). Debido a la alta rigidez en el estado vítreo ($T < T_g$), la evolución térmica del polímero influye en gran medida en la evolución de la tensión bajo restricción de deformación. La relación entre la deformación recuperable final y la tensión se rige por la respuesta esfuerzo-deformación del polímero por encima de la T_g .

Sobre la base de los resultados experimentales anteriores y el mecanismo molecular de la memoria de forma, Yiping Liu et al. [6] desarrollan un modelo constitutivo variable tridimensional de estado interno de pequeña deformación. Su modelo cuantifica el almacenamiento y la liberación de la deformación entrópica durante los procesos termomecánicos. Este modelo puede predecir la evolución de los esfuerzos de los resultados experimentales uniaxiales que captura diferencias en las respuestas de recuperación de tracción y compresión causadas por la expansión térmica.

En 2008 H. Jerry Qi et al. [7] investigan experimentalmente los comportamientos termomecánicos de deformación finita de las SMP (polímeros con memoria de forma), a base de acrilato de terc-butilo (tBA) monómero y poli (etilenglicol) dimetacrilato (PEGDMA) reticulante en forma líquida. Sobre la base sus observaciones experimentales y la comprensión del mecanismo físico subyacente del comportamiento de la memoria de forma, desarrollan un modelo constitutivo tridimensional (3D) para describir la respuesta termomecánica de deformación finita de las SMP. Implementan el modelo en una subrutina de material de usuario ABAQUS (UMAT) para el análisis de elementos finitos, y las simulaciones numéricas de sus experimentos termo-mecánicos, que verifican la eficiencia de su modelo, el cual sirve como herramienta para el modelado, el diseño de estructuras y dispositivos más complejos basados en SMP.

En 2010 S. Reese, M. Böl y D. Christ [1] utilizan la herramienta “FEAP” (programa de análisis de elementos finitos), en el que plantean un modelo con formulación Neo-Hookean y multifase para un polímero con memoria de forma y simular la recuperación de forma de un stent (tubo implantado en las arterias coronarias), figura 4, e indican que en la fase gomosa la deformación congelada en un polímero con memoria de forma es igual a la deformación total que se mantiene constante en la fase vítrea.

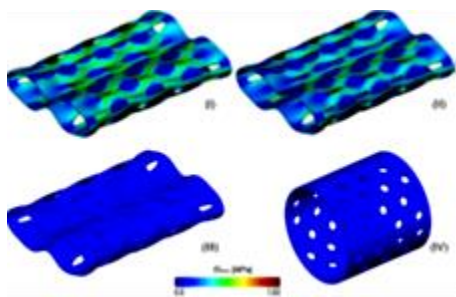


Figura 4 Ciclo termomecánico típico. Stent I después de la carga mecánica, II después de la carga térmica, III después de la descarga mecánica y IV después de la descarga térmica. S. Reese, M. Böl y D. Christ [1]

En 2011 Mostafa Baghani1 et al. [3], proponen un modelo constitutivo para polímeros con memoria de forma en el que consideran un volumen de referencia, donde coexisten dos fases, una elástica y otra rígida, que evolucionan inversamente en función de la temperatura. Parten de una descomposición aditiva de la deformación en cuatro elementos, que son: la deformación térmica, la deformación de la fase rígida, la deformación de la fase elástica y la deformación almacenada y liberada (figura 5), y utilizan la herramienta Abaqus para implementar su formulación de modelo constitutivo dentro de un código de elemento finito no lineal.

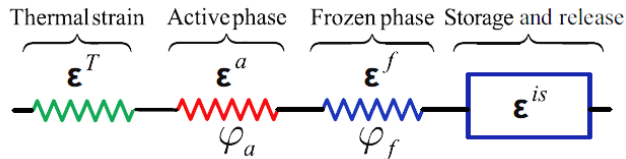


Figura 5 Representación de la descomposición de la deformación en cuatro elementos. Mostafa Baghani1 et al. [3].

En 2014 Yunxin Li et al. [5] plantean un modelo para polímeros con memoria de forma simplificado de tres elementos. Lo implementan en un marco de elementos finitos utilizando la herramienta Abaqus y simulan el comportamiento termo-mecánico. Sus resultados de la simulación los validan con los resultados obtenidos de Tobushi et al. [4].

Pieczyska et al. [8], en 2014 proponen un modelo constitutivo de SMP válido para la deformación finita, en el que describen como un SMP de dos fases; una fase gomosa hiperelástica y una fase de vidrio visco-plástica-elástica. El contenido de volumen de las fases se especifica por la temperatura.

Los resultados obtenidos por Pieczyska et al. [8] indican que a mayores deformaciones el esfuerzo y la temperatura aumentan significativamente, causado por la reorientación de las cadenas moleculares del polímero, seguido por la caída del esfuerzo y su posterior aumento que acompaña a la ruptura de la muestra.

En 2015 Julie Diani et al. [2] modelan y simulan el comportamiento termo-mecánico para un polímero de red epóxica 12DA3 con memoria de forma, para el cual consideran un comportamiento visco-elástico lineal. Utilizan un enfoque de elementos finitos dentro de la herramienta Abaqus para modelar el comportamiento del material y toman como base el modelo generalizado de Maxwell, del que simulan la retención y recuperación de forma de la red epóxica.

Se exponen el modelado, caracterización y experimentación de Pieczyska et al. [9] que en 2015 hacen pruebas de tensión uniaxial del polímero con memoria de forma PU-SMP MM2520 para caracterizar el material mediante pruebas de análisis mecánico-dinámico y análisis termo-gráfico. Con estas pruebas identifican los 17 parámetros (coeficiente de expansión térmica para la fase gomosa y la fase vítrea, el módulo de compresibilidad para la fase gomosa y la fase vítrea, extensión de las cadenas moleculares para la fase gomosa y la fase vítrea, las dos constantes de Lamé, módulo de esfuerzo cortante inicial, velocidad de deformación de referencia por esfuerzo cortante, grado de sensibilidad a la velocidad de deformación, esfuerzo de cedencia inicial, módulo de endurecimiento lineal, esfuerzo de saturación, coeficiente para velocidad de

saturación, nivel de saturación del esfuerzo que requiere el modelo tridimensional para deformación finita de H. Jerry Qi et al. [7], del que comparan las predicciones con respecto a los datos de las pruebas de tensión uniaxial experimentales.

Estos modelos requieren de la implementación del método numérico de elemento finito (MEF), ya que permite una aproximación de la solución a la formulación variacional de las ecuaciones diferenciales que describen el esfuerzo en un sólido continuo, lo cual se toma como base para el desarrollo de esta tesis.

1.1 PU-SMP MM2520

El PU-SMP MM2520 es un poliuretano con memoria de forma de base éter diseñado para que la transición entre fases vítrea y gomosa ocurra a los 25°C con precisión de +/-1 °C y manifestar una amplia recuperación de forma inducida por cambios en la temperatura. Comercializado por SMP Technologies Inc. empresa Japonesa ubicada en la ciudad de Tokyo, su actividad se centra en la fabricación, venta e investigación de polímeros con memoria de forma.

1.1.1 Características y propiedades del PU-SMP MM2520

SMP Technologies presenta las propiedades en la tabla 1 del PU-SMP MM2520 sin garantizar la precisión de los mismos indicando que son valores medidos, [16].

Propiedad	Unidad	Fase rígida	Fase gomosa
Dureza	HDD	78	26
Módulo de elasticidad	MPa	-----	3
Resistencia a la tracción	MPa	45	12
Elongación	%	30-50	>600
Módulo de flexión	MPa	2450	-----
Resistencia al flexión	MPa	90	-----
Peso específico			1.25
Temperatura de transición entre fases	°C		25

Tabla 1. Propiedades mecánicas del PU-SMP MM2520 publicadas por SMP Technologies Inc. Recuperada de [16].

La fórmula de este poliuretano esta patentada por Mitsubishi Heavy Industries bajo el nombre de DiAPLEX, es un material biocompatible por lo que ha sido autorizado por el Ministerio de Salud y Bienestar de Japón para su interacción con el cuerpo humano en los siguientes marcos [16]:

- Norma Japonesa para la regulación en aditivos alimentarios
- Ley de Higiene Alimentaria de Japón
- El Ministerio japonés de Salud y Bienestar
- Ley de asuntos farmacéuticos de Japón.

El DiAPLEX muestra una disipación de energía definida por un factor $\tan(\delta)$ que cambia con la temperatura y se vuelve muy grande en comparación con los materiales elásticos ordinarios. (El factor $\tan(\delta)$ de estos materiales está en el rango de 0.2 a 0.4 [17]).

La disipación de energía para el DiAPLEX en la región de la temperatura de transición es muy similar al de la piel humana, proporcionando una sensación de suavidad natural al tacto. A modo de comparación, el factor de disipación de energía $\tan(\delta)$ para el antebrazo, la piel de la frente y la palma en una persona son de 0.43, 0.51 y 0.41 respectivamente [17].

Como aplicaciones para el PU-SMP MM2520 podemos encontrar [16], aquellas que utilizan la variación del módulo de elasticidad para dispositivos de Autochoke para motor, cánula intravenosa, y como aplicación en desarrollo para interruptores sensibles a la presión. Para aplicaciones que emplean la recuperación de forma. La compañía sugiere; utensilios para personas con capacidades limitadas, Pelucas, Juguetes, Moldes quirúrgicos, Estructuras auto-desplegables, sujetadores de desmonte rápido, entre otros, [16]. En aplicaciones especiales investigan su uso para etiquetas de identificación, músculos artificiales, plantillas para zapato de esquiar, memoria de forma en fibras naturales y como Película termo-encojible. Considerando sus propiedades de amortiguamiento identifican potenciales usos en; lencería en general (Copa sujetador), almohadilla de nariz y almohadilla de oreja para lentes, como material de amortiguación. En usos especiales la empresa indica la posibilidad de fabricar con este material vasos sanguíneos artificiales. La permeabilidad del polímero a los gases también se modifica con la temperatura y este comportamiento se explota en las fibras textiles transpirables, película para control de humedad, recubrimiento para telas, zapatos, ropa anfibia, en aplicaciones avanzadas sugieren la posibilidad de fabricar piel artificial y película para separar gases.

2. MARCO TEÓRICO

En este capítulo se presenta la teoría básica que describe el comportamiento del material, características y propiedades del mismo, además del modelo constitutivo utilizado para describir el comportamiento del PU-SMP MM2520 partiendo del modelo de Arruda-Boyce [10], así como la descripción de la transición de fases rígida y elástica del polímero que permite fijar los esfuerzos para definir su deformación. Se define elasticidad y esfuerzos en mecánica del medio continuo, también se definen los métodos numéricos y los pasos involucrados para su implementación.

2.1 Modelo de Ocho cadenas

Para la formulación del modelo de Ocho Cadenas [10], se consideran las longitudes laterales del cubo unitario en el estado de referencia se indican con a_0 , y la longitud de la cadena sin deformar r_0 de la ecuación 2.1, que se observa en la figura 6.

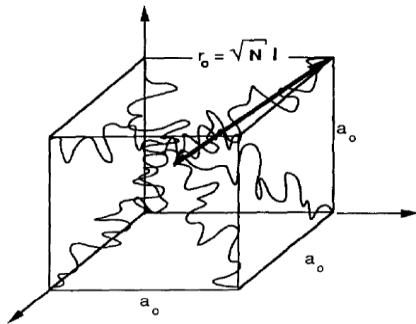


Figura 6 Red del modelo propuesto en la configuración de referencia, [3].

donde

$$r_0 = a_0 \sqrt{3} \quad 2.1$$

La distancia promedio de extremo a extremo de las cadenas moleculares se define en la ecuación 2.2 [10].

$$l\sqrt{n} \quad 2.2$$

donde

n: Número de enlaces en la cadena

l: Longitud de cada uno de los n enlaces en la cadena del polímero

La deformación λ de la cadena molecular está relacionada con las deformaciones $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ [10], a lo largo de los ejes principales de deformación mediante la ecuación 2.3.

$$\lambda = \sqrt{\frac{\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2}{3}} = \sqrt{\frac{I_1}{3}} \quad 2.3$$

donde

I_1 Es el primer invariante de deformación

Un material de ocho cadenas se define como un material hiper-elástico e isotrópico cuya energía libre de Helmholtz por unidad de volumen de referencia, solo depende de dos invariantes principales I_1 en λ , e I_2 en J y de la temperatura del material θ . Entonces, la función energía de deformación es una función $w(\lambda, J, \theta)$ [10], esta función se define en la ecuación 2.4.

$$w = nk\theta N \left(\frac{r_{chain}}{Nl} \beta + \ln \left(\frac{\beta}{\sinh(\beta)} \right) \right) - \theta C' \quad 2.4$$

donde

N Densidad de la cadena molecular.

k Constante de Boltzman.

θ Temperatura en °K.

λ Deformación uniaxial del material.

λ_{chain} Límite del estiramiento de la cadena de polímero en el material.

β Función inversa de Langevin

El esfuerzo σ generado en un material de ocho cadenas se obtiene al integrar [10] la ecuación 2.4 con respecto al cambio de longitud es decir la deformación. Con lo cual se obtiene el esfuerzo de Cauchy-Green conocido también como esfuerzo verdadero, ecuación 2.5.

$$\sigma = \frac{nk\theta}{3} N \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\lambda_{chain}}{\sqrt{N}} \right) \frac{\lambda^2}{\lambda_{chain}} \quad 2.5$$

Donde

N Densidad de la cadena molecular.

k Constante de Boltzman.

θ Temperatura en °K.

λ Deformación uniaxial del material.

λ_{chain} Límite del estiramiento de la cadena de polímero en el material.

\mathcal{L}^{-1} Función inversa de Langevin

Cuando un polímero compuesto por dos fases experimenta deformación, fase rígida y fase gomosa, cada una de las fases contribuye con cierta porción del esfuerzo total del material, cabe aclarar que no se consideran los efectos de la temperatura dentro del modelo constitutivo, para el propósito de esta tesis, y dicha transición de fases lleva a cabo dos procesos, que describen su comportamiento.

2.2 Transición entre fases rígida y gomosa en el volumen unitario del polímero

Las fracciones rígida y gomosa aportan resistencia a la deformación, se considera un volumen de polímero como la unión de dos redes con sus comportamientos respectivos, una red elástica que representa a las fracciones gomosas dentro del volumen y la otra red visco-plástica.

Los procesos de transición de las fases rígida y gomosa establecen que [7]:

- (1) La transición de un dominio gomoso dominado por la energía entrópica a altas temperaturas a un dominio rígido dominado por la energía interna a bajas temperaturas.
- (2) El almacenamiento de la deformación producida a altas temperaturas durante el enfriamiento del polímero.

En el primer proceso, la transición de dominios y por ende la transición de la energía se describe como el cambio en la energía de Helmholtz [7], expresada en la ecuación 2.6.

$$H_{Helmholtz} = f_r(T)H_r + f_g(T)H_g, \quad \text{con} \quad f_r(T) + f_g(T) = 1 \quad 2.6$$

Entonces la evolución de f_r y f_g de la ecuación 2.6 capturarán la transición de la energía de Helmholtz y por ende la transición entre fases, H_r representa la función energía de deformación de las fracciones gomosas en un volumen de polímero y H_g representa la función energía de deformación de las fracciones rígidas en un volumen de polímero, ecuación 2.6 [7].

La condición de separación de las fracciones de volumen de la fase gomosa y fase rígida son funciones únicas de la temperatura.

En la figura 7 se muestra el comportamiento que manifiesta f_r y f_g , ecuación 2.7, con el cambio de la temperatura.

$$f_r = \frac{1}{1+e\left(\frac{-T-T_r}{A}\right)} \quad \text{y} \quad f_g = 1 - \frac{1}{1+e\left(\frac{-T-T_r}{A}\right)} \quad 2.7$$

donde

- A Parámetro que caracteriza el ancho de la zona de transición de fase en el polímero.
- T_r Temperatura de referencia cercana a T_{trans} .
- T Temperatura a la que se encuentra el polímero.

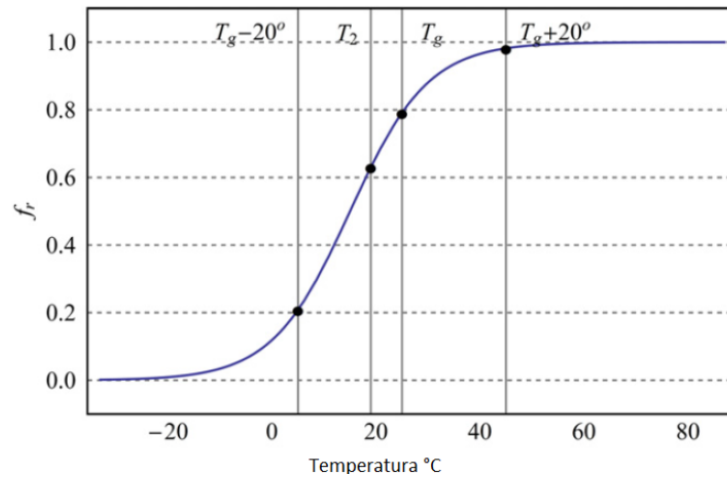


Figura 7 Evolución supuesta de las fracciones gomosa y rígida en una barra de PU-SMP MM2520 [1].

f_r y f_g de la ecuación 2.7, son una parte fundamental para la simulación de la recuperación de forma en el PU-SMP MM2520.

2.3 Descomposición de la deformación de un polímero que experimenta transición entre fases y esfuerzos proporcionados por cada fase

Para el modelado de elasticidad, viscosidad y plasticidad es común representar un cuerpo que tiene estos comportamientos como la conexión serié-paralelo de elementos elásticos, viscosos y plásticos. Cada uno de ellos aporta un comportamiento al proceso de deformación y recuperación de forma, por ejemplo, en la figura 8, ilustra la fracción híper-elástica y viscoplástica en un material híper-elástico, estos elementos son utilizados para descomponer la deformación del material en términos de deformación elástica, visco-elástica y plástica.

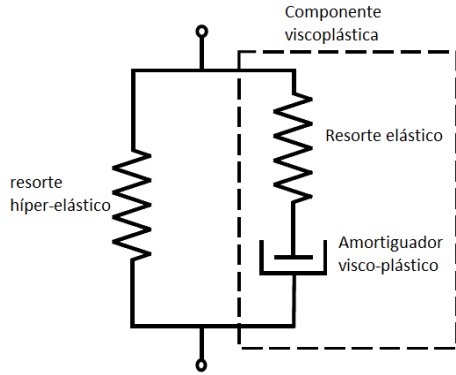


Figura 8 Diagrama de la red que constituye el dominio rígido en un polímero con transición de fases.

En el caso de los polímeros con memoria de forma, la fracción visco-plástica es la responsable de que la deformación se sostenga al disminuir la temperatura del polímero por debajo de su T_g . En la figura 9 se observa la representación del fenómeno de viscosidad en el dominio completo en un polímero, se separan los elementos que representan las fases gomosa y rígida, \mathbf{F} es el gradiente de deformación total de las ramas de esta red, \mathbf{F}_r es el gradiente de deformación de la fase gomosa, \mathbf{F}_g^I es el gradiente de deformación de la rama hiper-elástica del dominio rígido, \mathbf{F}_g^e es el gradiente de deformación de la sección elástica de la rama visco-elástica del dominio rígido, \mathbf{F}_g^v es el gradiente de deformación de la sección viscosa de la rama visco-elástica del dominio rígido [8].

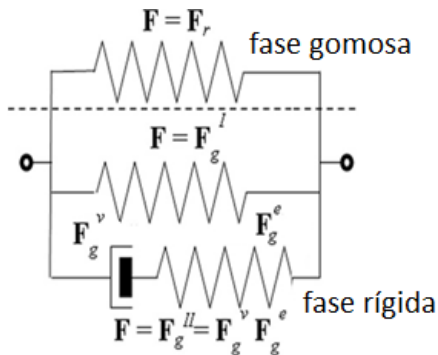


Figura 9 Representación del fenómeno de viscosidad en el dominio completo de un polímero [9].

\mathbf{F} se descompone en $\mathbf{F} = \mathbf{F}_g^e \mathbf{F}_g^v$, esta descomposición multiplicativa de \mathbf{F} resulta en una descomposición aditiva del gradiente de velocidad de deformación L_g de la ecuación 2.8 [9].

$$L_g = \dot{\mathbf{F}}_g^e (\mathbf{F}_g^e)^{-1} + W_v + D_v \quad 2.8$$

donde

- W_v Parte simétrica sesgada del gradiente de deformación visco-plástico.
- D_v Parte simétrica del gradiente de deformación visco-plástico.

Para materiales isotropos se utiliza la ecuación 2.9.

$$W_v = 0 \text{ y } D_v = \dot{\gamma}^v N_g^v \quad 2.9$$

2.4 Modelo constitutivo tridimensional para materiales hiper-elásticos

El PU-SMP MM2520 puede presentar tres comportamientos, elástico, hiper-elástico y viscoplástico, de los cuales, en la ecuación 2.10 se representa el esfuerzo que se genera dentro de la zona visco-plastica σ_g^{II} de la fase rigida del material.

$$\sigma_g^{II} = \frac{1}{J_g} (G_g \text{Ln}(F_g^e F_g^{eT}) + \lambda_g \text{Ln}(J_g) I - \alpha_g (3\lambda_g + 2G_g) \Delta T I) \quad 2.10$$

donde

- F_g^e Gradiente de deformación de la rama visco-elástica.
- λ_g Primer constante de Lamé para ala rama visco-elástica.
- G_g Segunda constante de Lamé para la rama visco-elástica.
- ΔT Cambio de temperatura debio a la deformación.
- I Tensor unitario de cuarto orden.
- J_g Determinante del gradiente de deformación de la rama visco-elástica.

Las ecuaciones 2.11 y 2.12 constituyen la base para calcular el gradiente de deformación F_r^e necesario para calcular el esfuerzo de Cauchy-Green σ_g^{II} , [9].

Los términos N_g^v y τ_{gv} son la tensión que actúa sobre el componente viscoplástico convectado a su configuración relajada y el esfuerzo cortante equivalente definidos en las ecuaciones 2.11 y 2.12 respectivamente.

$$N_g^v = \sqrt{\frac{3\sigma_g^{III}}{2\tau_{gv}}} \quad 2.11$$

$$\tau_{gv} = \sqrt{\frac{3}{2} \sigma_g'^{II} \sigma_g'^{II}} \quad 2.12$$

donde

$\sigma_g'^{II}$ Parte de distorsión del esfuerzo de Cauchy-Green σ_g^{II} .

El gradiente de deformación de la zona elástica de la fase rígida F_r^e , se calcula con la ecuación diferencial 2.13, 2.14 y 2.15 [9]. Que se utilizan para evaluar al deformación que experimenta la zona visco-plástica del PU-SMP MM2520.

$$\dot{F}_g^v = \dot{\gamma}^v (F_r^e)^{-1} N_g^v F_g^{II} \quad 2.13$$

$$\dot{\gamma}_v = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau_{gv}}{\tau_{gv}^c} \right|^{m+1} \quad 2.14$$

$$\tau_{gv}^c = h\gamma_v + \tau_{sat} + (\tau_0 - \tau_{sat})e^{-b\gamma_v} \quad 2.15$$

donde

- h, τ_0, τ_{sat}, b Parámetros experimentales utilizados para describir el comportamiento elastoplástico del dominio rígido.
- m Parámetro que indica la sensibilidad del modelo a la velocidad de deformación.
- γ_v Deformación visco-plástica por cortante en el dominio rígido.
- $\dot{\gamma}_0$ Velocidad de deformación de referencia para calcular $\dot{\gamma}_v$.

Se observa que la ecuación 2.13 depende de la ecuación 2.14, sin embargo la 2.14 es independiente de la 2.13 por lo que no constituyen un sistema acoplado además de que son un par de ecuaciones diferenciales, en el caso de la 2.13, esta es una ecuación diferencial ordinaria que depende de la variable velocidad de deformación visco-plástica por cortante en el dominio rígido $\dot{\gamma}_v$, y la ecuación 2.14 es una ecuación diferencial ordinaria que depende del tiempo t .

En esta tesis las ecuaciones 2.13 y 2.14 se resuelven utilizando el método de Runge-kutta de cuarto orden.

Las ecuaciones 2.16 y 2.17 corresponden a los esfuerzos de la fase gomosa σ_r y la fracción hiper-elástica de la fase rígida σ_g^I respectivamente. Dichas ecuaciones se utilizan para evaluar el esfuerzo dentro del material en terminos de la deformación total sufrida por el PU-SMP MM2520 al aplicar una carga de tensión axial al mismo.

$$\sigma_r = \frac{\mu_r \sqrt{N_r}}{3J_r \lambda_{ch}} L^{-1} \left(\frac{\lambda_{ch}}{\sqrt{N_r}} \right) dev[\bar{B}'] - k_r (J_r - 1 - 3\alpha_r \Delta T) I \quad 2.16$$

$$\sigma_g^I = \frac{\mu_g \sqrt{N_g}}{3J_g \lambda_{ch}} L^{-1} \left(\frac{\lambda_{ch}}{\sqrt{N_g}} \right) dev[\bar{B}'] - k_g (J_g - 1 - 3\alpha_g \Delta T) I \quad 2.17$$

donde

F Gradiente de deformación de la red correspondiente.

J Determinante del gradiente de deformación.

\sqrt{N} Límite de la extensibilidad de las cadenas moleculares.

κ Módulo de compresibilidad.

α Constante de expansión térmica.

ΔT Cambio en la temperatura debido a la deformación.

$$\bar{F} = J^{-\frac{1}{3}} F, \quad \bar{B} = \bar{F} \bar{F}^T, \quad \bar{B}' = \bar{B} - \frac{1}{3} (tr(\bar{B})) I, \quad \lambda_{ch} = \sqrt{\frac{tr(\bar{B})}{3}}$$

Considerando los esfuerzos generados en cada zona del material se utiliza la ecuación 2.18 [1].

$$\sigma_T = f_r \cdot \sigma_r + f_g \cdot (\sigma_g^I + \sigma_g^{II}) \quad 2.18$$

La ecuación 2.18 calcula el esfuerzo verdadero o de Cauchy que se produce en un volumen unitario de material hyper-elastico que manifieste transición una entre dos fases en función de la temperatura.

Uno de los objetivos de este trabajo es determinar la distribución de esfuerzos durante la deformación y la recuperación de forma de una tira rectangular de PU-SMP MM2520, el método elegido para ello es el método de elementos finitos, MEF, por lo que, se propone en esta tesis incorporar la ecuación 2.18 que involucra una función de transición de fases f_r y f_g en el procedimiento del método de elementos finitos

para evaluar el esfuerzo en cada elemento en función de la deformación que experimente y la temperatura a la que se encuentre la tira de material, así como también construir la matriz de rigidez del material necesaria para la evaluación del MEF, de manera que con lo anterior se obtiene un algoritmo para realizar simulaciones del ciclo de memoria de forma.

3. MÉTODOS NUMÉRICOS

En este apartado se describe la metodología para la solución de las ecuaciones diferenciales que describen el comportamiento del PU-SMP MM2520 y los modelos numéricos para la solución del modelo de ocho cadenas de Arruda-Boyce [10].

3.1 Método de Elementos Finitos

El método de elementos finitos es un método numérico general para la aproximación de soluciones de ecuaciones diferenciales, implementado principalmente para la transformación de ecuaciones diferenciales parciales, en un sistema de ecuaciones lineales que al resolverse aproxime la solución de la ecuación original [23]. Consiste en una serie de pasos bien establecidos:

- Discretización del dominio y construcción de los elementos finitos.
- Integración de la ecuación diferencial en cada elemento finito.
- Aproximación de las integrales para obtener una expresión discreta.
- Formulación del sistema lineal de ecuaciones aplicando las aproximaciones a cada elemento finito, así como las condiciones de frontera.

El método se basa en discretizar el dominio del problema en un número finito de elementos. Cada elemento contendrá una porción de información del conjunto, según su ubicación en el espacio, y dicha información se transfiere a los nodos que conforman cada uno de los elementos y es de interés para el análisis extraer esa información.

Un elemento finito típico, está definido por sus nodos $i, j, k, l, etc.$ y fronteras de línea recta. Los desplazamientos nodales \mathbf{u} en cualquier punto del elemento, pueden ser aproximados al vector $\hat{\mathbf{u}}$.

$$\mathbf{u} \approx \hat{\mathbf{u}} \sum_k^n N_k \mathbf{a}_k^e = [N_i, N_j, \dots] \begin{bmatrix} \mathbf{a}_i \\ \mathbf{a}_j \\ \vdots \end{bmatrix}^e = \mathbf{N} \mathbf{a}^e \quad 3.1$$

donde \mathbf{N} son las funciones de forma y \mathbf{a}^e representa la lista de desplazamientos nodales para un elemento particular e .

Los desplazamientos se definen en función de las coordenadas del sistema de referencia. Para el caso en tres dimensiones se definen como la ecuación 3.2

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u(x, y, z) \\ v(x, y, z) \\ w(x, y, z) \end{bmatrix} \quad 3.2$$

donde u , v y w representan los movimientos horizontales, verticales y de profundidad de un punto dentro de un elemento

$$\mathbf{a}_i = \begin{bmatrix} u_i \\ v_i \\ w_i \end{bmatrix} \quad 3.3$$

u_i , v_i y w_i son los correspondientes desplazamientos del nodo i .

3.2 Discretización del volumen y Función de forma

El primer paso es discretizar el volumen en un número determinado de elementos finitos, para ello, se han desarrollado algoritmos y existen herramientas para descomponer un plano, superficie o volumen en un conjunto de elementos delimitados por nodos y líneas de conexión, a esta tarea se le denomina mallado del dominio como se muestra en la figura 10.

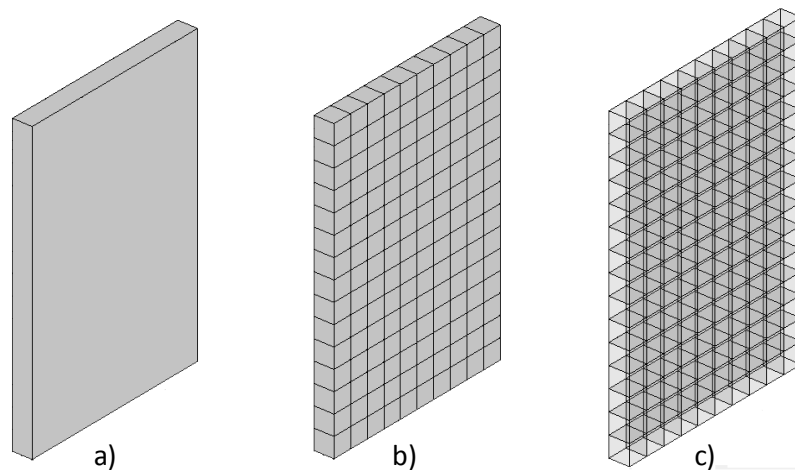


Figura 10 a) Dominio continuo, b) Dominio discretizado por elementos de hexaedro y c) Caras de los hexaedros en el dominio discretizado.

En la figura 3.1a se muestra el dominio de un volumen rectangular, en esta configuración el dominio se considera continuo, en la figura 3.1b se observa el dominio discretizado en elementos con forma de hexaedro, la figura 3.1c muestra las caras de los elementos con transparencia para visualizar las seis caras de cada uno.

Cabe señalar que la función de forma utilizada corresponde a un elemento de bloque por lo que la discretización del volumen debe ser tal que todos los elementos finitos sean hexaedros de igual tamaño.

En esta tesis no se consideran los métodos de generación de mallas ya que el algoritmo obtenido requiere de las coordenadas de los nodos que constituyen la discretización del volumen.

La función de forma es la función que interpola la solución, en este caso el estado esfuerzo-deformación, entre los valores discretos obtenidos en los nodos del volumen, por lo tanto, se deben usar las funciones de forma apropiadas, por lo general se eligen polinomios de grado bajo como funciones de forma. En este trabajo se utilizan funciones de forma del tipo bloque conocido también como hexaedro, la figura 11 muestra la configuración de un elemento hexaedro.

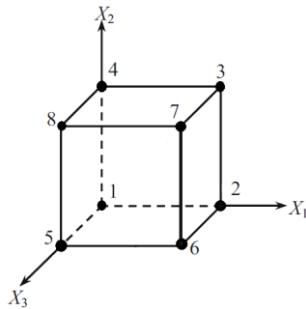


Figura 11 Elemento de bloque hexaedro

3.3 Ecuaciones de elementos finitos para elementos sólidos 3D

3.3.1 Mapeo isoparamétrico

En este trabajo se utiliza elemento hexaédrico isoparamétrico de ocho nodos. La figura 12 muestra un elemento sólido isoparamétrico tridimensional de ocho nodos. El elemento consta de ocho nodos y tres grados de libertad DOF, en cada nodo.

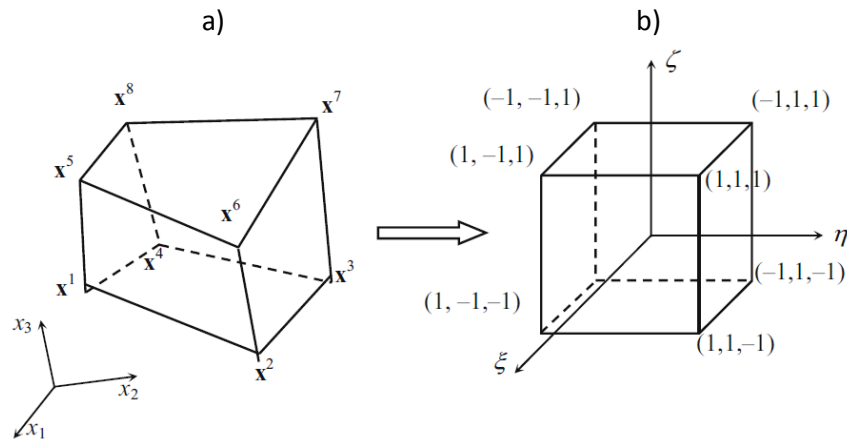


Figura 12 Elemento sólido isoparamétrico tridimensional de ocho nodos. (a) Elemento finito. (b) Elemento de referencia. J. N. Reddy [25]

La secuencia de los números de nodo se debe dar en el mismo orden que la que se muestra en la figura 3.3a. Dado que diferentes elementos tienen formas diferentes, no es una tarea trivial desarrollar las funciones de interpolación para elementos individuales. Se utiliza el concepto de asignación al elemento de referencia.

El elemento físico en la figura 3.3a se mapea en el elemento de referencia que se muestra en la figura 3.3b. El elemento físico se define en las coordenadas x_1, x_2, x_3 , mientras que el elemento de referencia se define en las coordenadas ξ, η, ζ .

El elemento físico puede tener el primer nodo en cualquier esquina, el elemento de referencia siempre tiene el primer nodo en $(1, 1, 1)$.

Las funciones de interpolación se definen en el elemento de referencia para que diferentes elementos tengan la misma función de interpolación. La única diferencia es la relación de mapeo entre los dos elementos. Sea $u_I = [u_{I1}, u_{I2}, u_{I3}]^T$ el vector de desplazamiento en el nodo $I = 1, \dots, 8$ y sea $\xi_I = [\xi_I, \eta_I, \zeta_I]^T$ la coordenada de referencia correspondiente. Para el elemento isoparamétrico, la coordenada y el desplazamiento del elemento se expresan mediante la ecuación 3.4 y la ecuación 3.5 respectivamente

$$\mathbf{x}(\xi) = \sum_{I=1}^8 N_I(\xi) \mathbf{x}_I \quad 3.4$$

$$\mathbf{u}(\xi) = \sum_{I=1}^8 N_I(\xi) \mathbf{u}_I \quad 3.5$$

donde \mathbf{x}_I es la coordenada nodal y $N_I(\xi)$ es la función de forma isoparamétrica definida en la ecuación 3.6.

$$N_I(\xi) = \frac{1}{8} (1 + \xi \xi_I) (1 + \eta \eta_I) (1 + \zeta \zeta_I) \quad 3.6$$

donde (ξ_I, η_I, ζ_I) son los valores de la coordenada de referencia correspondiente al nodo I , cuyos valores son 1.

El elemento sólido está definido por las coordenadas de ocho nodos de esquina x_1, x_2, \dots, x_8 . Estos ocho nodos de esquina se asignan a los ocho nodos de esquina del elemento de referencia. Además, cada punto en el elemento físico también se asigna a un punto en el elemento de referencia. La relación de mapeo es uno a uno, de modo que cada punto en el elemento de referencia también tiene un punto mapeado en el elemento físico.

Esta relación de mapeo se denomina mapeo isoparamétrico porque las mismas funciones de forma se usan para interpolar la geometría así como los desplazamientos. La relación de mapeo anterior es explícita en términos de x_1, x_2 y x_3 , lo que significa que cuando se dan ξ, η y ζ, x_1, x_2 y x_3 se pueden calcular explícitamente a partir de la ecuación 3.4.

3.3.2 Mapeo Jacobiano

Las deformaciones se definen como derivadas de desplazamientos en las coordenadas físicas. Dado que los desplazamientos se interpolan utilizando funciones de forma, es necesario diferenciar las funciones de forma con respecto a las coordenadas físicas. Para ello se utiliza una relación jacobiana y la regla de la cadena representada en la ecuación 3.7.

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}) \quad 3.7$$

La transformación de elementos físicos a elementos de referencia se define utilizando una relación de mapeo. La matriz jacobiana del mapeo se obtiene tomando la derivada de la ecuación 3.4 con lo que se obtiene la ecuación 3.8.

$$J_{3 \times 3} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi} = \sum_{I=1}^8 \mathbf{x}_I \frac{\partial N_I(\xi)}{\partial \xi} \quad 3.8$$

Donde $\frac{\partial N_I(\xi)}{\partial \xi}$ es un vector de fila de tamaño 1×3 .

La matriz jacobiana se utiliza para relacionar las derivadas de las funciones de forma entre las coordenadas físicas y de referencia.

Las derivadas de N_I se definen en la ecuación 3.9.

$$\frac{\partial N_I}{\partial \xi} = \frac{\partial N_I}{\partial \mathbf{x}} \cdot \mathbf{J} \quad 3.9$$

Al utilizar la relación inversa de la ecuación 3.9 las derivadas espaciales de las funciones de forma se obtienen con la ecuación 3.10.

$$\frac{\partial N_I}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial N_I}{\partial \xi} \cdot \mathbf{J}^{-1} \quad 3.10$$

Cabe mencionar que la relación de mapeo entre (x_1, x_2, x_3) y (ξ, η, ζ) no es válida si el jacobiano es cero o negativo en cualquier parte del elemento ($-1 \leq \xi, \eta, \zeta \leq 1$).

El requisito fundamental es que cada punto en el elemento de referencia debe mapearse en el interior del elemento físico y viceversa. Cuando un punto interior en las coordenadas (ξ, η, ζ) se asigna a un punto exterior en las coordenadas (x_1, x_2, x_3) , el jacobiano se vuelve negativo.

Si varios puntos en las coordenadas (ξ, η, ζ) se asignan en un solo punto en las coordenadas (x_1, x_2, x_3) , el jacobiano se convierte en cero en ese punto. Por lo tanto, es importante mantener la forma del elemento para que el jacobiano sea positivo en todas partes del elemento.

3.3.3 Relación esfuerzo-deformación

Usando las derivadas espaciales de las funciones de forma, el vector de esfuerzo se obtiene según la ecuación 3.11

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \sum_{I=1}^8 \mathbf{B}_I \mathbf{u}_I \quad 3.11$$

donde

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} N_{I,1} & 0 & 0 \\ 0 & N_{I,2} & 0 \\ 0 & 0 & N_{I,3} \\ N_{I,2} & N_{I,1} & 0 \\ 0 & N_{I,3} & N_{I,2} \\ N_{I,3} & 0 & N_{I,1} \end{bmatrix} \quad 3.12$$

La ecuación 3.12 es la matriz de esfuerzo-deformación discreto de un elemento sólido, donde $N_{I,1}$ es la derivada espacial de la función de forma en la ecuación 3.9.

3.3.4 Matriz de rigidez y Vector de fuerza

Todas las variables en el elemento físico se asignan al elemento de referencia. Por lo tanto, la integración sobre el dominio del elemento Ω^e , se convierte en integración sobre el elemento de referencia, esto se realiza con la ecuación 3.13

$$\iiint_{\Omega^e} d\Omega^e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 |J| d\xi d\eta d\zeta \quad 3.13$$

Para obtener la matriz de rigidez del elemento, todo el dominio estructural está discretizado por un conjunto de elementos finitos. La forma bilineal de energía 3.14 se construye para cada elemento y, luego, se ensamblan para construir la matriz de rigidez global.

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) = \sum_{I=1}^8 \sum_{J=1}^8 \bar{\mathbf{u}}_I^T \left[\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \mathbf{B}_I^T \mathbf{D} \mathbf{B}_J |J| d\xi d\eta d\zeta \right] \mathbf{u}_J = \{\bar{\mathbf{d}}\}^T [\mathbf{k}] \{\mathbf{d}\} \quad 3.14$$

donde $\{\bar{\mathbf{d}}\} = [u_{11}, u_{12}, u_{13}, u_{21}, u_{22}, u_{23}, \dots, u_{81}, u_{82}, u_{83}]^T$ es el vector de desplazamientos nodales, $\{\mathbf{d}\}$ es el vector de desplazamientos virtuales, y $[\mathbf{k}]$ es la matriz de rigidez de los elementos.

En lugar de tener la suma de los ocho nodos en la ecuación 3.14, es posible que la matriz de esfuerzo-deformación se aumente para todos los nodos en $[\mathbf{B}] = [\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2, \dots, \mathbf{B}_8]$. Entonces, la ecuación anterior se puede escribir sin tener la suma.

La forma de carga tiene la forma de la ecuación 3.15 la cual contiene el término de fuerza corporal y el término de tracción superficial. Solo se considera el caso con la fuerza del cuerpo.

$$\ell(\bar{\mathbf{u}}) = \sum_{I=1}^8 \bar{\mathbf{u}}_I^T \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 N_I(\xi) \mathbf{f}^b |J| d\xi d\eta d\zeta = \{\bar{\mathbf{d}}\}^T \{\mathbf{f}\} \quad 3.15$$

Al igualar las ecuaciones 3.14 y 3.15, la ecuación variacional discreta de un elemento sólido se define en la ecuación 3.16

$$\{\bar{\mathbf{d}}\}^T [\mathbf{k}] \{\mathbf{d}\} = \{\bar{\mathbf{d}}\}^T \{\mathbf{f}\}, \quad \forall \{\bar{\mathbf{d}}\} \in \mathbb{Z}_h \quad 3.16$$

donde $\mathbb{Z}_h \subset \mathbb{R}^{24}$ es el espacio discreto de los desplazamientos cinemáticamente admisibles.

3.3.5 Integración numérica

La formulación del elemento finito requiere integración sobre el dominio o sobre el límite del mismo durante la construcción de la matriz de rigidez del elemento y el vector de fuerza del elemento.

En este trabajo se utiliza la regla de integración de Gauss. Una forma de integración de Gauss se define como la ecuación 3.17.

$$\int_{-1}^1 f(\xi) d\xi \approx \sum_{i=1}^{NG} \omega_i f(\xi_i) \quad 3.17$$

Donde NG es el número de puntos de integración, ξ_i es el punto de integración, y ω_i es el peso de integración. Los puntos de integración y los pesos se eligen de manera que el lado derecho de la ecuación 3.17 se aproxima a los polinomios del lado izquierdo $f(\xi)$. La Tabla 3.1 resume los puntos de integración y los pesos para la integración de Gauss.

Tabla 3.1 Puntos de integración y pesos de Gauss

NG	Puntos de integración ξ_i	Pesos ω_i
1	0.0000000000	2.0000000000
2	+0.5773502692	1.0000000000
	-0.5773502692	
3	+0.7745966692	0.5555555556
	-0.7745966692	0.8888888889
	0.0000000000	
4	+0.8611363116	0.3478546451
	-0.8611363116	0.6521451549
	+0.3399810436	
	-0.3399810436	
5	+0.9061798459	0.2369268851
	-0.9061798459	0.4786286705
	+0.5384693101	
	-0.5384693101	
	0.0000000000	0.5688888889

En los dominios de dos y tres dimensiones, la regla de integración de Gauss se define en las ecuaciones 3.18 y 3.19 respectivamente

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f(\xi, \eta) d\xi d\eta = \sum_{i=1}^{NG} \sum_{j=1}^{NG} \omega_i \omega_j f(\xi_i, \eta_j) \quad 3.18$$

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f(\xi, \eta, \zeta) d\xi d\eta d\zeta = \sum_{i=1}^{NG} \sum_{j=1}^{NG} \sum_{k=1}^{NG} \omega_i \omega_j \omega_k f(\xi_i, \eta_j, \zeta_k) \quad 3.19$$

El costo computacional de la integración de Gauss es proporcional a NG^2 para problemas bidimensionales y NG^3 para problemas tridimensionales.

3.4 Procedimientos de solución para ecuaciones algebraicas no lineales

3.4.1 El Método de Newton-Raphson

Este método numérico para resolver un sistema de ecuaciones no lineales supone una estimación inicial \mathbf{a}_0 y encuentra su incremento $\Delta \mathbf{a}$ para que la nueva estimación $\mathbf{a}_0 + \Delta \mathbf{a}$ se acerque a la solución.

Para hallar el incremento, las ecuaciones no lineales se aproximan localmente por ecuaciones lineales. Este proceso se repite hasta que se satisfacen las ecuaciones no lineales originales.

Encerrando el problema en un solo término, el problema general se formula en función del parámetro de discretización \mathbf{a} , la solución se define en la ecuación 3.20.

$$P(\mathbf{a}_{i+1}) \approx P(\mathbf{a}_i) + K_T^i(\mathbf{a}_i) \cdot \Delta \mathbf{a}_i = f \quad 3.20$$

donde

$K_T^i(\mathbf{a}_i) = \left(\frac{\partial P}{\partial \mathbf{a}}\right)^i$ Es la matriz jacobiana de la i-ésima iteración comúnmente conocida como matriz de rigidez tangente.

$\Delta \mathbf{a}_i$ Incremento en los desplazamientos.

El objetivo es calcular $\Delta \mathbf{a}_i$ y actualizar iterativamente los desplazamientos \mathbf{a}_{i+1} .

Después de reorganizar los términos, el sistema de ecuaciones linealizadas se puede obtener como en la ecuación 3.21

$$\mathbf{K}_T^i \Delta \mathbf{a}_i = \mathbf{f} - P(\mathbf{a}_i) \quad 3.21$$

La ecuación 3.21 es similar a la ecuación matricial de los sistemas lineales, excepto que:

- 1) La matriz del coeficiente $\mathbf{K}_T^i(\mathbf{a}_i)$ no es constante sino una función de \mathbf{a}_i .
- 2) La ecuación resuelve el incremento $\Delta\mathbf{a}_i$ no la solución total \mathbf{a} .
- 3) El lado derecho no es la fuerza aplicada, sino la diferencia entre la fuerza aplicada y la fuerza interna. Esta diferencia se refiere a menudo como un residuo.

Después de resolver el incremento de desplazamiento $\Delta\mathbf{a}_i$ se obtiene una nueva solución aproximada con la siguiente expresión, ecuación 3.22.

$$\mathbf{a}_{i+1} = \mathbf{a}_i + \Delta\mathbf{a}_i \quad 3.22$$

En general, esta solución no satisface el sistema de ecuaciones no lineales de manera exacta por lo que hay una fuerza residual definida por la ecuación 3.23.

$$\mathbf{R}_{i+1} = \mathbf{f} - \mathbf{P}(\mathbf{a}_i) \quad 3.23$$

Si la fuerza de desequilibrio es menor que una tolerancia indicada, la solución \mathbf{a}_{i+1} puede aceptarse como la solución precisa y el proceso se detiene, de lo contrario, el proceso se repite hasta que este residuo se vuelve muy pequeño.

El criterio para terminar las iteraciones se expresa en la forma normalizada mostrada en la ecuación 3.25

$$\text{convergencia} = \frac{\sum_{j=1}^n (R_j^{i+1})^2}{1 + \sum_{j=1}^n (f_j)^2} \quad 3.25$$

Una constante 1 se agrega al denominador para evitar la división por cero cuando no hay cargas aplicadas. Las iteraciones terminan cuando el parámetro de convergencia se vuelve menor que una tolerancia dada.

El método de Newton-Raphson no siempre garantiza la convergencia a la solución precisa.

Primero, supone que el incremento de la solución en la ecuación 3.21 es relativamente pequeño. A medida que aumenta el número de iteraciones, Δu se vuelve más pequeño y, finalmente, se acerca a cero en la solución precisa. Sin embargo, esta suposición se contradice cuando la matriz jacobiana se vuelve singular, o el determinante de la matriz \mathbf{K}_T es cero. En tal caso, Δu se vuelve infinito y la solución diverge.

En segundo lugar, el método puede divergir u oscilar entre dos puntos si el punto de inicio está demasiado lejos de la solución exacta. Esto también sucede cuando la curvatura de la curva $P(u)$ cambia su signo entre dos iteraciones consecutivas. En tal caso, es posible que el algoritmo de Newton-Raphson pueda dar como resultado un bucle infinito. Para evitar un bucle infinito, se establece el número máximo de iteraciones y el algoritmo se detiene con un mensaje de error cuando el número de iteraciones alcanza el número máximo de iteraciones.

El método de Newton-Raphson requiere que en cada iteración, se forme la matriz jacobiana y que se resuelva el sistema de ecuaciones linealizadas para el incremento de la solución. Computacionalmente, estas son tareas caras. En el marco de elementos finitos, la construcción de la matriz de rigidez tangente y la resolución de la ecuación matricial son los dos procedimientos más computacionalmente intensivos.

3.4.2 Método de Newton-Raphson modificado

En el método modificado de Newton-Raphson en lugar de formular una nueva matriz de rigidez tangente en cada iteración, la matriz de rigidez tangente inicial se usa repetidamente para todas las iteraciones. Esto evita la necesidad de reformular la matriz de rigidez tangente en cada iteración, y reduce el tiempo de cómputo requerido para resolver la ecuación matricial.

Al resolver una ecuación matricial, la matriz se descompone primero en formas triangulares inferiores y superiores (descomposición de LU). Después de eso, el vector en el lado derecho se usa para resolver la solución (sustituciones hacia adelante y hacia atrás).

El procedimiento de descomposición de LU es costoso computacionalmente, mientras que las sustituciones hacia adelante y hacia atrás son relativamente baratas. Por ejemplo, si la dimensión de la matriz es $N \times N$, el costo computacional para el procedimiento de descomposición de LU es proporcional a N^2 , mientras que las sustituciones hacia adelante y hacia atrás son proporcionales a N [25]. Cuando se utiliza el método de Newton-Raphson modificado, la LU la matriz descompuesta se mantiene y solo las sustituciones hacia adelante y hacia atrás se utilizan con diferentes residuos en cada iteración.

3.4.3 Método Incremental de la secante

La idea de este método es aproximar la matriz de rigidez tangente sin altos costos computacionales. Esto se logra mediante la actualización progresiva de la matriz de rigidez tangente utilizando la dirección secante entre dos soluciones consecutivas.

La idea principal del método secante incremental se puede explicar claramente usando un solo ejemplo de variable. En la ecuación 3.21, la matriz jacobiana se define como la derivada de la función no lineal $P(u)$ con respecto a la variable desconocida u . La matriz secante se puede obtener utilizando el método de diferencias finitas para aproximar la matriz jacobiana según la ecuación 3.26.

$$k_s^i = \frac{P(u^i) - P(u^{i-1})}{u^i - u^{i-1}} \quad 3.26$$

A medida que u^{i-1} se acerca a u^i , la rigidez secante se acerca a la rigidez tangente del método de Newton-Raphson. Para la primera iteración, el método secante utiliza la misma matriz de rigidez tangente con el método de Newton-Raphson. Después de la primera iteración, se usa la rigidez secante en las iteraciones posteriores en lugar de la rigidez tangente [25].

En el caso de un problema de una sola variable, la dirección secante es la que conecta las dos soluciones consecutivas. El incremento de la solución para la iteración se expresa según la ecuación 3.27

$$\Delta u^i = \frac{u^i - u^{i-1}}{P(u^i) - P(u^{i-1})} (f - P(u^i)) \quad 3.27$$

Teniendo en cuenta que el método de Newton-Raphson tiene una convergencia cuadrática, es más rápido que el método secante. Sin embargo, el método de Newton-Raphson requiere la evaluación de $P(u)$ y su derivada $KT(u)$, en cada iteración, mientras que el método secante solo requiere la evaluación de $P(u)$.

Por lo tanto, cada iteración del método secante es mucho más rápida que la del método de Newton-Raphson. Los métodos que se aproximan a la matriz jacobiana se denominan métodos cuasi-Newton. Son menos costosos que el método de Newton-Raphson, ya que no requieren el cálculo del jacobiano, pero convergen más lentamente que el método de Newton-Raphson [25].

Uno de los primeros métodos para resolver ecuaciones multivariadas no lineales es el propuesto por Broyden [32]. La idea es que la matriz jacobiana se calcula solo en la primera iteración, y después de eso, se actualiza en cada iteración utilizando la actualización de rango uno. El incremento de la solución para la iteración se expresa según la ecuación 3.28.

$$\mathbf{K}_s^i \Delta \mathbf{u}^i = -\mathbf{R}^i \quad 3.28$$

donde \mathbf{K}_s^i es la matriz de rigidez secante y $\mathbf{R}^i = \mathbf{P}(\mathbf{u}^i) - \mathbf{f}$ es el vector del residuo en la iteración i . El signo en la definición de residual se cambia intencionalmente de la ecuación 3.23 para simplificar el algoritmo. Usando las soluciones en dos iteraciones consecutivas, \mathbf{u}^{i-1} y \mathbf{u}^i , se actualiza la matriz de rigidez secante. La matriz actualizada debe satisfacer la ecuación 3.29

$$\mathbf{K}_s^i \cdot (\mathbf{u}^i - \mathbf{u}^{i-1}) = \mathbf{R}(\mathbf{u}^i) - \mathbf{R}(\mathbf{u}^{i-1}) \quad 3.29$$

El objetivo del método secante es actualizar la matriz de rigidez de la secante con los incrementos conocidos en la solución y los términos conocidos en el lado derecho.

El método de Broyden da como resultado la forma de la ecuación 3.30 de una actualización de rango uno.

$$\mathbf{K}_s^i = \mathbf{K}_s^{i-1} + \frac{\Delta \mathbf{R} - \mathbf{K}_s^{i-1} \Delta \mathbf{u}}{\|\Delta \mathbf{u}\|^2} \Delta \mathbf{u}^T \quad 3.30$$

donde $\Delta \mathbf{R} = \mathbf{R}(\mathbf{u}^i) - \mathbf{R}(\mathbf{u}^{i-1})$ y $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{u}^i - \mathbf{u}^{i-1}$.

Una vez que se actualiza la matriz de rigidez secante, se usa la ecuación 3.28 para resolver el nuevo incremento. La nueva solución aproximada se actualiza de acuerdo con la ecuación 3.31.

$$\mathbf{K}_s^i = \mathbf{K}_s^{i-1} + \frac{\Delta \mathbf{R} - \mathbf{K}_s^{i-1} \Delta \mathbf{u}}{\|\Delta \mathbf{u}\|^2} \Delta \mathbf{u}^T \quad 3.31$$

El proceso se mueve a la siguiente iteración, y se repite hasta que el residual satisfaga el criterio de convergencia en la ecuación 3.25.

La fórmula de actualización anterior puede ahorrar tiempo de cálculo al calcular la matriz de rigidez en cada iteración, mientras que la ecuación 3.28 aún debe resolverse en cada iteración. En lugar de actualizar la matriz de rigidez secante, es posible actualizar el inverso de la matriz de rigidez secante directamente para ahorrar costos computacionales al resolver la ecuación matricial. La ecuación 3.28 se reescribe como la ecuación 3.32 [25].

$$\Delta \mathbf{u}^i = -[\mathbf{K}_s^i]^{-1} \mathbf{R}^i \equiv -\mathbf{H}_s^i \mathbf{R}^i \quad 3.32$$

La matriz inversa \mathbf{H}_s^i , se actualiza directamente, a partir de la inversa inicial de la matriz de rigidez. Broyden utilizó la fórmula de Sherman-Morrison para actualizar la inversa de la matriz de rigidez de la secante como ecuación 3.33.

$$-\mathbf{H}_s^i = \mathbf{H}_s^{i-1} + \frac{\Delta \mathbf{u}^i - \mathbf{H}_s^{i-1} \Delta \mathbf{R}}{(\Delta \mathbf{u}^i)^T \mathbf{H}_s^{i-1} \Delta \mathbf{R}} \left((\Delta \mathbf{u}^i)^T \mathbf{H}_s^{i-1} \right) \quad 3.33$$

3.4.4 Método de fuerza incremental

La idea del método de fuerza incremental es aplicar la carga en incrementos. Dentro de cada incremento de carga, el procedimiento es el mismo que el método estándar de Newton-Raphson. El siguiente incremento de carga se aplica después de que la solución correspondiente al incremento de carga anterior haya convergido. La solución convergente en cada incremento se utiliza como una estimación inicial del siguiente incremento.

La Figura 13 ilustra el procedimiento para un solo caso de grado de libertad. En el primer incremento, la ecuación no lineal se resuelve suponiendo que la carga aplicada es Δf_1 , a partir de la estimación inicial de $u^0 = 0$. La magnitud de este incremento se elige de modo que el método numérico pueda converger rápidamente a la solución u^1 . En el segundo incremento, la carga aplicada aumenta a $\Delta f_1 + \Delta f_2$, y se usa la estimación inicial de u^1 , es decir, la solución convergente del incremento anterior.

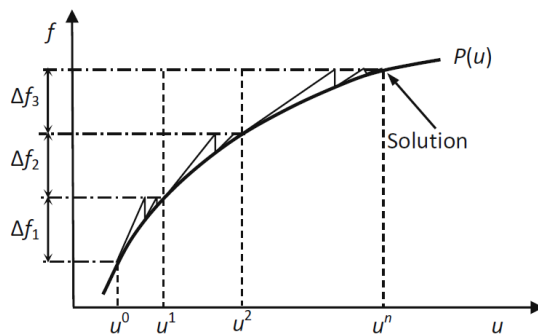


Figura 13 Método incremental de la fuerza.
J. N. Reddy [25]

Nuevamente, la magnitud del incremento Δf_2 , se elige de tal manera que el método numérico pueda converger rápidamente a la solución u^2 . El procedimiento anterior se repite hasta que el incremento de carga aplicado alcance la magnitud completa.

Si el objetivo es la solución en el último incremento de carga es importante calcular las soluciones en los incrementos de carga intermedios. En primer lugar, el historial de la respuesta puede proporcionar información sobre el problema, como la relación entre la carga aplicada y el desplazamiento. La dependencia de la ruta es una razón para dividir la carga completa por un número de pasos de carga [25].

3.5 Pasos en la solución del análisis de elementos finitos no lineales

En el análisis estructural de elementos finitos, las variables desconocidas suelen ser desplazamientos nodales. En los algoritmos iterativos, los incrementos de desplazamiento se calculan en cada iteración y los desplazamientos totales se actualizan utilizando los incrementos hasta que convergen. Por lo tanto, el paso más importante en el proceso de solución es calcular los desplazamientos incrementales. A continuación, se supone que la iteración $k - 1$ se completa, lo que significa que todos los estados en la iteración $k - 1$ están disponibles y se da el vector de desplazamiento \mathbf{d}^k .

3.5.1 Determinación del estado

Para el vector de desplazamiento dado \mathbf{d}^k , es necesario calcular los estados actuales del sistema, como las tensiones y tensiones para problemas estructurales. Para simplificar las siguientes explicaciones, toda la estructura se modela mediante un elemento finito, y la solución de la estructura se aproxima mediante un vector $\mathbf{d}^k = \{d_1, d_2, \dots, d_n\}^T$, de los desplazamientos nodales. En consecuencia, también se supone que hay un vector adecuado de funciones de interpolación $\mathbf{N}(\mathbf{x}) = \{N_1, N_2, \dots, N_n\}$. Entonces, el desplazamiento en un punto \mathbf{x} en la estructura se puede aproximar mediante la ecuación 3.34.

$$\mathbf{u}^k(\mathbf{x}) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{d}^k \quad 3.34$$

La función de interpolación $\mathbf{N}(\mathbf{x})$, se da en la coordenada de referencia. El vector de deformación del elemento se puede calcular mediante la derivada de la ecuación 3.34, el resultado se muestra en la ecuación 3.35.

$$\boldsymbol{\varepsilon}^k(\mathbf{x}) = \mathbf{B} \cdot \mathbf{d}^k \quad 3.35$$

\mathbf{B} es la matriz de esfuerzo-deformación.

3.5.2 Calculo residual

Una vez determinado el estado de la estructura, el siguiente paso es verificar si la estructura está en equilibrio. Si está en equilibrio, las fuerzas nodales debidas a tensiones internas deben ser iguales y opuestas en dirección a las fuerzas nodales aplicadas. La forma débil de equilibrio estructural se escribe como la ecuación 3.36.

$$\int \int \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\bar{\mathbf{u}})^T \boldsymbol{\sigma} d\Omega = \int \int_{\Gamma_s} \bar{\mathbf{u}}^T d\Gamma + \int \int \int_{\Omega} \bar{\mathbf{u}}^T \mathbf{f}^b d\Omega \quad 3.36$$

La ecuación 3.36 se debe satisfacer para todos los desplazamientos virtuales \mathbf{u} que cumplan las condiciones de contorno. La aproximación por desplazamiento virtual se interpola utilizando la ecuación 3.37.

$$\bar{\mathbf{d}}^T \left(\int \int \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} d\Omega = \int \int_{\Gamma_s} \mathbf{N}^T \mathbf{t} d\Gamma + \int \int \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{f}^b d\Omega \right) \quad 3.37$$

La ecuación 3.37 se debe cumplir para desplazamientos virtuales arbitrarios d , esto es equivalente a la ecuación 3.38.

$$\int \int \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} d\Omega = \int \int_{\Gamma_s} \mathbf{N}^T \mathbf{t} d\Gamma + \int \int \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{f}^b d\Omega \quad 3.38$$

El lado izquierdo de la ecuación 3.38 representa las fuerzas nodales equivalentes debido a las tensiones internas, mientras que el lado derecho representa las fuerzas nodales equivalentes debido a las fuerzas aplicadas.

Si la ecuación 3.38 se cumple para los desplazamientos dados, entonces la estructura está en equilibrio. Cuando la estructura no está en equilibrio, la diferencia entre los desplazamientos se define con un vector de residuos como la ecuación 3.39.

$$\mathbf{R}^k = \int \int_{\Gamma_s} \mathbf{N}^T \mathbf{t} d\Gamma + \int \int \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{f}^b d\Omega - \int \int \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}^k d\Omega \quad 3.39$$

El superíndice k denota que la estructura no está en equilibrio en la k -ésima iteración. En la práctica, las integrales en el residual se calculan utilizando integración numérica, como la cuadratura de Gauss.

3.5.3 Verificación de convergencia

El propósito del análisis de elementos finitos no lineales es satisfacer la ecuación 3.36, esto equivale a que el vector de residuos en la ecuación 3.39 sea igual a cero. La iteración se detiene cuando la magnitud del vector residual es menor que una tolerancia específica. En ese caso, la iteración converge y la solución es el desplazamiento actual. Sin embargo, las iteraciones pueden no converger en algunos casos, sin importar cuántas iteraciones se realicen [25].

Para evitar un bucle infinito de la iteración de convergencia, el algoritmo se detiene cuando el contador de iteraciones alcanza el número máximo permitido de iteraciones. En ese caso, el algoritmo se detiene con un mensaje de error. Con el fin de evitar detener el algoritmo con errores, la fuerza se reduce a la mitad y la convergencia se evalúa nuevamente, este procedimiento se denomina método de bisección. El método de bisección se repite hasta que la iteración converja o se alcance el número máximo permitido de bisecciones.

3.5.4 Solución

Una vez que se calcula la matriz de rigidez tangente y el vector de residuos, se resuelve el sistema de ecuaciones lineales 3.40 para el desplazamiento incremental.

$$\mathbf{K}_T^k \cdot \Delta \mathbf{d}^k = \mathbf{R}^k \quad 3.40$$

Donde $\Delta \mathbf{d}^k$ es el vector de desplazamientos incrementales.

Para tener una solución única de la ecuación 3.40, la matriz de rigidez tangente debe ser definida positivamente. El desplazamiento total se actualiza mediante la ecuación 3.41, se completa la k-ésima iteración y se repite el procedimiento para la iteración $(k + 1)$.

$$\mathbf{d}^{k+1} = \mathbf{d}^k + \Delta \mathbf{d}^k \quad 3.41$$

3.5.5 Ecuación Variacional y Linealización.

Una vez que se calcula el esfuerzo a partir de la densidad de energía de deformación, la forma de energía de la ecuación variacional se obtiene usando la formulación de elasticidad no lineal definida en la ecuación 3.42.

$$a(\mathbf{u}, \bar{\mathbf{u}}) = \ell(\bar{\mathbf{u}}), \quad \forall \bar{\mathbf{u}} \in \mathbb{Z}, \quad 3.42$$

Donde las formas de energía y carga se definen en las ecuaciones 3.43 y 3.44 respectivamente

$$a(\mathbf{u}, \bar{\mathbf{u}}) = \int \int_{\Omega} \mathbf{S}(\mathbf{u}) : \bar{\mathbf{E}}(\mathbf{u}, \bar{\mathbf{u}}) d\Omega \quad 3.43$$

$$\ell(\bar{\mathbf{u}}) = \int \int_{\Omega} \bar{\mathbf{u}}^T \mathbf{f}^b d\Omega + \int_{\Gamma^0} \bar{\mathbf{u}}^T \mathbf{t} d\Gamma \quad 3.44$$

La linealización de la forma de energía produce la ecuación 3.45

$$\alpha^*(\mathbf{u}; \Delta \mathbf{u}, \bar{\mathbf{u}}) \equiv \int \int_{\Omega} (\bar{\mathbf{E}} : \mathbf{D} : \Delta \mathbf{E} + \mathbf{S} : \Delta \bar{\mathbf{E}}) d\Omega \quad 3.45$$

La variación de la deformación de Lagrange $\bar{\mathbf{E}}$ en la ecuación (3.45) se escribe en notación vectorial como se muestra en la ecuación 3.46 [25]

$$\{\bar{\mathbf{E}}\} = [\mathbf{B}_N] \{\bar{\mathbf{d}}\} \quad 3.46$$

donde $\bar{\mathbf{d}} = \{d_{11} \ d_{12} \ d_{21} \ d_{22} \ \dots \ d_{42}\}^T$ es la variación de los desplazamientos nodales y $[\mathbf{B}_N]$ es la matriz de deformación-desplazamiento no lineal definida en la ecuación 3.47

$$[\mathbf{B}_N] = \begin{bmatrix} F_{11} N_{1,1} & F_{21} N_{1,1} & F_{11} N_{2,1} & F_{21} N_{2,1} & \dots & F_{21} N_{4,1} \\ F_{12} N_{1,2} & F_{22} N_{1,2} & F_{12} N_{2,2} & F_{22} N_{2,2} & \dots & F_{22} N_{4,2} \\ F_{11} N_{1,2} & F_{21} N_{1,2} & F_{11} N_{2,2} & F_{21} N_{2,2} & \dots & F_{21} N_{4,2} \\ F_{12} N_{1,1} & F_{22} N_{1,1} & F_{12} N_{2,1} & F_{22} N_{2,1} & \dots & F_{22} N_{4,1} \end{bmatrix} \quad 3.47$$

Se utiliza la ecuación (3.46) y el segundo esfuerzo de Piola-Kirchhoff para definir en la ecuación 3.48 la versión discreta de la forma de energía.

$$a(\mathbf{u}, \bar{\mathbf{u}}) = \int \int_{\Omega} \mathbf{S} : \bar{\mathbf{E}} d\Omega = \{\bar{\mathbf{d}}\}^T \int \int_{\Omega} [\mathbf{B}_N]^T \{\mathbf{S}\} d\Omega \equiv \{\bar{\mathbf{d}}\}^T \{\mathbf{f}^{int}\} \quad 3.48$$

donde $\{\mathbf{f}^{int}\}$ es el vector de fuerza interna discretizada. En la ecuación 3.48 se utiliza las notaciones tensoriales y matriciales.

El vector de fuerza externa discretizada se define en la ecuación 3.49

$$\begin{aligned} \ell(\bar{\mathbf{u}}) &= \int \int_{\Omega} \bar{\mathbf{u}}^T \mathbf{f}^b d\Omega + \int_{\Gamma^s} \bar{\mathbf{u}}^T \mathbf{t} d\Gamma \\ \ell(\bar{\mathbf{u}}) &= \sum_{I=1}^{N_e} \bar{\mathbf{u}}_I^T \left\{ \int \int_{\Omega} N_I(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{f}^b d\Omega + \int_{\Gamma^s} N_I(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{t} d\Gamma \right\} \equiv \{\bar{\mathbf{d}}\}^T \{\mathbf{f}^{ext}\} \end{aligned} \quad 3.49$$

Cuando se aplican fuerzas nodales concentradas, estas se agregar directamente a las ubicaciones correspondientes en $\{\mathbf{f}^{ext}\}$. Dado que las cargas aplicadas son independientes de la deformación, la fuerza externa $\{\mathbf{f}^{ext}\}$ es un vector fijo. La versión discreta a resolver de la ecuación variacional no lineal equivale a determinar la fuerza interna que tiene el mismo valor que la fuerza externa tal como lo indica la ecuación 3.50.

$$\{\bar{\mathbf{d}}\}^T \{\mathbf{f}^{int}(\mathbf{d})\} = \{\bar{\mathbf{d}}\}^T \{\mathbf{f}^{ext}\}, \quad \forall \{\bar{\mathbf{d}}\} \in \mathbb{Z}_h \quad 3.50$$

Donde \mathbb{Z}_h es la versión discretizada del espacio \mathbb{Z} .

Como la variación del desplazamiento es cero en los nodos donde se prescriben los desplazamientos, la ecuación 3.50 satisface $\{\mathbf{f}^{int}(\mathbf{d}) = \mathbf{f}^{ext}\}$ para todos los nodos cuyos desplazamientos no están predefinidos.

La ecuación 3.50 se resuelve con el método de Newton-Raphson, que requiere la matriz jacobiana o, de manera equivalente, la matriz de rigidez tangente.

La deformación de lagrange incremental tiene la expresión mostrada en la ecuación 3.51.

$$\{\Delta \mathbf{E}\} = [\mathbf{B}_N] \{\Delta \mathbf{d}\} \quad 3.51$$

El primer término en la forma de energía se escribe como en la ecuación 3.52

$$\int \int_{\Omega} \mathbf{E} : \mathbf{D} : \Delta \mathbf{E} \, d\Omega = \{\bar{\mathbf{d}}\}^T \left[\int \int_{\Omega} [\mathbf{B}_N]^T [\mathbf{D}] [\mathbf{B}_N] \, d\Omega \right] \{\Delta \mathbf{d}\} \quad 3.52$$

donde $[\mathbf{D}]$ es la matriz de rigidez.

El segundo término, la rigidez inicial, de la forma de energía linealizada se escribe como en la ecuación 3.53.

$$\int \int_{\Omega} \mathbf{S} : \Delta \mathbf{E} \, d\Omega = \{\bar{\mathbf{d}}\}^T \left[\int \int_{\Omega} [\mathbf{B}_G]^T [\boldsymbol{\Sigma}] [\mathbf{B}_G] \, d\Omega \right] \{\Delta \mathbf{d}\} \quad 3.53$$

donde

$$[\boldsymbol{\Sigma}] = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_{11} & S_{12} \\ 0 & 0 & S_{12} & S_{22} \end{bmatrix} \quad 3.54$$

$$[\mathbf{B}_G] = \begin{bmatrix} N_{1,1} & 0 & N_{2,1} & 0 & N_{3,1} & 0 & N_{4,1} & 0 \\ N_{1,2} & 0 & N_{2,2} & 0 & N_{3,2} & 0 & N_{4,2} & 0 \\ 0 & N_{1,1} & 0 & N_{2,1} & 0 & N_{3,1} & 0 & N_{4,1} \\ 0 & N_{1,2} & 0 & N_{2,2} & 0 & N_{3,2} & 0 & N_{4,2} \end{bmatrix} \quad 3.55$$

A diferencia de [BN], [BG] proporciona una relación lineal entre el desplazamiento y la deformación.

Se utilizan las ecuaciones (3.52) y (3.53) para calcular la matriz de rigidez tangente por medio de la ecuación 3.56

$$[\mathbf{K}_T] = \int \int_{\Omega} [[\mathbf{B}_N]^T [\mathbf{D}] [\mathbf{B}_N] + [\mathbf{B}_G]^T [\boldsymbol{\Sigma}] [\mathbf{B}_G]] d\Omega \quad 3.56$$

La ecuación 3.56 y la de la fuerza interna en la 3.48 se integran utilizando la regla de cuadratura de Gauss con puntos de integración 2x2.

La versión discretizada de la ecuación incremental en la ecuación 3.42 se escribe en forma de ecuación matricial de elementos finitos como lo indica la ecuación 3.57

$$\{\bar{\mathbf{d}}\}^T [\mathbf{K}_T] \{\Delta \mathbf{d}\} = \{\bar{\mathbf{d}}\}^T \{\mathbf{f}^{ext} - \mathbf{f}^{int}\}, \quad \forall \{\bar{\mathbf{d}}\} \in \mathbb{Z}_h \quad 3.57$$

El sistema lineal de ecuaciones anterior se resuelve de forma iterativa hasta que la fuerza residual desaparezca. Se utilizan diferentes métodos para resolver ecuaciones no lineales, para este trabajo en particular, se emplea el método modificado de Newton-Raphson, donde la matriz de rigidez tangente $[\mathbf{K}_T]$ obtenida en la primera iteración se usa repetidamente. En el caso del método de fuerza incremental, el vector de fuerza externa $\{\mathbf{f}^{ext}\}$ se divide por el número de incrementos, y en el método de Newton-Raphson se emplea en cada incremento de carga.

3.6 Método de Runge-Kutta

Los métodos de Runge-Kutta (RK) son un conjunto de métodos iterativos para la aproximación de soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias, concretamente, del problema de valor inicial, sea la ecuación 3.58.

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y(x)) \quad 3.58$$

Una ecuación diferencial ordinaria, con $f: \Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ donde Ω es un conjunto abierto, junto con la condición de que el valor inicial de f sea $(x_0, y_0) \in \Omega$. Entonces el método RK de orden s tiene la expresión de la ecuación 3.59.

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \quad 3.59$$

donde h es el paso por iteración, entre los puntos x_n y x_{n+1} . Los k_i coeficientes son términos de aproximación intermedios, evaluados en f de manera local, se define f en la ecuación 3.60.

$$k_i = f \left(x_n + h c_i, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j \right), \quad i = 1, \dots, s \quad 3.60$$

Con a_{ij}, b_i, c_i coeficientes propios del esquema numérico elegido, dependiente de la regla de cuadratura utilizada. Los esquemas Runge-Kutta pueden ser explícitos o implícitos dependiendo de las constantes a_{ij} del esquema. Si esta matriz es triangular inferior con todos los elementos de la diagonal principal iguales a cero; es decir, $a_{ij} = 0$ para $j = 1, \dots, s$, los esquemas son explícitos.

3.6.1 Métodos de Runge-Kutta de cuarto orden

Se define un problema de valor inicial en la ecuación 3.61.

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0 \quad 3.61$$

Entonces el método Runge-Kutta de cuarto orden para este problema está dado por la ecuación 3.62.

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6} h (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad 3.62$$

Donde

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$\begin{aligned}
 k_2 &= f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1h\right) \\
 k_3 &= f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2h\right) \\
 k_4 &= f(x_i + h, y_i + k_3h)
 \end{aligned}$$

Así, el siguiente valor (y_{n+1}) es determinado por el presente valor (y_n) más el producto del tamaño del intervalo (h) por una pendiente estimada. La pendiente es un promedio ponderado de pendientes, donde k_1 es la pendiente al principio del intervalo, k_2 es la pendiente en el punto medio del intervalo, usando k_1 para determinar el valor de y en el punto usando el método de Euler. k_3 es otra vez la pendiente del punto medio, pero ahora usando k_2 para determinar el valor de y ; k_4 es la pendiente al final del intervalo, con el valor de y determinado por k_3 . Promediando las cuatro pendientes, se le asigna mayor peso a las pendientes en el punto medio, ecuación 3.63.

$$\text{pendiente} = \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6} \qquad 3.63$$

Esta forma del método de Runge-Kutta, es un método de cuarto orden lo cual significa que el error por paso es del orden de $O(h^5)$, mientras que el error total acumulado tiene el orden $O(h^4)$. Por lo tanto, la convergencia del método es del orden de $O(h^4)$, razón por la cual es usado en los métodos computacionales.

4. Modelado numérico

En esta sección, se presenta el algoritmo, que resuelve el problema no lineal del modelo de material PU-SMP MM2520. En la subrutina hiper-elasticidad3D se construye la matriz de rigidez tangente, $[K]$, y el vector de fuerza residual, $\{R\}$. El algoritmo de la figura 4.1 resuelve la relación esfuerzo-deformación para el desplazamiento con las iteraciones de Newton-Raphson.

La variable pm se utiliza para almacenar los 17 parámetros del PU-SMP MM2520. La variable actualiza, se utiliza para indicar si se ha de almacenar el esfuerzo calculado en la matriz global sigma, y la variable emrg, se utiliza para calcular las matrices de rigidez tangente y almacenarlas en la matriz global gkf. La fuerza residual, fuerza, siempre se calcula.

Para ensamblar la matriz de rigidez local en la matriz de rigidez global, la matriz idp se utiliza para almacenar la ubicación de los grados de libertad globales correspondientes a los 24 grados de libertad locales. Los vectores PI y PPI almacenan los puntos de integración y los pesos del método de la cuadratura de Gauss. Este algoritmo utiliza la integración de dos puntos para cada dirección de coordenadas.

En cada punto de integración de un elemento, las derivadas de las funciones de forma de los elementos finitos se evalúan con la subrutina función de forma. Las derivadas se evalúan con respecto a la geometría no deformada. Con las derivadas de las funciones de forma, se calcula el gradiente de deformación F . Se utiliza el gradiente de deformación, F y las propiedades del material PU-SMP MM2520, para, determinar la matriz de rigidez tangencial, los esfuerzos Cauchy-Green y el segundo esfuerzo de Piola-Kirchhoff con la subrutina M3DPU-SMPMM2520.

En la formulación total de Lagrange, la relación esfuerzo-deformación no es lineal, y la matriz de esfuerzo-deformación no lineal (BN), y la matriz de deformación-deformación lineal (BG), se almacenan en las matrices (BN) de 6×24 y (BG) de 9×24 respectivamente. La matriz de fuerza residual (fuerza) se calcula en cada iteración, mientras que la matriz de rigidez tangente (gkf) se calcula solo cuando la variable emrg es iguala 1.

Los diagramas de flujo del algoritmo para realizar la simulación de la deformación y recuperación de forma en una barra de PU-SMP MM2520 se muestran en las figuras 14 a la 25.

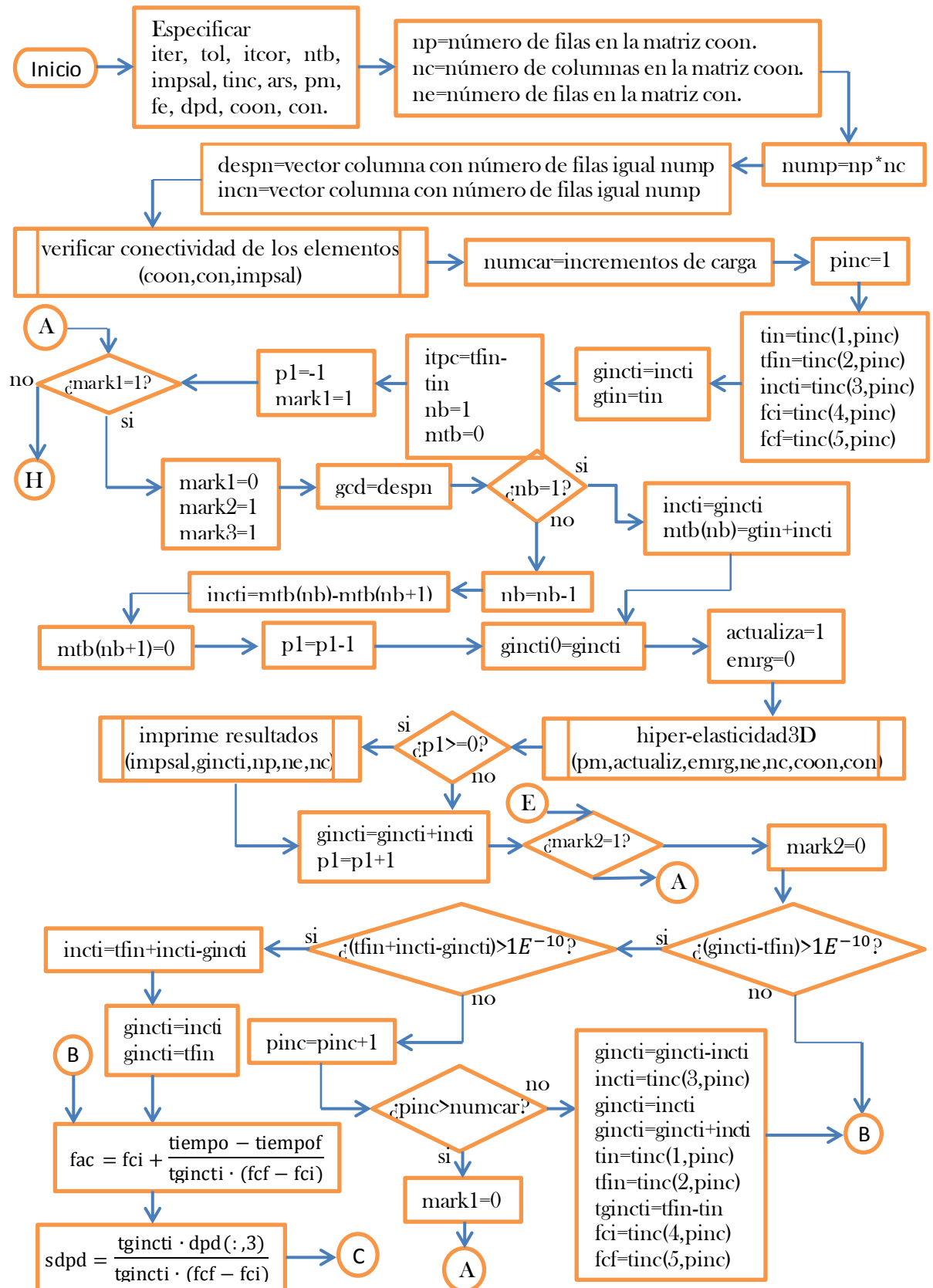


Figura 14 Algoritmo del método de elementos finitos para resolver la relación esfuerzo-deformación en el PU-SMP MM2520.

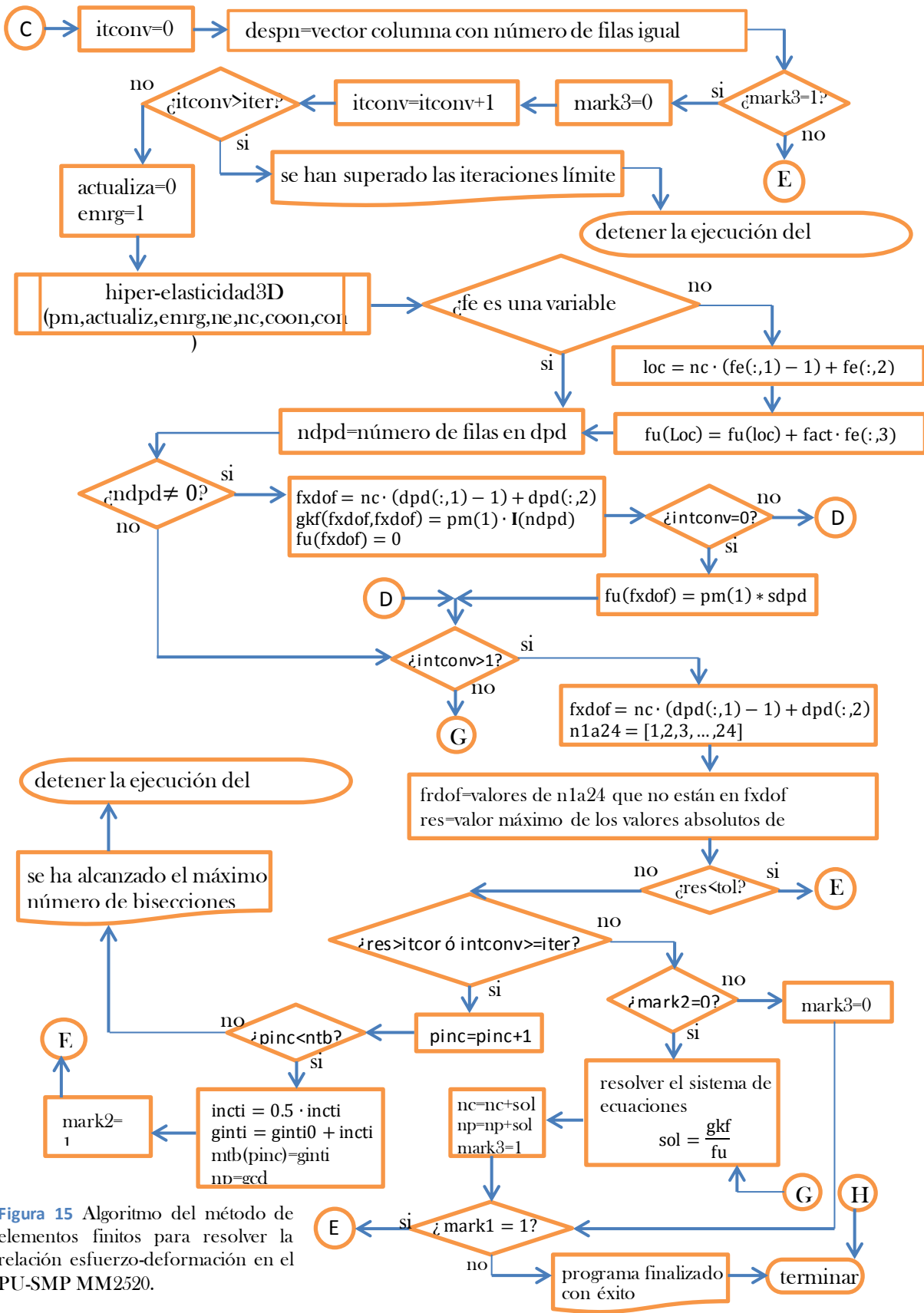


Figura 15 Algoritmo del método de elementos finitos para resolver la relación esfuerzo-deformación en el PU-SMP MM2520.

nump	número de puntos en el volumen discretizado.
despn	vector para desplazamientos nodales.
incn	vector para incrementos pre-escritos.
numcar	incrementos de carga.
pinc	primer incremento de carga.
tin	tiempo de inicio para el análisis.
tfin	tiempo final para el análisis.
pm	propiedades del material.
incti	incremento del tiempo.
fci	factor de carga inicial.
fcf	factor de carga final.
ginti	variable para guardar los incrementos de tiempo.
gtin	variable para guardar el tiempo de inicio.
itpc	intervalo de tiempo para los pasos de carga.
nb	nivel de bisección.
mtb	marcas de tiempo para las bisecciones.
mark1, mark2 y mark3	marcas para condicionar los ciclos.
gcd	variable para almacenar los desplazamientos que convergen.
gincti0	variable para almacenar el tiempo actual
actualiza	variable lógica para indicar que se guarden los valores de esfuerzo actuales.
emrg	variable lógica para indicar la condición de ensamble de la matriz de rigidez global.
fact	factor
itconv	variable para contar las iteración que convergen
fe	fuerza externa
fu	fuerza

El procedimiento de análisis se compone de tres ciclos anidados. El primero mark1 es para los pasos de carga e incrementos de carga. Todo el procedimiento de solución se compone de pasos de carga numcar. Cada paso de carga se compone de varios incrementos de carga. Esto corresponde al método de fuerza incremental.

El ciclo mark2 es para el procedimiento de bisección que se utiliza como complemento al método de Newton-Raphson a fin de manejar problemas de convergencia cuando el punto de partida está lejos de la solución. La manera de mejorar la convergencia es reducir los incrementos de carga. Cuando la iteración de convergencia no converge, el incremento de carga se reduce a la mitad y, a continuación, el ciclo mark2 se repite desde el valor convergente anterior.

Como la solución puede no converger sin importar cuán pequeño sea el incremento de carga, el proceso de bisección se detiene después de que se alcanza el número máximo de bisecciones. Para los fines de la bisección, es necesario almacenar el desplazamiento convergente previamente ndpd.

El tercer ciclo mark3 es para la iteración de convergencia. Este corresponde a la iteración de Newton-Raphson. Este ciclo se enfoca a calcular los vectores: residual res , fuerza fu y la matriz tangente gkf . Si el residuo se vuelve menor que un umbral previamente definido, se considera que la iteración ha sido convergente. En tal caso, el ciclo finaliza y el procedimiento pasa al siguiente incremento de carga. Si las iteraciones no convergen, se llama a la bisección reduciendo el incremento de carga a la mitad.

La subrutina verificar conectividad nodal, verifica que el determinante del elemento de la matriz jacobiana no sea negativo, pues ello indica que cualquiera de los elementos tiene un volumen negativo o que la conectividad del elemento no es correcta.

Los datos de entrada incluyen coordenadas nodales, conectividad de elementos, condiciones de límite de fuerza y desplazamiento, parámetros de material y parámetros de control para el procedimiento de solución.

Coordenadas nodales y conectividad de elementos:

Este algoritmo supone que la numeración de los nodos en el volumen discretizado está en secuencia. Luego, las coordenadas nodales y la conectividad nodal se definen utilizando las matrices $coon$ y con respectivamente.

Fuerzas aplicadas y desplazamientos prescritos:

Tanto las fuerzas aplicadas como los desplazamientos prescritos se deben ingresar con el siguiente formato; [nodo, dirección de coordenada 1, 2 o 3, y valor]. La fuerza externa (fe), puede no ser necesaria, pero los desplazamientos prescritos (dpd) deben definirse para evaluar la distribución de esfuerzos.

Pasos de carga e incrementos:

La matriz $tinc$ se utiliza para definir pasos de carga e incrementos de carga. Cada fila de la matriz $tinc$ representa un paso de carga. Cada paso de carga tiene el tiempo de inicio, el tiempo de término y el incremento, que se utiliza para el incremento de carga. Los factores iniciales y finales son los factores de carga que variarán durante el paso de carga actual.

Los parámetros que controlan el procedimiento de análisis son ($iter$) que es el número máximo de iteraciones de convergencia en el método de Newton-Raphson. Si el número de iteraciones alcanza el valor de ($iter$), se considera que el análisis no puede converger y se invoca la bisección. Durante la iteración de convergencia, si el residuo aumenta más que el valor de ($itcor$), se considera que la solución es divergente y se invoca el proceso de bisección. El número total de bisecciones está limitado por el valor de (ntb). Es decir, si las iteraciones de convergencia no convergen después ntb bisecciones consecutivas, el algoritmo debe detenerse. La iteración de convergencia se considera convergente cuando la norma del residuo es menor que tol .

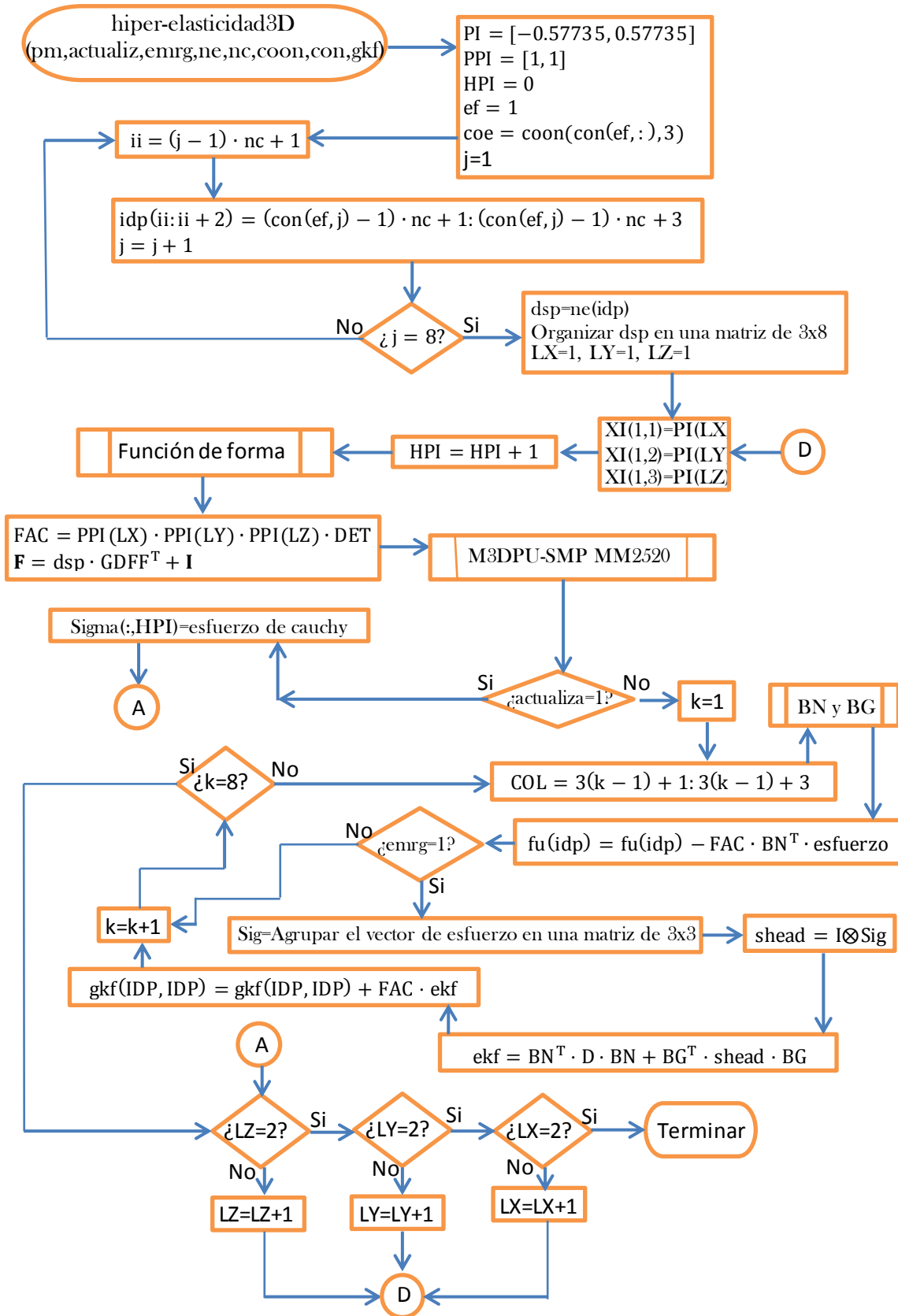


Figura 16 Algoritmo para calcular la matriz gkf y los esfuerzos en el elemento finito.

PI	Puntos de integración de Gauss
PPI	Pesos para los puntos de integración de Gauss
ne	Número de elementos
con	Conectividad nodal
nc	Dimensión del problema
coon	Coordenadas del volumen discretizado
pm	Propiedades del material
HPI	Historial de los puntos de integración
ef	Elemento Finito correspondiente
coe	Coordenadas de un elemento dentro del volumen de material
F	Gradiente de deformación
I	Matriz identidad de 3x3
actualiza	Condición para actualizar datos

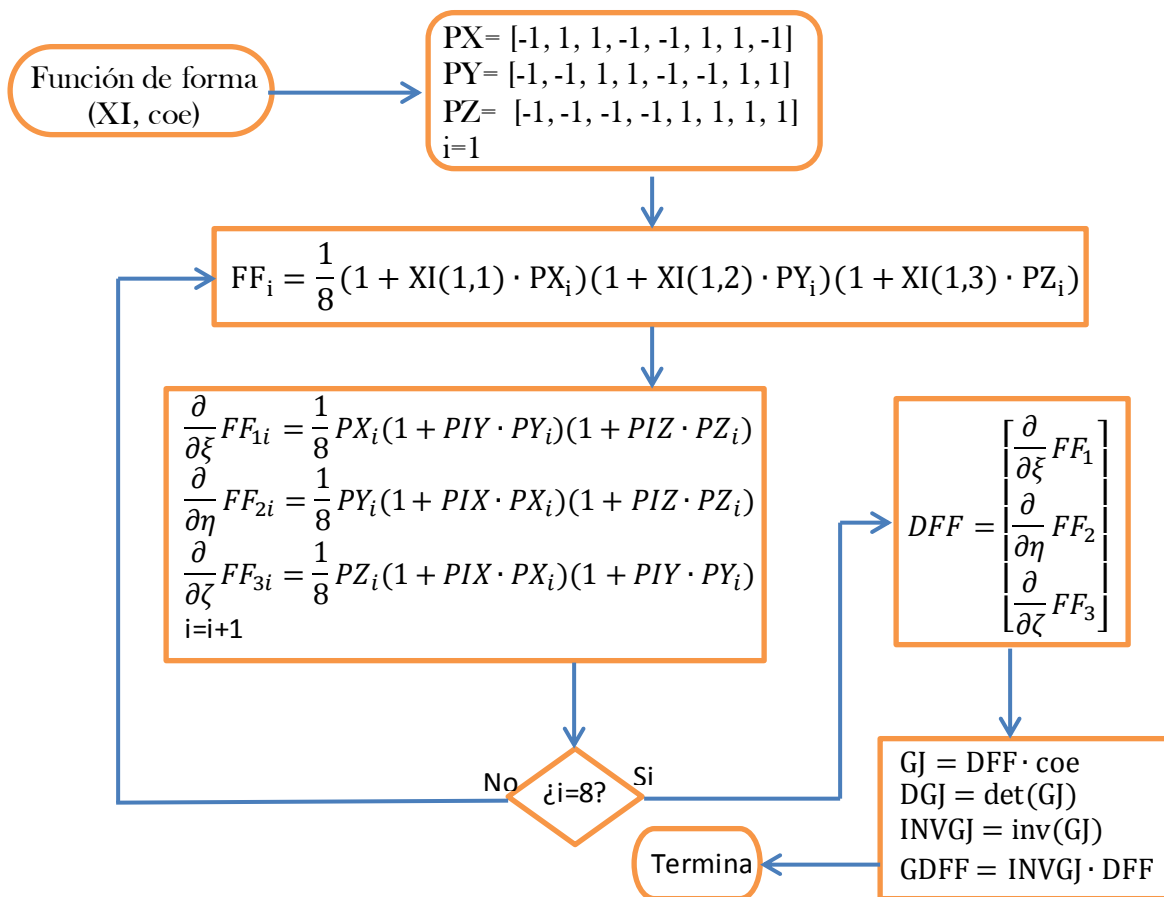


Figura 17 Diagrama de flujo para calcular la función de forma de un elemento hexaedro y el determinante del elemento de referencia.

coe	Coordenadas de un elemento dentro del volumen de material
XI	Puntos de integración de Gauss
PX	Coordenadas 1 del elemento de referencia
PY	Coordenadas 2 del elemento de referencia
PZ	Coordenadas 3 del elemento de referencia
GDJ	Determinante de la matriz GJ
INVGJ	Matriz inversa de GJ ,
GDFF	Derivada de la función de forma

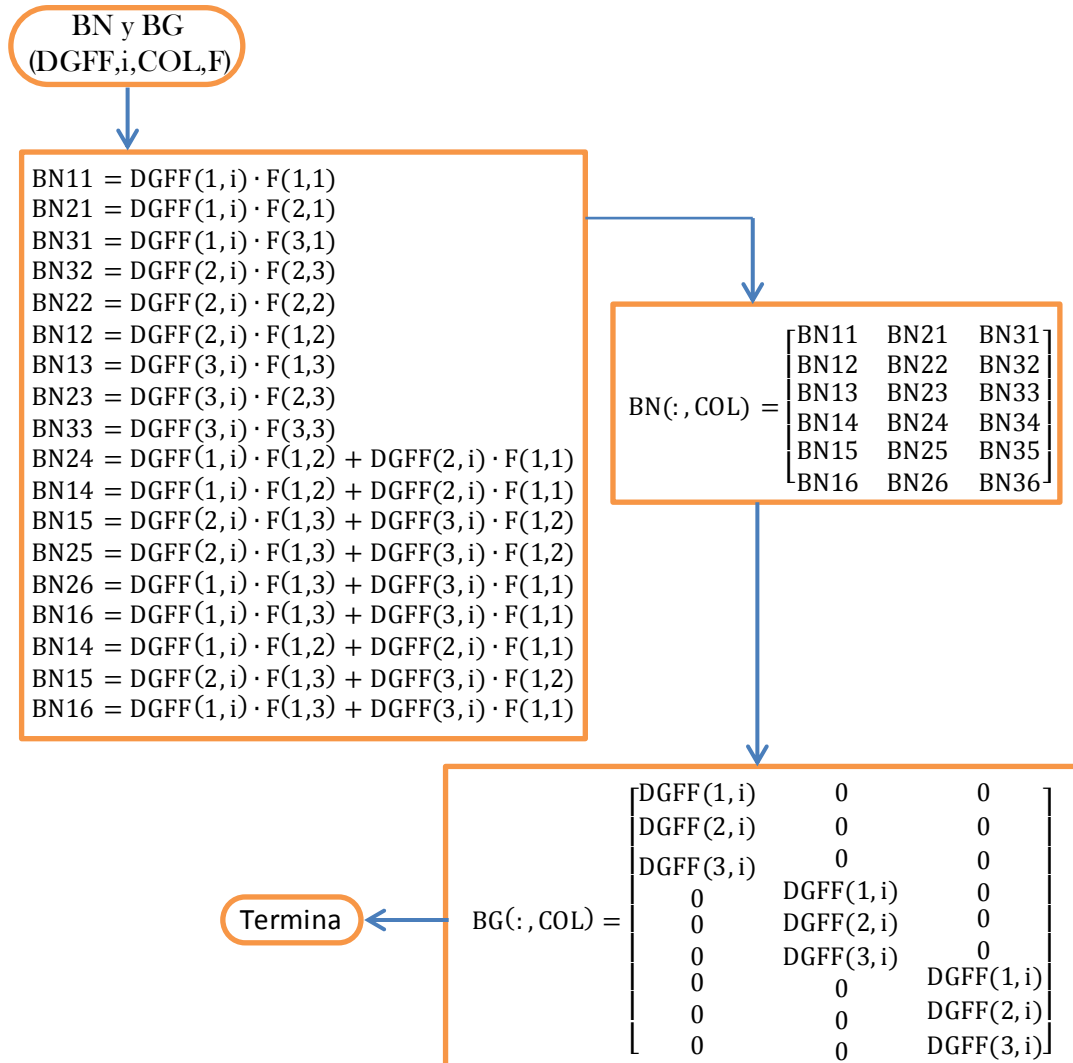


Figura 18 Diagrama de flujo para la construcción de las matrices BN y BG

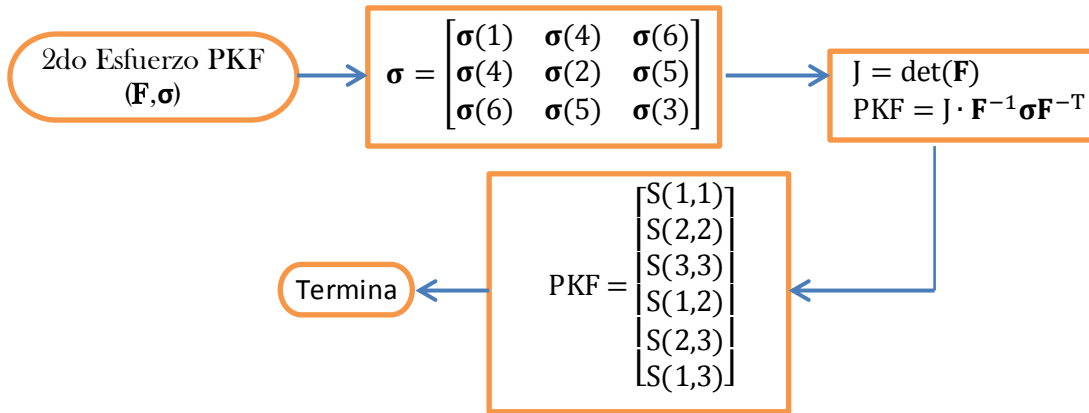


Figura 19 Diagrama de flujo para convertir el esfuerzo de Cauchy en el segundo esfuerzo de Piola-Kirchoff

- F Gradiente de deformación
- S Segundo esfuerzo de Piola Kirchoff
- PKF Agrupación de los elementos de S en una matriz de 3x3
- DETF Determinante del gradiente de deformación
- σ Esfuerzo de Cauchy

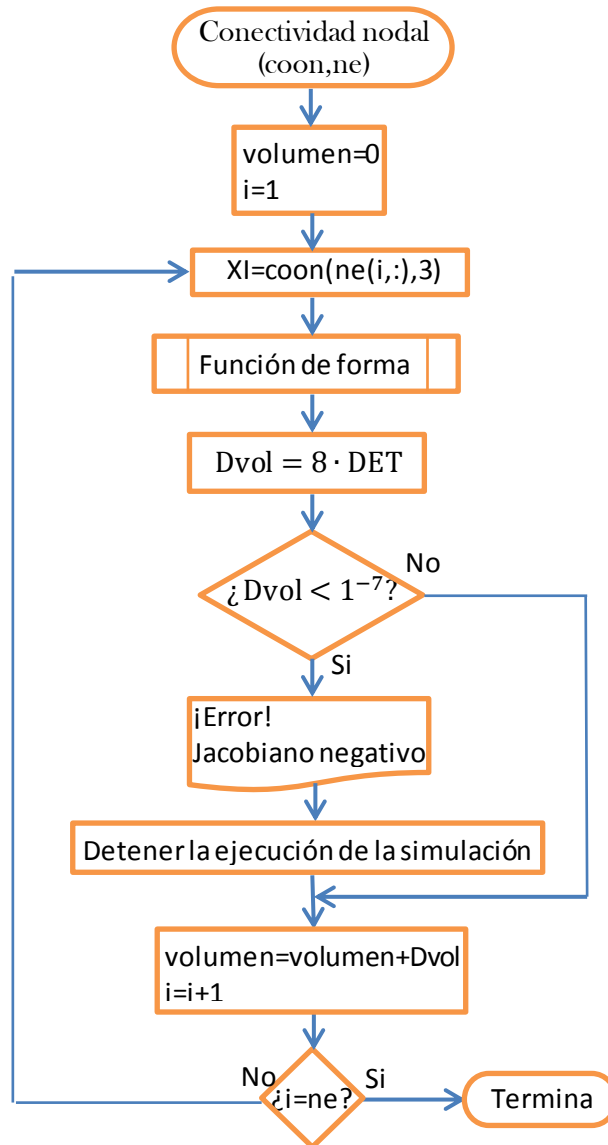


Figura 20 Algoritmo para verificar que la conectividad nodal sea correcta y el elemento finito en turno tenga volumen.

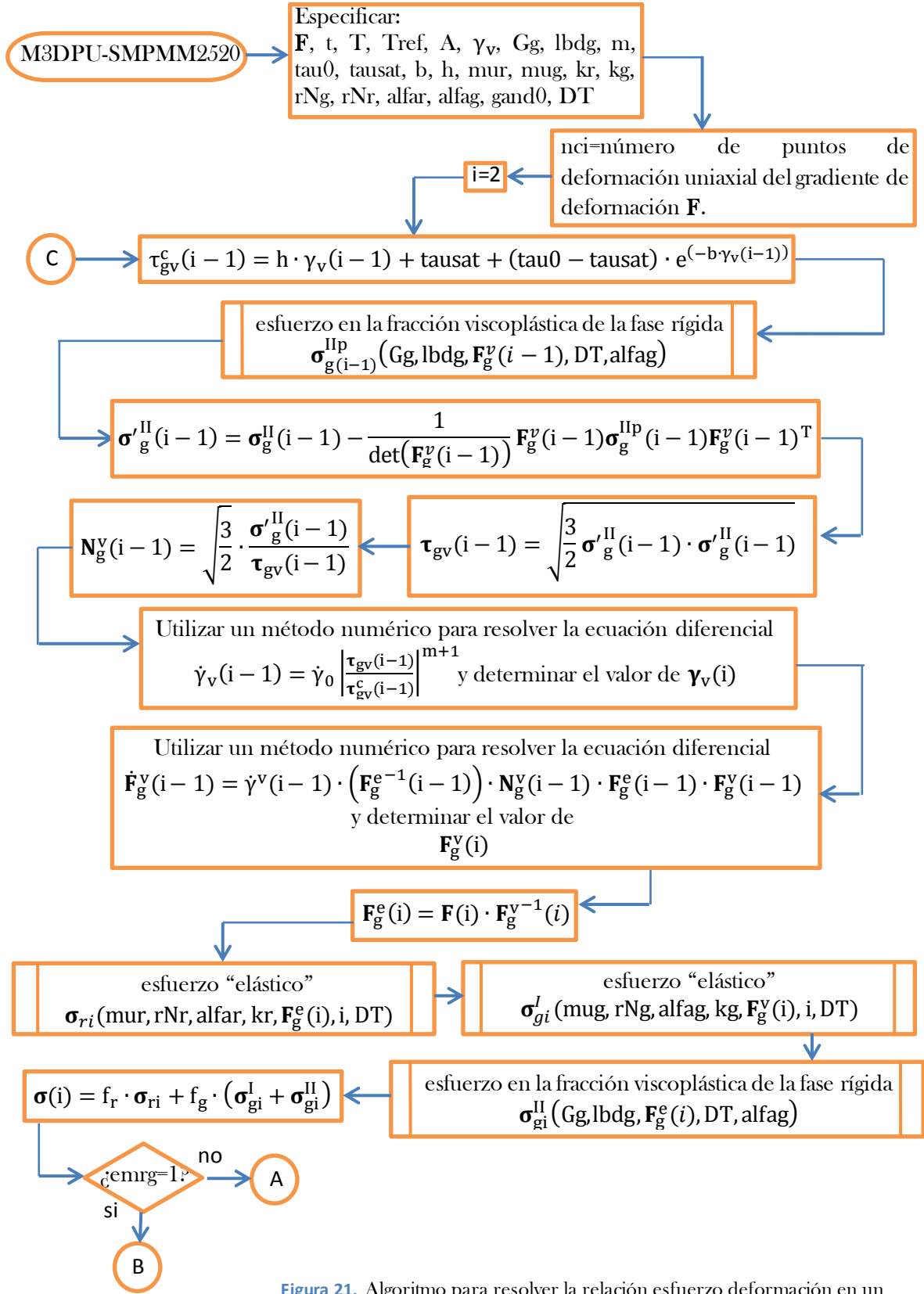


Figura 21. Algoritmo para resolver la relación esfuerzo deformación en un elemento finito de PU-SMP MM2520.

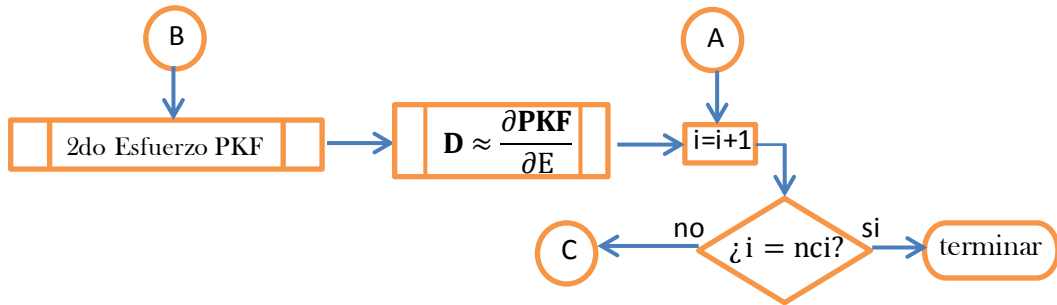


Figura 22. Algoritmo para resolver la relación esfuerzo deformación en un elemento finito de PU-SMP MM2520.

F	Gradiente de deformación.
t	tiempo.
T	Temperatura en la que ocurre la deformación.
Tref	Temperatura de referencia para estimar la transición de fases en el PU-SMP MM2520.
$\dot{\gamma}_v$	Velocidad de deformación uniaxial.
Gg	Primer constante de Lamé para la fase rígida del PU-SMP MM2520.
Lbdg	Segunda constante de Lamé para la fase de rígida del PU-SMP MM2520.
m	Constante para la sensibilidad a la velocidad de deformación del PU-SMP MM2520.
mur	Módulo de esfuerzo cortante inicial para la fase elástica del PU-SMP MM2520..
mug	Módulo de esfuerzo cortante inicial para la fase rígida del PU-SMP MM2520..
kr	Módulo de compresibilidad para la porción elástica del PU-SMP MM2520.
kg	Módulo de compresibilidad para la porción rígida del PU-SMP MM2520.
rNg	límite de extensibilidad de las cadenas moleculares en la fase elástica del PU-SMP MM2520.
rNr	límite de extensibilidad de las cadenas moleculares en la fase rígida del PU-SMP MM2520.
alfar	coeficiente de expansión térmica de la fase elástica del PU-SMP MM2520.
alfag	coeficiente de expansión térmica de la fase rígida del PU-SMP MM2520.
DT	cambio en la temperatura debido a la deformación
nci	número de valores de deformación a simular

En la figura 23 la subrutina Lainv evalúa la función inversa de Langevin de acuerdo al algoritmo presentado en [22].

Las figuras 21 y 22 corresponden al algoritmo para resolver el modelo constitutivo tridimensional, se observan dos procesos donde se indica el uso de métodos numéricos para resolver un par de ecuaciones diferenciales, en este trabajo se utilizó el método de Runge-Kutta de cuarto orden.

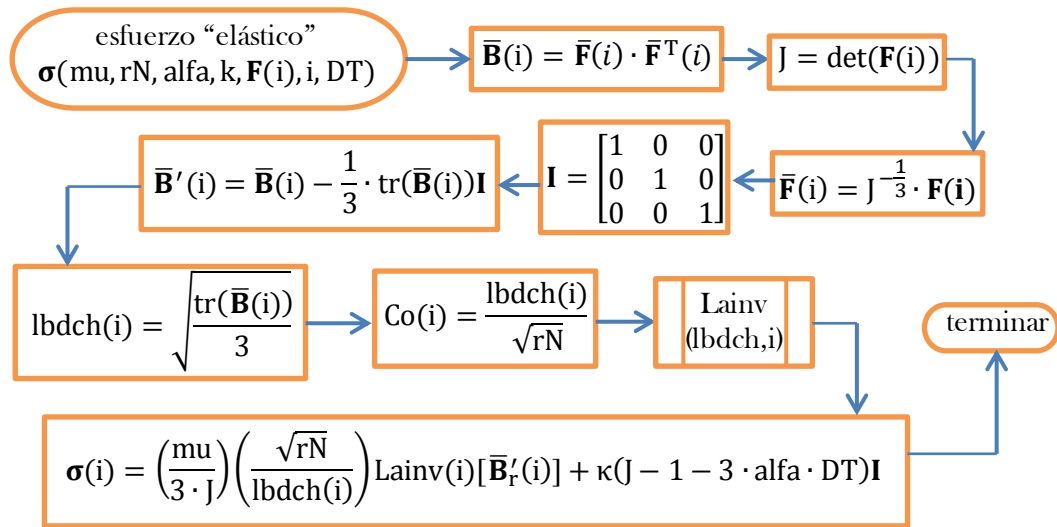


Figura 23 Algoritmo para calcular el esfuerzo en las regiones con comportamiento hiper-elástico

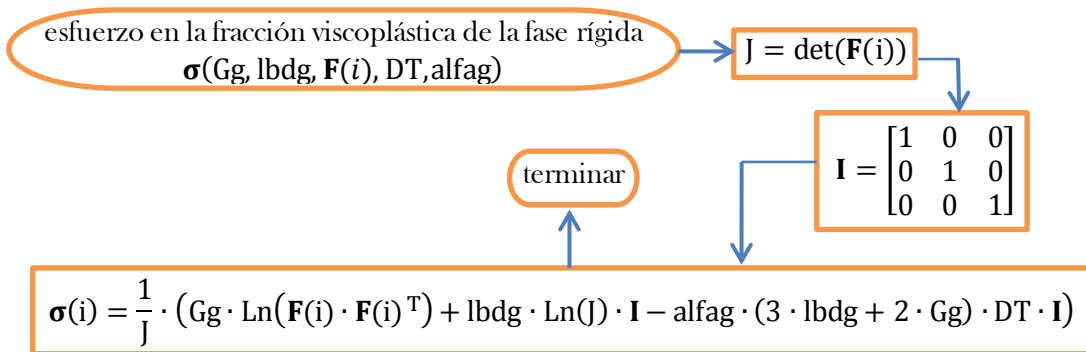


Figura 24 Algoritmo para calcular el esfuerzo en las regiones con comportamiento Visvo-plástico

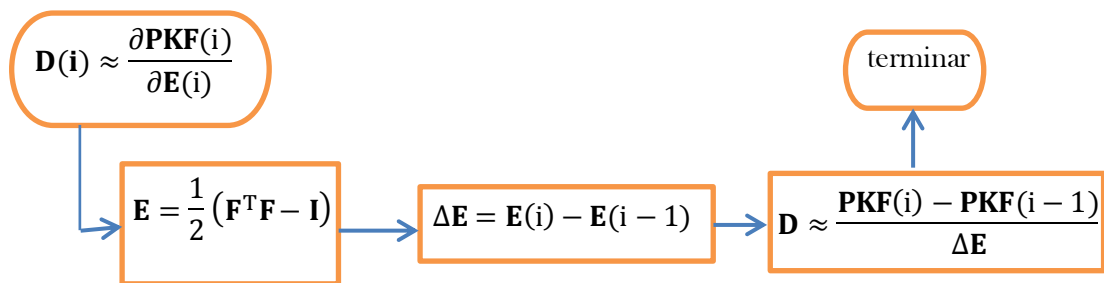


Figura 25 Algoritmo para aproximar el valor de la matriz de rigidez del PUSMP
MM2520

5. SIMULACIÓN Y RESULTADOS

En este capítulo se muestran los resultados del cálculo numérico, la simulación unidimensional y tridimensional del PU-SMP MM2520 para cargas uniaxiales. El procedimiento que se sigue es el descrito en el capítulo 4.

5.1 Evaluación del modelo constitutivo

Las ecuaciones diferenciales 2.13 y 2.14 son la base para determinar la aportación del esfuerzo con la que participa el dominio rígido del PU-SMP MM2520. Para resolver estas ecuaciones se emplea el método de Runge Kutta de cuarto orden.

Se utilizan los parámetros presentados en la tabla 5.1, al sustituir los datos en las ecuaciones 2.10, 2.16 y 2.17 para determinar los esfuerzos iniciales generados en las fases del PU-SMP MM2520, los cuales dan el valor del primer esfuerzo, el segundo valor para la velocidad de deformación de la fase visco-plástica (ecuación 2.13) y el segundo valor para la deformación visco-plástica por cortante en el dominio rígido como resultado de la primer iteración.

Elemento	Fase elástica	Fase rígida
Híper-elasticidad	$\mu_r = 1 \text{ MPa}$, $\kappa_r = 1 \text{ GPa}$, $N_r = 17$	$\mu_g = 11.5 \text{ MPa}$, $\kappa_g = 1 \text{ GPa}$, $N_g = 17$
Híper-elasticidad-viscoplasticidad		$G_g = 120 \text{ MPa}$, $\lambda_g = 1.5 \text{ GPa}$, $\dot{\gamma}_0 = 0.002 \text{ s}^{-1}$, $m = 3$, $\tau_0 = 8 \text{ MPa}$, $\tau_{sau} = 8.5 \text{ MPa}$, $b = 6$, $h = 20 \text{ MPa}$.
Constante de expansión térmica	$\alpha_r = 2.53 \times 10^{-4} \text{ }^\circ\text{K}^{-1}$	$\alpha_g = 1.48 \times 10^{-4} \text{ }^\circ\text{K}^{-1}$
$A = 7.5, T_{ref} = 15^\circ\text{C}$		

Tabla 5.1 Parámetros para evaluar el modelo constitutivo tridimensional para el PU-SMP MM2520. [9].

Con los nuevos valores de las ecuaciones 2.13 y 2.14 se evalúan las ecuaciones 2.10, 2.16 y 2.17 en la segunda iteración con lo que se obtiene el valor de esfuerzos en el PU-SMP MM2520 para el siguiente punto de deformación.

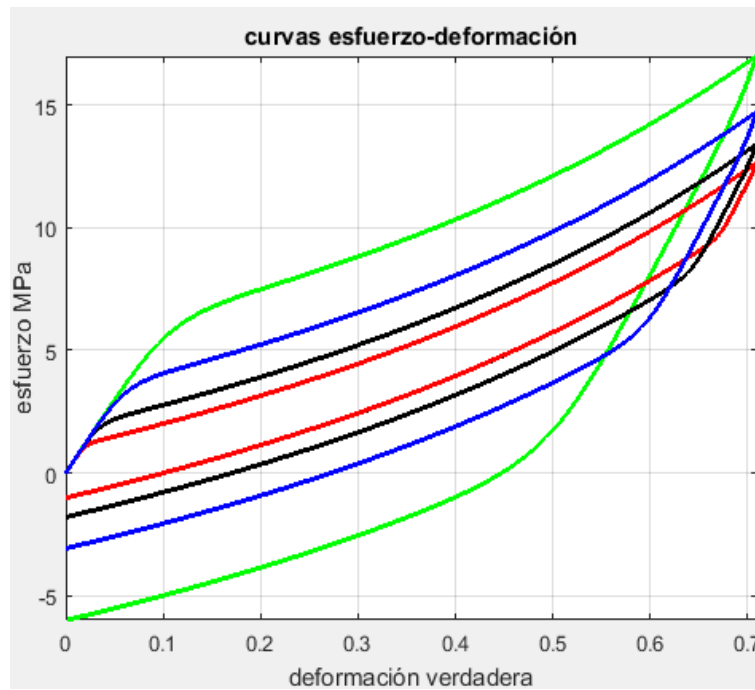


Figura 26 Resultados de la evaluación numérica del modelo en 3D del el PU-SMP MM2520 a diferentes velocidades de deformación y temperatura constante.

En este trabajo de tesis se utilizaron 1096 puntos de deformación, la longitud utilizada es de 15 mm para una tira de PU-SMP MM2520 y se deforma de 15.48 mm más, es decir, la tira de PU-SMP MM2520 se estira al doble de su longitud inicial a una temperatura de 25°C, con lo que alcanza una longitud final de 30.48 mm. La tabla 5.2 muestra los valores de esfuerzo máximo alcanzados por la evaluación del modelo. Los resultados corresponden a las curvas mostradas en la figura 26.

Curva	Esfuerzo máximo σ_{max} , MPa	Tiempo de deformación (s)	Tiempo aproximado de recuperación
Verde	18.1	1.22	2.77
Azul	16.8	12.2	16.23
Negra	13.82	122.14	127.85
Roja	13.61	1221.4	3120

Tabla 5.2 Resultados de la simulación del comportamiento esfuerzo deformación.

El tiempo para obtener los resultados mostrados en la figura 26 se toma a partir de las velocidades de deformación verdadera o logarítmica utilizada en el procedimiento experimental [9]. El tiempo de recuperación se estima en base a observar las diferencias entre los resultados del modelo y las medidas experimentales [9], los tiempos mostrados son para los cuales el camino de retorno del esfuerzo tiene mayor parecido al arrojado por los resultados experimentales.

En este punto los resultados de las simulaciones del modelo arrojan una aproximación al comportamiento real del material en una dimensión. Al realizar una comparación gráfica con los resultados de Pieczyska et. al [9], se toma en consideración que los resultados de la evaluación del algoritmo desarrollado aquí son aproximadamente convergentes.

Las curvas que realizan un camino de histéresis, indican que la trayectoria que sigue el esfuerzo durante la carga uniaxial no es el mismo que sigue durante la recuperación de forma, es decir cuando la carga es retirada.

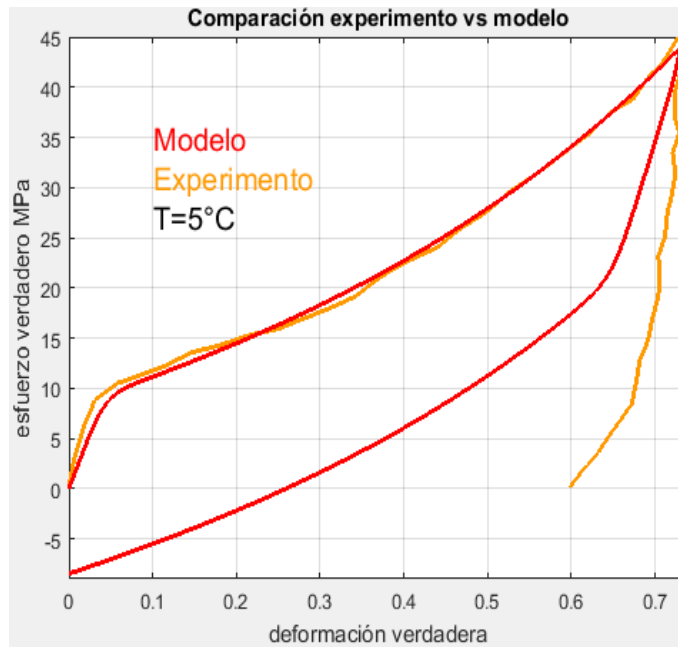


Figura 27 Resultados de la simulación para una deformación de 15.48mm, una velocidad de 0.002 1/s. Toma 365 segundos alcanzar la deformación, la simulación considerando una temperatura de 5°C. $\sigma_{max} = 44.7 \text{ MPa}$

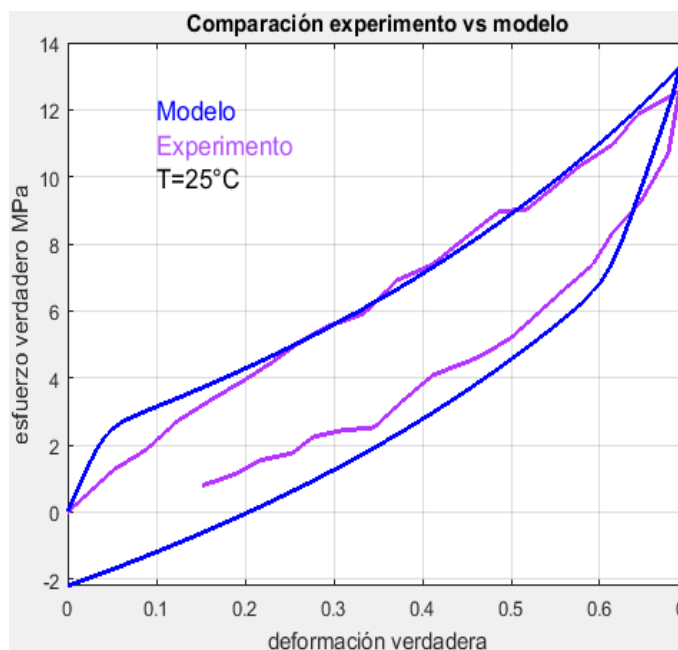


Figura 28 Resultados de la simulación para una deformación de 15.48mm, una velocidad de 0.002 1/s. Toma 365 segundos alcanzar la deformación, la simulación considerando una temperatura de 25°C. $\sigma_{max} = 13.12 \text{ MPa}$

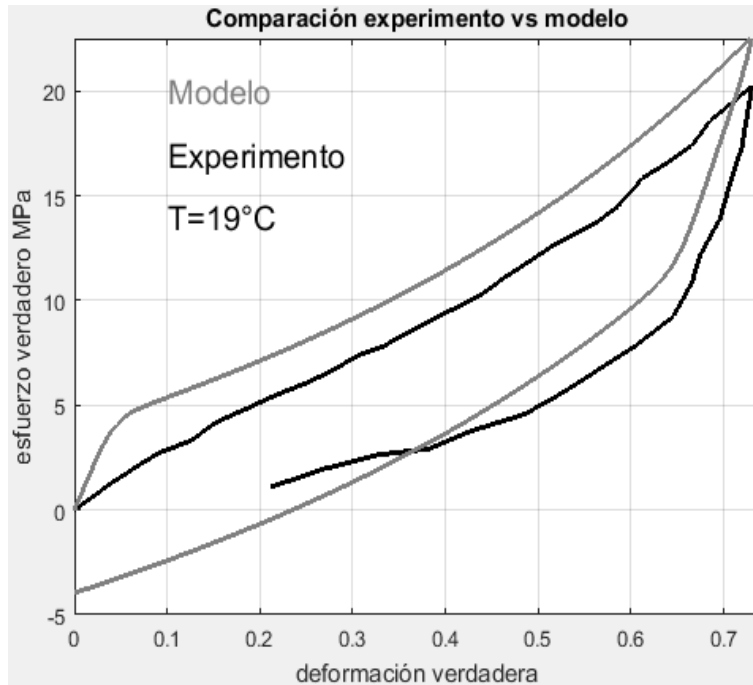


Figura 29 Resultados de la simulación para una deformación de 15.48mm, una velocidad de 0.002 1/s. Toma 365 segundos alcanzar la deformación, la simulación considerando una temperatura de 19°C.

$$\sigma_{max} = 22.45 \text{ MPa}$$

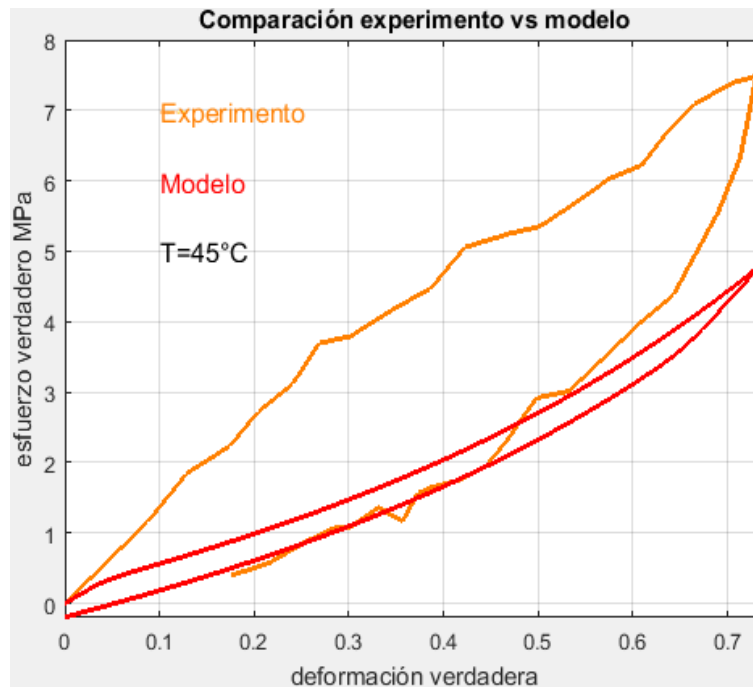


Figura 30 Resultados de la simulación para una deformación de 15.48mm, una velocidad de 0.002 1/s. Toma 365 segundos alcanzar la deformación, la simulación considerando una temperatura de 45°C.

$$\sigma_{max} = 4.89 \text{ MPa}$$

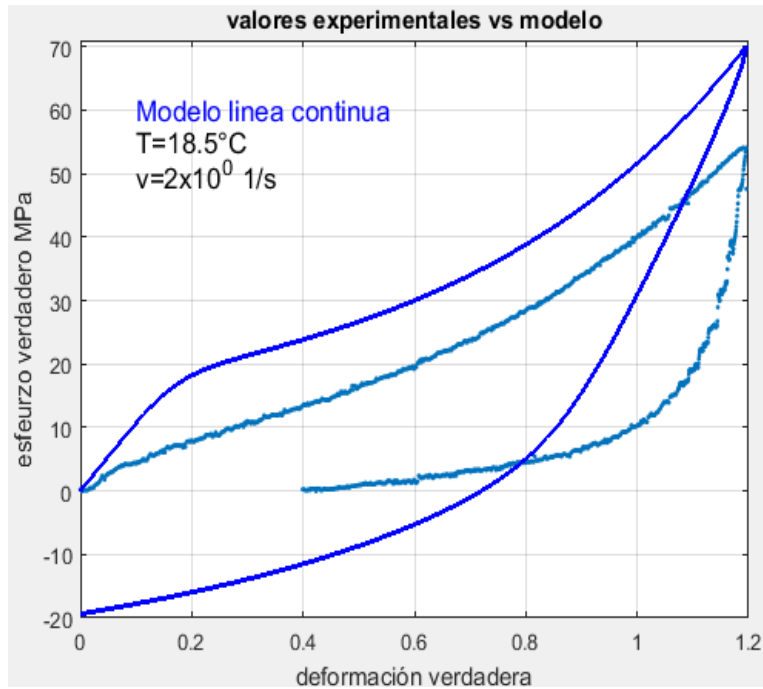


Figura 31 Resultados de la simulación para una velocidad de deformación de $2 \times 10^0 \frac{1}{s}$ para la cual le toma 0.6 segundos alcanzar 1.19 unidades de deformación verdadera. El tiempo de recuperación es de 0.65 segundos $\sigma_{max} = 70.1 \text{ MPa}$

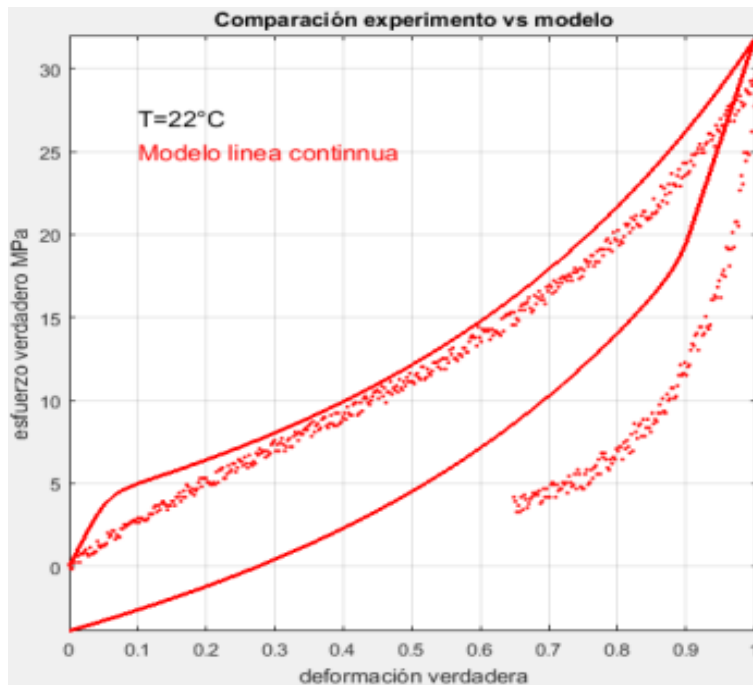


Figura 32 Resultados de la simulación para una velocidad de deformación de $2 \times 10^{-2} \frac{1}{s}$ para la cual le toma 60 segundos alcanzar 1 unidad de deformación verdadera. El tiempo de recuperación es de 65 seg. $\sigma_{max} = 32.1 \text{ MPa}$

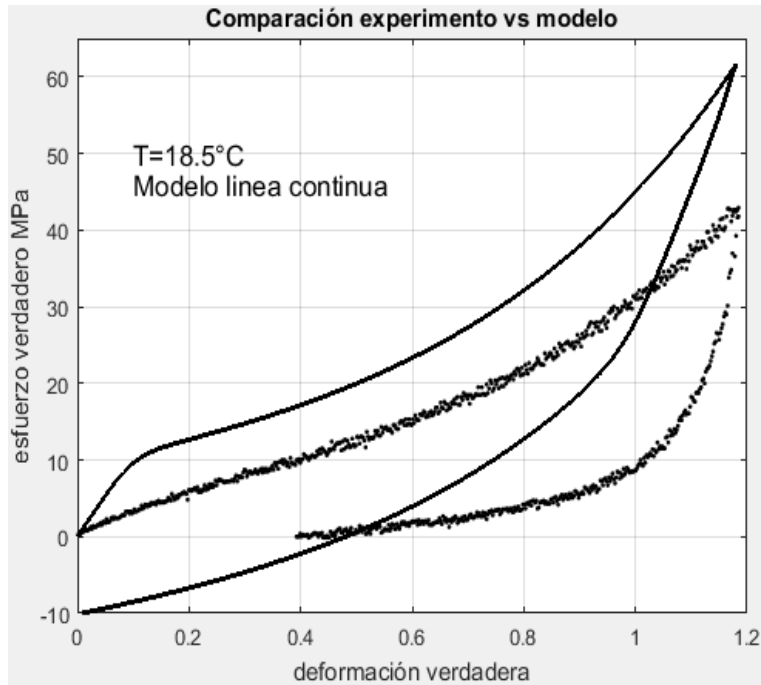


Figura 33 Resultados de la simulación para una velocidad de deformación de $2 \times 10^{-1} \frac{1}{s}$ para la cual le toma 6 segundos alcanzar 1.18 unidades de deformación verdadera. El tiempo aproximado de recuperación es de 6 segundos $\sigma_{max} = 60.76 \text{ MPa}$

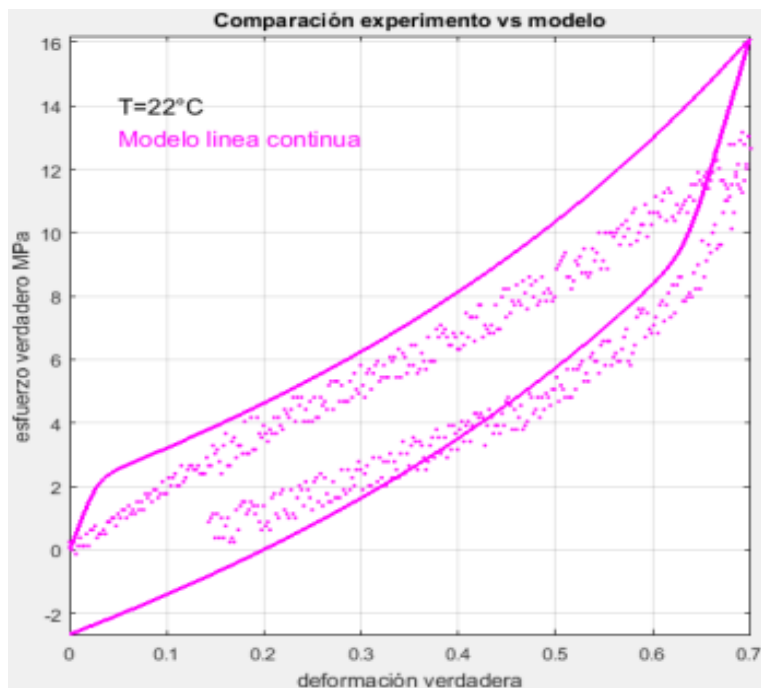


Figura 34 Resultados de la simulación para una velocidad de deformación de $2 \times 10^{-3} \frac{1}{s}$ para la cual le toma 600 segundos alcanzar 0.7 unidades de deformación verdadera. El tiempo de recuperación es de 200 segundos $\sigma_{max} = 15.9 \text{ MPa}$

En las figuras 27 a 34, se observa que el modelo tiende a aproximarse al comportamiento real, cuando la temperatura es inferior a la temperatura de transición del PU-SMP MM2520.

Lo relevante de la figura 27, es que muestra la comparación entre los datos experimentales de Pieczyska et. al [9], de una tensión uniaxial a 45° C y una velocidad de deformación de 0.002 1/s y las predicciones del modelo utilizado con el método numérico de Runge Kutta. En la figura 30 se observa una baja correspondencia entre el comportamiento real de Pieczyska et. al [9], y las predicciones del modelo utilizado en esta tesis.

Conforme aumenta la temperatura, los resultados del modelo toman distancia del comportamiento real. A temperaturas próximas a la temperatura de transición el modelo predice mejor la recuperación de forma por relajación pero no la recuperación por la activación de la memoria de forma.

Las curvas experimentales de Pieczyska et. al [9] no indican valores negativos para el esfuerzo de Cauchy-Green porque el polímero en realidad no recupera su forma original más que para temperaturas mayores a los 35°C.

Se indican las velocidades de deformación que utilice para la simulación así como el tiempo que la simulación predice tardará el PU-SMP MM2520 en recuperar parte de la deformación por relajación y el esfuerzo máximo que se genera dentro de la tira de PU-SMP MM2520.

5.2 Resultados de la simulación por el método de elementos finitos en 1D y 3D

La figura 35 ilustra el estado final de una simulación utilizando el método de elemento finito en una dimensión. Para la simulación de la deformación y de la recuperación de forma, se establece una velocidad de deformación de 2×10^0 unidades de deformación verdadera por segundo, con una deformación máxima de 15 mm.

La tira de PU-SMP MM2520 se estira de 15 mm a aproximadamente 30 mm, corresponde a una deformación máxima de 0.72 unidades de deformación verdadera.

Se aplica una variación gradual de la temperatura, partiendo de 20°C incremento la temperatura hasta los 25°C, después disminuyo la temperatura hasta los 5°C. Se mantiene esta temperatura constante, y a partir de que la barra ha alcanzado una altura aproximada de 26 mm, y hasta que alcanza 31 mm de deformación, posteriormente vuelvo a elevar la temperatura hasta 30°C, y finalmente volver a la temperatura inicial de 20°C.

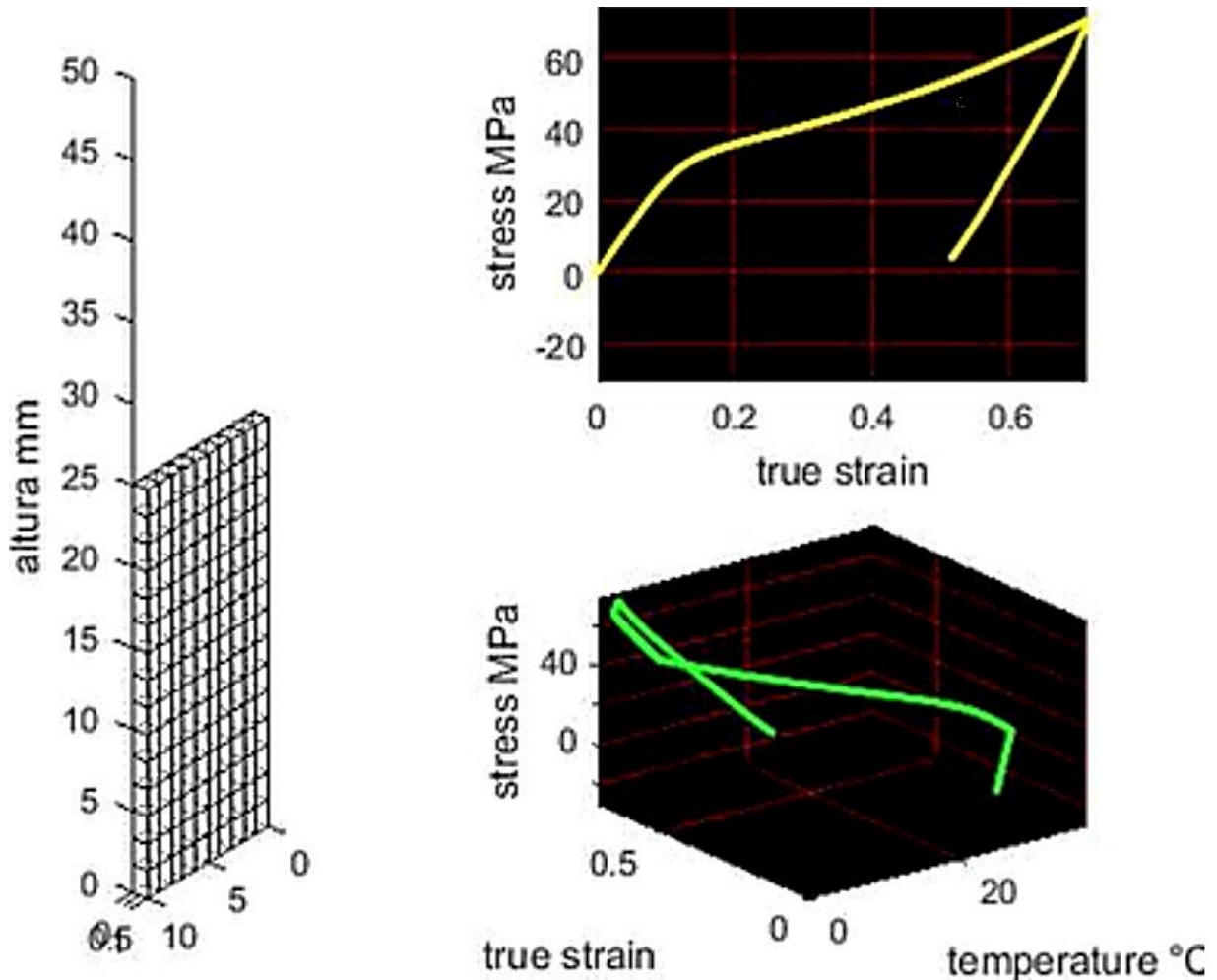


Figura 35 Resultados de una simulación para deformación uniaxial y unidimensional con 15 elementos de una tira de PU-SMP MM2520.

En la figura 35 la curva amarilla muestra la evolución del esfuerzo promedio de los 15 elementos, la curva de color verde indica la evolución promedio del esfuerzo en los 15 elementos unidimensionales considerando la variación de la temperatura durante el proceso de deformación. La figura del extremo izquierdo es una representación tridimensional de una tira de PU-SMP MM2520 en la que solo se simula la deformación axial en la altura, $\sigma_{max} = 68.37 \text{ MPa}$

La finalidad de variar la temperatura es para observar lo que el modelo sugiere, cómo afectaría al comportamiento esfuerzo deformación, que las fases rígida y gomosa varíen de forma alternada en un mismo proceso de deformación, pues al aumentar la temperatura disminuye la fase rígida y aumenta la fase gomosa, y al disminuir la temperatura, aumenta la fase rígida disminuyendo la fase gomosa.

Los resultados relevantes de esta simulación, son que el material alcanza un esfuerzo máximo superior a los 60 MPa, un valor superior al medido en todas las pruebas experimentales publicadas, y que el ciclo de histéresis durante la liberación del esfuerzo tiene mayor aproximación a los mostrados en las pruebas experimentales de Pieczynska et. al [9].

Siguiendo el mismo procedimiento se realizan simulaciones tridimensionales para una tira de PU-SMP MM2520 de 15 mm de altura, 10 mm de ancho y 1 mm de espesor, discretizada en 150 elementos.

El resultado de la simulación para la deformación y recuperación de forma es dictado por el mismo patrón de la curva de histéresis, solo que con variaciones en los valores del esfuerzo, que pueden ser atribuidos a diversos factores, tales como, los métodos numéricos no obtienen el resultado exacto sino una aproximación. Ello se puede observar en la tabla 5.1 donde se expresan los esfuerzos obtenidos para uno de los elementos. Teóricamente los esfuerzos $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yx} = 0$ MPa debido a que el polímero se encuentra sometido a tensión pura.

Tabla 5.1 Esfuerzos en el elemento 141 cuando se alcanza la deformación máxima de 15 mm. Unidades en Pascales.

σ_{xx}	σ_{yy}	σ_{zz}	σ_{xy}	σ_{xz}	σ_{yz}
5.068e-05	5.048e-05	7.315e+07	6.132e-08	1.610e-04	5.040e-04
3.937e-04	3.944e-04	7.315e+07	-1.681e-07	1.610e-04	5.040e-04
9.808e-05	9.798e-05	7.315e+07	1.289e-07	9.930e-05	5.197e-04
2.193e-04	2.199e-04	7.315e+07	-1.611e-07	9.929e-05	5.197e-04
3.944e-04	3.940e-04	7.315e+07	-1.520e-08	1.453e-04	4.423e-04
2.999e-06	3.753e-06	7.315e+07	-2.115e-07	1.453e-04	4.423e-04
8.146e-05	8.127e-05	7.315e+07	4.506e-08	8.358e-05	4.580e-04
9.098e-05	9.168e-05	7.315e+07	-9.907e-08	8.359e-05	4.580e-04

Las figuras 36 a 44 muestran la distribución de esfuerzos durante las etapas del proceso de deformación tridimensional, para los mismos parámetros de; deformación máxima, velocidad de deformación y variación de temperatura, utilizados en la evaluación unidimensional del método de elementos finitos.

Se indica el valor del esfuerzo mediante una barra de color y la distribución de esfuerzo en el polímero y se asigna un color representativo del esfuerzo a las caras de cada elemento.

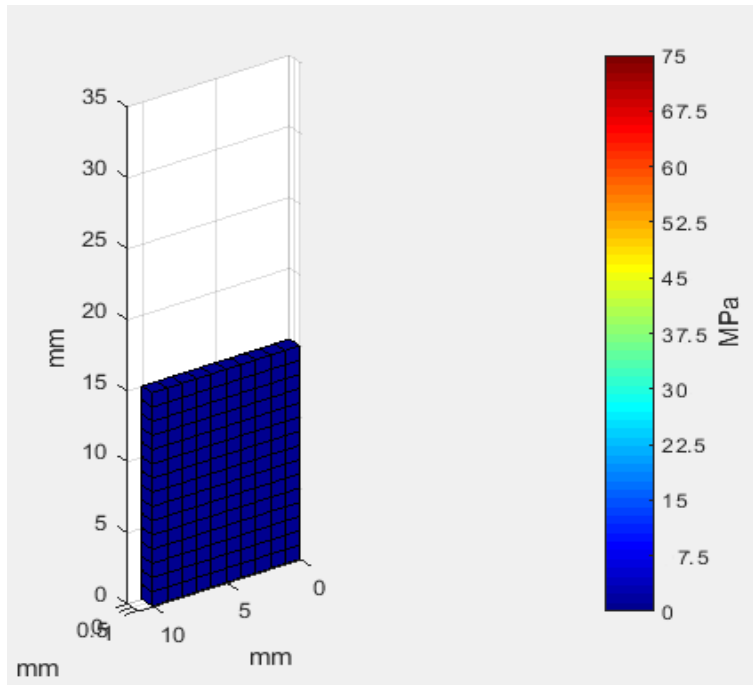


Figura 36 Inicio de la simulación, los esfuerzos valen cero

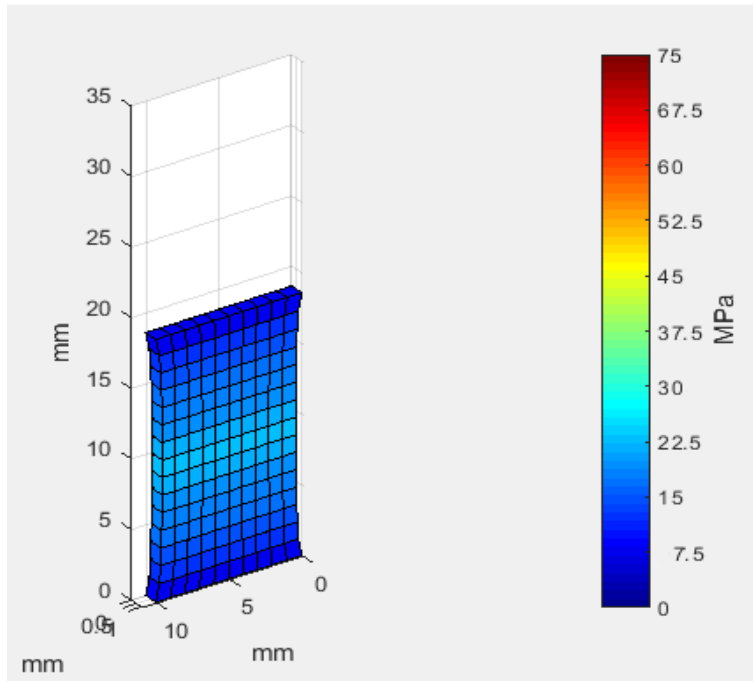


Figura 37 La tira de PU-SMP MM2520 se ha estirado 3 mm

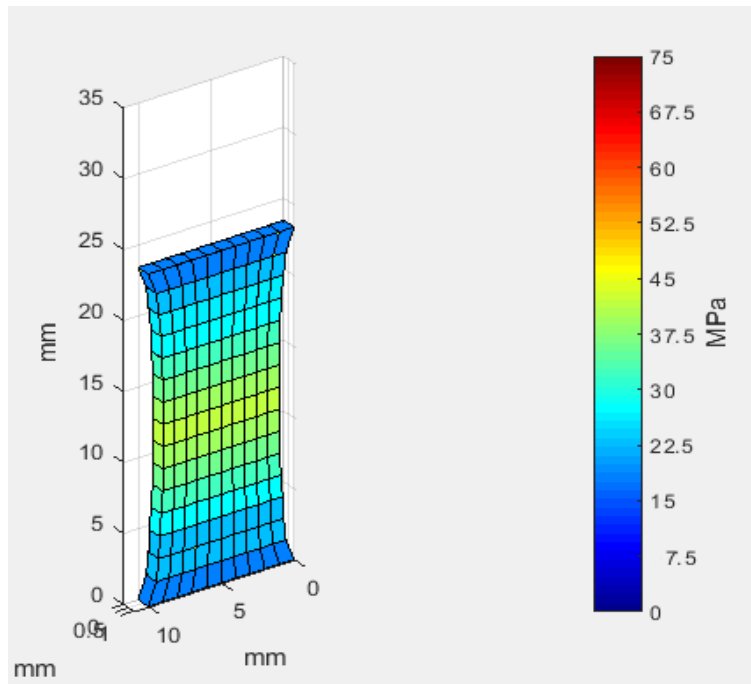


Figura 38 La tira de PU-SMP MM2520 se ha estirado 8 mm

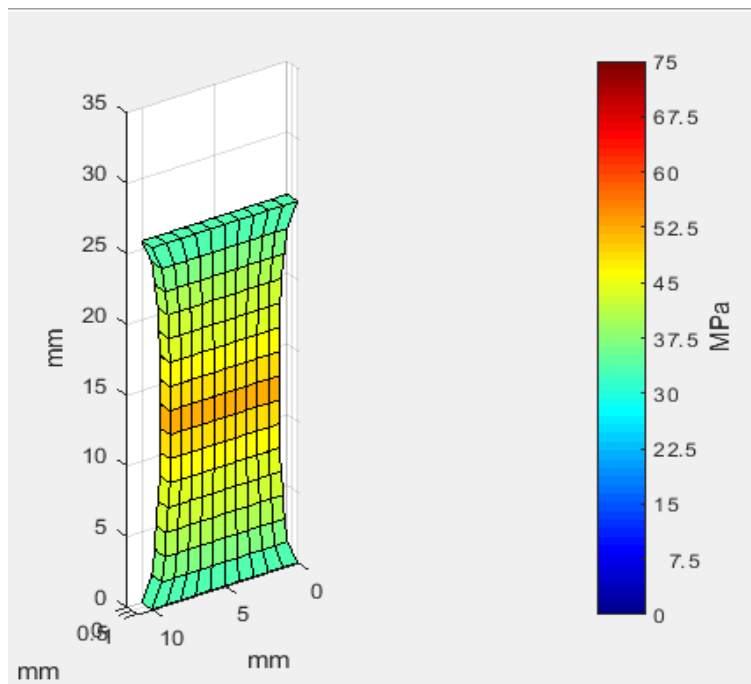


Figura 39 La tira de PU-SMP MM2520 se ha estirado 11 mm

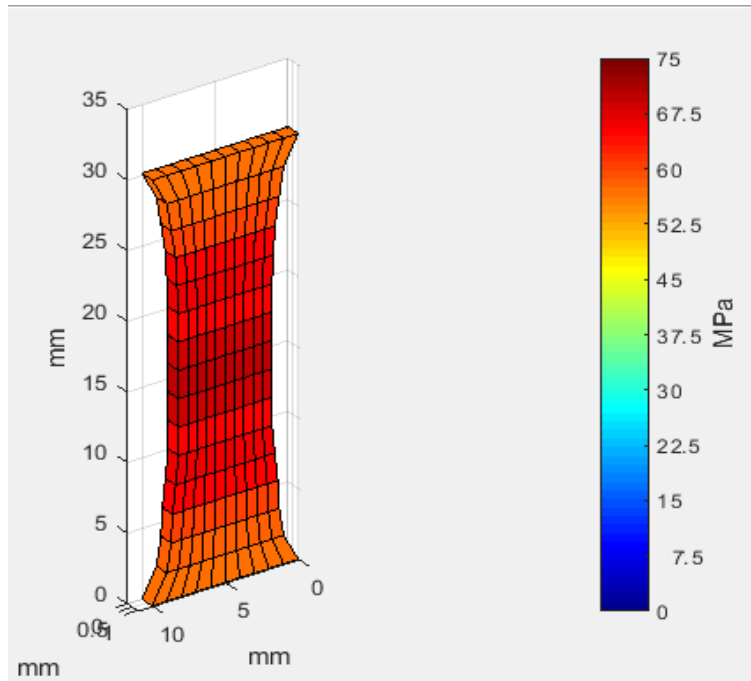


Figura 40 La tira de PU-SMP MM2520 ha alcanzado la deformación máxima, 15 mm, $\sigma_{max} = 73.15 \text{ MPa}$.

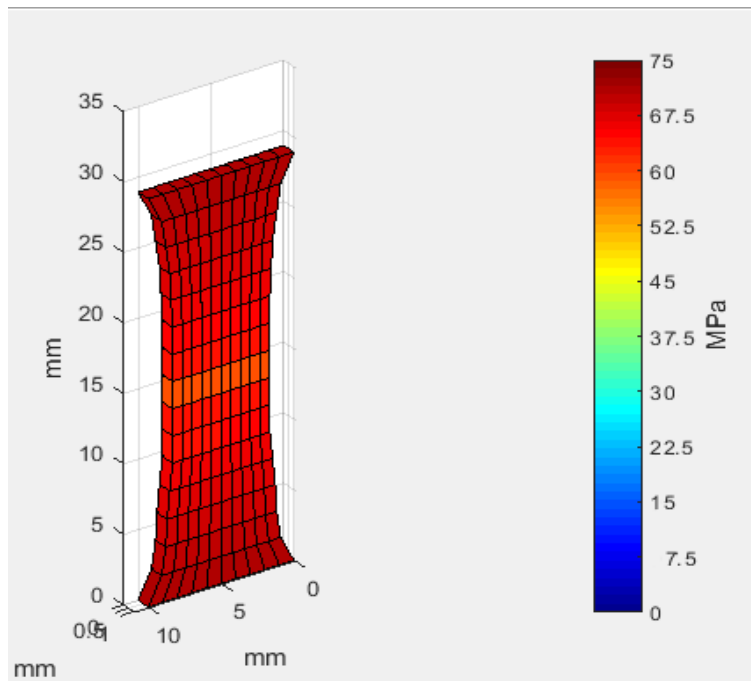


Figura 41 La tira de PU-SMP MM2520 ha recuperado 1 mm

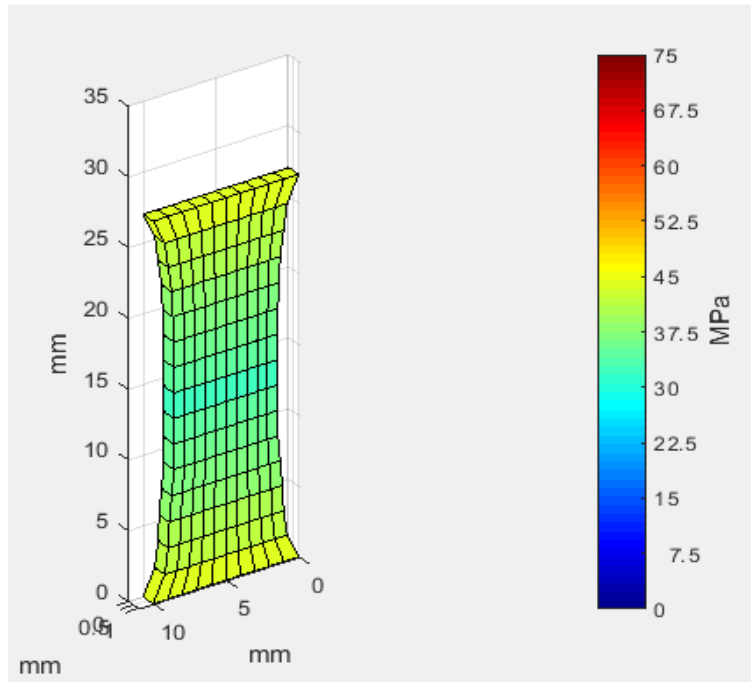


Figura 42 La tira de PU-SMP MM2520 ha recuperado 3.5mm

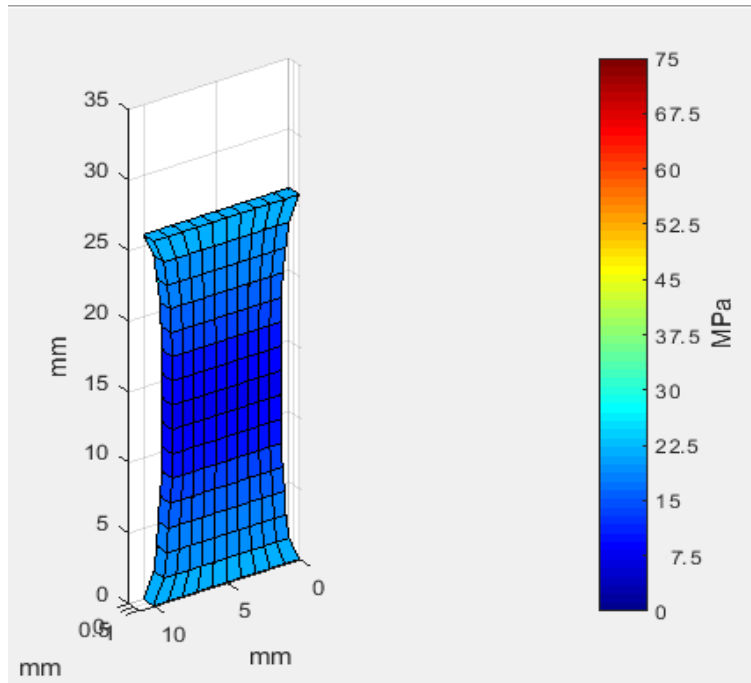


Figura 43 La tira de PU-SMP MM2520 ha recuperado 4.5 mm

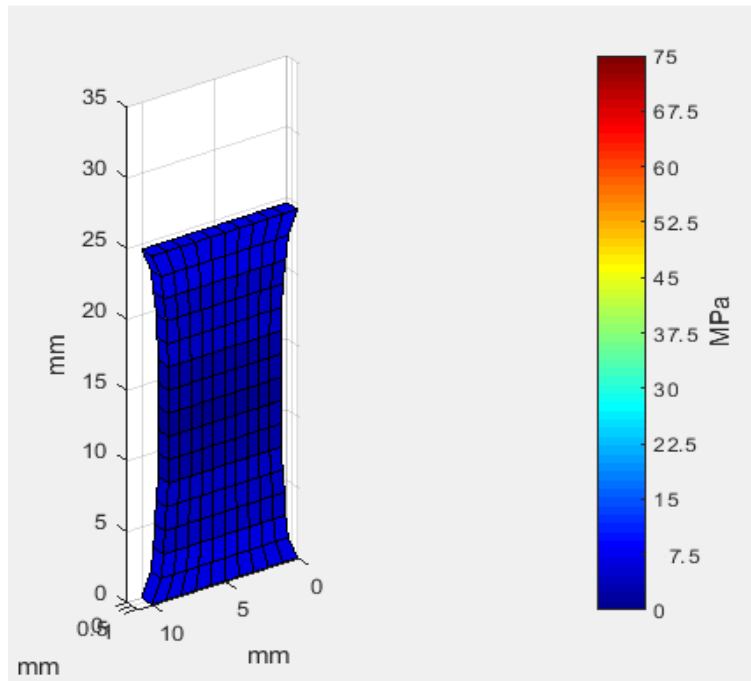


Figura 44 Fin de la simulación, la tira de PU-SMP MM2520 recupero 5.5 mm

Se observa en las figura 36 a 44 que los esfuerzos se distribuyen de manera simétrica, siendo la fila de elementos intermedia el eje de simetría debido a que, la deformación uniaxial es en el sentido de la altura de la tira de PU-SMP MM2520, por lo que la fila central es la que se encuentra a mayor distancia de los puntos de sujeción (caras inferior y superior).

En la fila central de elementos, los esfuerzos crecen y disminuyen con mayor rapidez durante la carga y la descarga en comparación con los demás elementos, sin embargo con el tiempo suficiente la distribución de esfuerzos tiende a volverse homogénea en todo el polímero.

Cuando comienza la descarga, lo primero que resalta es que, la deformación se recuperan más rápidamente en la fila central de elementos, esto puede ser debido a que durante la carga, en esta fila es la que primero alcanza el valor máximo del esfuerzo, entonces al tener una mayor cantidad de esfuerzos internos, también tendrá mayor energía para recuperar la forma.

Conforme evoluciona la recuperación de forma, el valor de esfuerzo en todos los elementos disminuye hasta alcanzar un valor aproximado a cero MPa.

Podemos ver en la figura 44 que casi todos los elementos de la tira de PU-MSP MM2520, han alcanzado un valor de esfuerzo aproximado de 7.139×10^{-4} MPa sin recuperar la longitud inicial, lo anterior debido a que el valor de los esfuerzos se ha reducido al grado de no continuar con la recuperación de forma.

La integración de elementos se lleva a cabo con el método de la cuadratura de gauss además para la simulación se tomaron las consideraciones experimentalmente de los SMP, estos

experimentan un cambio dramático en el comportamiento de la tensión y la deformación a temperaturas por encima de T_g , pasa a un comportamiento visco-plástico vítreo a temperaturas por debajo de T_g . Estas consideraciones generales se emplearon con los parámetros del PU-SMP MM2520 de la tabla 5.1, junto con el concepto de la transición de fase de primer orden para describir el cambio en el mecanismo de deformación de la elasticidad entrópica del estado gomoso a la visco-plasticidad del estado vítreo según la temperatura en tres dimensiones.

CONCLUSIONES

Este trabajo se enfocó en realizar una simulación computacional de deformación finita del PU-SMP MM2520 inducido térmicamente. Para la simulación se utilizaron los métodos numéricos de elementos finitos, Newton Rapson, Runge-Kutta.

Las simulaciones presentadas en el capítulo 4 verifican el comportamiento de una tira de PU-SMP MM2520 sometidas a carga uniaxial bajo condiciones de contorno específicas.

Presento los algoritmos de solución por medio del método de elementos finitos y las simulaciones realizadas mediante la formulación no lineal.

Por lo que se concluye que las simulaciones permiten que el modelo constitutivo, puede ser un buen candidato para predecir el comportamiento del PU-SMP MM2520 en tres dimensiones, siempre y cuando se simulen condiciones de temperatura inferiores a su temperatura de transición vítrea y bajo carga.

También se tiene que la convergencia entre los resultados experimentales de Pieczyska et. al [9] y las predicciones del modelo de varias pruebas de compresión uniaxial confirma la eficacia del modelo constitutivo propuesto para tres dimensiones.

Las técnicas numéricas utilizadas poseen un formato que permite su implementación en cualquier lenguaje de programación, en este caso utilice el software MATLAB®, este software está enfocado al cálculo numérico por lo que esta optimizado para realizar operaciones con matrices.

Al obtener la programación del modelo constitutivo y los métodos numéricos para generar una simulación de la curva esfuerzo-deformación es un ejercicio muy útil para comprender la relación entre la aplicación de los métodos real y el que se propone para tres dimensiones.

La simulación me permite determinar que el modelo constitutivo en tres dimensiones se encuentra limitado a predecir el comportamiento esfuerzo-deformación del PU-SMP MM2520 a temperaturas por debajo de su temperatura de transición, 5°C, y a velocidades de deformación alrededor de 2×10^{-3} unidades de deformación verdadera por segundo, y solo para la etapa de carga pues no predice con precisión la relajación que tiene el PU-SMP MM2520.

Se observó que a altas temperaturas el PU-SMP MM2520 acepta grandes deformaciones, cercanas a una elongación alrededor del 500% de su tamaño inicial, (el fabricante indica que se puede estirar más allá del 600%), pero generando un valor bajo para los esfuerzos dentro del polímero, lo cual limitaría su capacidad de recuperación de forma volviéndola más lenta y con menor capacidad de retracción.

Aún falta un largo camino, para generar modelos constitutivos y por ende simulaciones precisas del comportamiento esfuerzo deformación en polímeros. La complejidad surge por la búsqueda de utilizar todas las propiedades de estos materiales, que se traduce en una continua afinación o ajuste de los modelos constitutivos actuales, construcción de más modelos y simulaciones computacionales que ayuden a refutar o descartar los mismos.

BIBLIOGRAFIA

- [1] S. Reese, M. Böl y D. Christ. (2010) Finite element-based multi-phase modelling of shape memory polymer stents.
- [2] Julie Diani a, Pierre Gilormini a, Carole Frédy a, Ingrid Rousseau b (2011) Predicting Thermal Shape Memory of Crosslinked polymer networks from linear viscoelasticity.
- [3] Mostafa Baghani¹, Reza Naghdabadi^{1,2}, Jamal Arghavani^{3,1} and Saeed Sohrabpour^{4,1} (2011) A constitutive model for shape memory polymers with application to torsion of prismatic bars.
- [4] H. Tobushi, T. Hashimoto, S. Hayashi and E. Yamada (1997) Thermomechanical Constitutive Modeling in Shape Memory Polymer of Polyurethane Series
- [5] Yunxin Li, Siu-Siu Guo, Yuhao He and Zishun Liu (2014) A simplified constitutive modelling for predicting shape memory polymer deformation behavior.
- [6] Yiping Liu a,*, Ken Gall a, Martin L. Dunn a, Alan R. Greenberg a, Julie Diani b (2006) Thermomechanics of shape memory polymers: Uniaxial experiments and constitutive modeling
- [7] H. Jerry Qian,_, Thao D. Nguyenb, Francisco Castroa, Christopher M. Yakackia, Robin Shandasa (2008) Finite deformation thermo-mechanical behavior of thermally induced shape memory polymers
- [8] Elzbieta Alicja Pieczyska, Michal Maj, Katarzyna Kowalczyk-Gajewska, Maria Staszczak, Leszek Urbanski, Hisaaki Tobushi, Shunichi Hayashi, and Mariana Cristea. (2014) Mechanical and Infrared Thermography Analysis of Shape Memory Polyurethane
- [9] E A Pieczyska¹, M Maj¹, K Kowalczyk-Gajewska¹, M Staszczak¹, A Gradys¹, M Majewski¹, M Cristea², H Tobushi³ and S Hayashi⁴ (2015) Thermomechanical properties of polyurethane shape memory polymer-experiment and modelling
- [10] E. M. Arruda y M. C. Boyce. (1993). A Three-Dimensional Constitutive Model for the Large Strain Stretch Behavior of Rubber Elasticity Materials. *J. Mech. Phys.* 2 pp 389 412
- [11] H.J. Qi y M.C. Boyce. (2004). Stress-strain behavior of thermoplastic polyurethanes. *Mechanics of Materials* 37 817-839
- [12] Hu. (2014). *Shape Memory Polymers: Fundamentals, Advances and Applications*. United Kingdom. Smithers RAPRA.
- [13] A. Leindlein. (2010). *Shape Memory Polymers*. Berlin Heidelberg. Springer.
- [14] SMP Technologies Inc. (2008). Tokyo Japon. *Shape Memory Polymer*.
http://www.smptechno.com/index_en.html.

[15] J Hu. (2014). Shape Memory Polymers: Fundamentals, Advances and Applications. United Kingdom. Smithers RAPRA.

[16] SMP Technologies Inc. (2008). Tokyo Japon. Shape Memory Polymer.
<http://www2.smp techno.com/smp/>

[17] MP Technologies Inc. (2008). Tokyo Japon. Shape Memory Polymer.
<http://www2.smp techno.com/en/smp/>

[18] Ye Z, Wei M H. (2015). Shape memory effect in polymeric materials: mechanisms and optimization. *Procedia IUTAM* 12 83 - 92

[19] N. H. Kim. (2014). Introduction to Nonlinear Finite Element Analysis, NY, Springer

[20] J. N. Reddy. (2010). **PRINCIPLES OF CONTINUUM MECHANICS** A Study of Conservation Principles with Applications. New York. Cambridge University Press

[21] R. M. Bowen. (2007). **INTRODUCTION TO CONTINUUM MECHANICS FOR ENGINEERS**. NY. Dover Publications

[22] Bergström J. (2015). **Mechanics of Solid Polymers: Theory and Computational Modeling** (Plastics Design Library). Norwich, NY. William Andrew

[23] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor. (2004). **El Método de los Elementos Finitos: Formulación básica y problemas lineales**. España. McGraw-Hill College.

[24] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor. (2004). **El Método de los Elementos Finitos: Mecánica de Sólidos y Fluidos. Dinámica y No linealidad**. España. McGraw-Hill College.

[25] J. N. Reddy, *An Introduction to Nonlinear Finite Element Analysis Reddy.pdf*. 2004.

[26] A. J. M. Ferreira. (2009). **MATLAB codes for Finite Element Analysis Solids and Structures**. . NY. Springer.

[27] Khenanne A. (2013). **Introduction to Finite Element Analysis Using MATLAB and Abaqus**. NY. CRC Press.

[28] Oluwole O. (2011). **Finite Element Modeling for Materials Engineers Using MATLAB**. NY. Springer.

[29] H. Baaser. (2010). **Development and Application of the Finite Element Method based on MATLAB**. NY. Springer.

[30] R D Cook. (1994). **Finite Element Modeling for Stress Analysis**. NY. John Wiley & Sons.

[31] <https://www.cgal.org/>

[32] Broyden CG. A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations. *Math Comp.* 1965;19(92):577-93.

[33] Oden JT, Kikuchi N. Finite element methods for constrained problems in elasticity. *Int J Numer Methods Eng.* 1982;18:701-25.

[34] Malkas DS, Hughes TJR. Mixed finite element methods-reduced and selective integration techniques: a unification of concept. *Comput Methods Appl Mech Eng.* 1978;15:63-81.

[35] Sussman T, Bathe KJ. A finite element formulation for nonlinear incompressible elastic and inelastic analysis. *Comput Struct.* 1987;26:357-409.

GLOSARIO

SME → Shape Memory Effect, efecto de memoria de forma.

SMP → Shape Memory Polymer, polímero con memoria de forma.

Híper-elasticidad → Propiedad de los materiales elásticos en los que la ecuación constitutiva que relaciona tensiones y deformaciones se obtiene a partir una función de energía de deformación W .

Histéresis → Fenómeno por el que el estado de un material depende de los sucesos previos y que se manifiesta por el retraso del efecto sobre la causa que lo produce.

Elasticidad → Propiedad de los cuerpos sólidos en virtud de la cual recobran más o menos completamente su extensión y forma tan pronto como cesa la acción de la fuerza que las deformaba.

Plasticidad → Propiedad mecánica de los materiales que consiste en la capacidad de deformarse permanente e irreversiblemente cuando se somete a tensiones superiores a su límite elástico.

Visco-elasticidad → Es un comportamiento que presentan los materiales que exhiben propiedades viscosas y elásticas cuando se deforman.

Módulo de elasticidad → Constante elástica que relaciona la tensión con la deformación producida por dicha tensión.

Fluencia → Deformación irrecuperable que sufren los materiales debido a una carga constante, se manifiesta como una deformación muy rápida en el sentido de la carga sin que varíe la tensión aplicada.

Energía libre de Helmholtz → Potencial termodinámico de un sistema que mide el potencial de trabajo en un sistema cerrado en condiciones de temperatura constante.

Cuadratura de Gauss → Nombre de una clase de técnicas que aplica tal estrategia para obtener una aproximación más precisa de la integral.

Gradiente → Vector que se encuentra normal a la curva de nivel en el punto que se está estudiando, llámese (x,y) , (x,y,z) , (tiempo, temperatura), etcétera.

Gradiente de deformación → Nombre que recibe en mecánica de medios continuos la matriz jacobiana de la transformación que aplica la configuración inicial no deformada de un volumen en la configuración deformada en un determinado instante posterior.

Tensor → Entidad algebraica de varios componentes, que generaliza los conceptos de escalar, vector y matriz de una manera que sea independiente de cualquier sistema de coordenadas elegido.

Método numérico → Procedimiento mediante el cual se obtiene, casi siempre de manera aproximada, la solución de ciertos problemas realizando cálculos puramente aritméticos y lógicos

Medio continuo → Porción de materia formada por un conjunto infinito de partículas que forman parte, por ejemplo, de un sólido, de un fluido o de un gas, que va a ser estudiado macroscópicamente, es decir, sin considerar las posibles discontinuidades existentes en el nivel microscópico.

Reología → Rama de la física que estudia la relación entre el esfuerzo y la deformación en los materiales que son capaces de fluir.

Marco de referencia para la deformación Lagrangiana → Marco de referencia para expresar una medida del cambio de posición de una partícula, donde el observador sigue un conjunto de partículas de un medio continuo mientras éstas se mueve a través del espacio y el tiempo.

Marco de referencia para la deformación Euleriana → Marco de referencia para expresar una medida del cambio de posición de una partícula, donde el observador se centra en lugares específicos en el espacio a través del cual fluyen partículas del medio continuo a medida que pasa el tiempo.

Autochoke → Válvula de paso que busca aumentar el flujo de aire dentro de las cámaras de combustión en un motor de combustión interna durante el arranque.