Comparación entre Métodos de Cálculo de Propiedades Termoelásticas Promedio de Materiales Compuestos

M.A. Bertinetti, A. Roatta, P.A. Turner y R.E. Bolmaro

Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR) - Fac. de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura (UNR)
Bv. 27 de Febrero 210 bis - (2000) Rosario - Argentina
e-mail: pablo@ifir.ifir.edu.ar

El cálculo de las propiedades térmicas y elásticas efectivas de materiales compuestos bifásicos debe tener en cuenta, al menos en una aproximación de campo medio, el efecto de la interacción entre partículas o fibras. En este trabajo se plantea la solución del problema, considerando dicha interacción, en forma explícita y mediante métodos iterativos de cálculo.

The calculus of the effective thermal and elastic properties of non-dilute two-phase composites requires to take into account the interaction between particles. In the present work the problem, accounting for such an interaction, is solved explicitly and using iterative methods.

Introducción

En la determinación de las propiedades térmicas y elásticas efectivas de materiales compuestos bifásicos no diluidos se debe tomar en cuenta, al menos en una aproximación de campo medio, el efecto de la interacción entre fibras o partículas. Dicho problema se resuelve recurriendo a la formulación de Eshelby y al método de Mori-Tanaka[1]. Cuando la solución del problema se plantea no en términos de las propiedades (constantes elásticas y coeficientes de dilatación térmica) sino en términos de la respuesta del compuesto (tensión y deformación), resulta un sistema de ecuaciones para la autodeformación equivalente y para el campo elástico de interacción. Este sistema contiene la información sobre la distribución de orientaciones de las fibras o partículas, y puede ser resuelto mediante métodos iterativos o en forma explícita.

La ventaja de la solución del problema en términos del campo elástico de interacción respecto del cálculo de las propiedades a través de la denominada Aproximación Directa[2] radica en su utilización en la solución de problemas no lineales (régimen elastoplástico).

Aplicación del campo de interacción

Conceptos Básicos

Consideremos un compuesto ocupando el dominio D, el cual consiste de una matriz y un número muy grande de fibras o partículas (inhomogeneidades, las que supondremos elipsoidales). Debido a la presencia de las inhomogeneidades, cuando el material es sometido a un cambio de temperatura y/o a tracción (o desplazamiento) uniforme en el contorno, se produce una campo de tensiones internas. El promedio de tensiones internas es nulo en el dominio del compuesto. Mori y Tanaka[1] muestran que el promedio de dichas tensiones internas en el dominio de la matriz es expresado como:

$$\langle\tilde{\sigma}\rangle_M = -f\langle\tilde{\sigma}^\infty\rangle_\Omega \tag{1}$$

donde: Ω y f son el dominio y la fracción de volumen de las inhomogeneidades, y $\tilde{\sigma}^\infty$ es la solución de Eshelby del problema de una única inhomogeneidad en una matriz infinita. Si se tiene una distribución de orientaciones $\rho(\theta,\varphi)$ de inhomogeneidades, y en función de la autodeformación equivalente, la expresión (1) se escribe entonces:

$$\langle\tilde{\sigma}\rangle_M = -2\pi f\,\mathbf{C}^M \iint_{(\varphi,\theta)\equiv f} \rho_f\left(\mathrm{S}_f - \mathrm{I}\right)\varepsilon_f^*\,df \tag{2}$$

donde: $\mathbf{C}^M$ es el tensor de constantes elásticas de la matriz, S_f y ε_f^* son el tensor de Eshelby y la autodeformación equivalente asociados a la inhomogeneidad con orientación f. Por lo tanto, para calcular el campo elástico promedio en el dominio de la matriz debe resolverse primero el problema de Eshelby asociado a una inhomogeneidad en una matriz infinita. Dicha solucion se obtiene de la siguiente expresión[3]:

$$\begin{aligned}&\mathbf{C}_f^I\left(\mathbf{E}^c + \mathrm{S}_f\varepsilon_f^* - \alpha_f^I\Delta T\right)\\ &= \mathbf{C}^M\left(\mathbf{E}^0 + \left(\mathrm{S}_f - \mathbf{I}\right)\varepsilon_f^* - \alpha^M\Delta T\right)\end{aligned} \tag{3}$$

donde: $\mathbf{C}_f^I$ es el tensor de constantes elásticas de la inhomogenidad, α_f^I y α^M son los tensores de coeficientes de dilatación térmica de la inhomogeneidad y matriz, respectivamente y, ΔT y $\mathbf{E}^0$ son el cambio de temperatura y la deformación aplicados. El subíndice f denota una dada orientación y la ecuación (3) se ha escrito en el sistema de referencia asociado a la matriz.

El cálculo del campo de interacción entre fibras o partículas, deriva de considerar que existiendo un gran número de las mismas, la inclusión de una nueva en un espacio permitido de la matriz, no perturba apreciablemente el campo preexistente. Sin embargo esta última, la cual puede ser pensada como una partícula testigo, estará sometida a un campo que resulta de la superposición del campo elástico debido a las condiciones de borde y el campo promedio dado por la expresión (2), al que denominaremos campo de interacción. La ecuación para la autodeformación equivalente contiene un término más, y resulta:

$$\begin{aligned} &\mathbf{C}_f^I\left(\mathbf{E}^0+\varepsilon^{int}+\mathbf{S}_f\,\varepsilon_f^*-\alpha_f^I\,\Delta T\right) \\ &=\mathbf{C}^M\left(\mathbf{E}^0+\varepsilon^{int}+\left(\mathbf{S}_f-\mathbf{I}\right)\varepsilon_f^*-\alpha^M\,\Delta T\right) \end{aligned} \tag{4}$$

donde, a partir de la ecuación (2) el campo de interacción se escribe como:

$$\varepsilon^{int}=-2\pi f \iint_{(\varphi,\theta)=f} \rho_f\left(\mathbf{S}_f-\mathbf{I}\right)\varepsilon_f^*\,df \tag{5}$$

La solución de las autodeformaciones equivalentes asociadas a cada orientación se obtiene de la resolución del sistema de ecuaciones dado por las expresiones (4) para cada una de las orientaciones en conjunto con la ecuación (5) para el campo de interacción. A partir de esta solución, la deformación promedio en el compuesto (bajo condición de borde tracción uniforme) se calcula según:

$$\langle\varepsilon\rangle_D=\mathbf{E}^0+2\pi f \iint_{(\varphi,\theta)=f} \rho_f\,\varepsilon_f^*\,df=\mathbf{C}^{C^{-1}}\Sigma+\alpha^C\Delta T \tag{6}$$

donde: $\mathbf{C}^C$ y α^C son el tensor de constantes elásticas y el tensor de coeficientes de dilatación térmica del compuesto. El campo de deformación $\mathbf{E}^0$, que es el campo de deformación al cual se encontraría sometida la matriz si contuviese una única inhomogeneidad y fuese infinita, esta dado por:

$$\mathbf{E}^0=\mathbf{C}^{M^{-1}}\Sigma+\alpha^M\,\Delta T \tag{7}$$

De las ecuaciones (6) y (7) se obtienen las propiedades: constantes elásticas y coeficientes de dilatación térmica del compuesto.

Métodos de Resolución

La Aproximación Directa [2], aplicada sólo al caso de constantes elásticas, consiste en despejar del sistema de ecuaciones (4)-(7) la tensión aplicada y resolver el problema en función de las constantes elásticas: de la inhomogenidad, de la matriz y del compuesto. La solución que proponemos aqui consiste en resolver el problema en función del campo de deformación y obtener el campo de interacción, el cual puede ser usado en la solución de un problema no necesariamente lineal.

En términos del campo de deformaciones dicha solución se puede plantear a través de un método iterativo. Este método[4-5] consiste en iniciar el cálculo suponiendo que el campo de interacción es nulo y resolver para las autodeformaciones equivalentes utilizando las expresiones (4). Con dicha solución se calcula una primera corrección a la deformación de interacción dada por (5), la que es utilizada para resolver nuevamente las ecuaciones (4), y asi sucesivamente. Como se demostrará más adelante este método no es siempre convergente y dependiendo de la relación entre constantes elásticas de inhomogeneidad y matriz (factor de inhomogeneidad elástica), es necesario plantearlo para condición de borde de tracción uniforme o condición de borde de desplazamiento uniforme, a fin de obtener convergencia.

La forma explícita consiste en despejar la autodeformación equivalente de la ecuación (4), quedando esta en función del campo de interacción. Llamando

$$\mathbf{T}=\left\{\left(\mathbf{C}^M-\mathbf{C}_f^I\right)\mathbf{S}_f-\mathbf{C}^M\right\}^{-1} \tag{8}$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_f^*=\mathbf{T}\left(\mathbf{C}_f^I-\mathbf{C}^M\right)\left(\mathbf{E}^0+\varepsilon^{int}\right)- \\ \mathbf{T}\left(\mathbf{C}_f^I\,\alpha_f^I-\mathbf{C}^M\,\alpha^M\right)\Delta T \end{aligned} \tag{9}$$

La expresión (9) se reemplaza en (5), despejando luego el campo de interacción:

$$\begin{aligned} &\left\{\mathbf{I}+2\pi f \iint_{(\varphi,\theta)=f} \rho_f\left(\mathbf{S}_f-\mathbf{I}\right)\mathbf{T}\left(\mathbf{C}_f^I-\mathbf{C}^M\right)df\right\}\varepsilon^{int}= \\ &=-2\pi f \iint_{(\varphi,\theta)=f} \rho_f\left(\mathbf{S}_f-\mathbf{I}\right)\mathbf{T} \\ &\left\{\left(\mathbf{C}_f^I-\mathbf{C}^M\right)\mathbf{E}^0-\left(\mathbf{C}_f^I\,\alpha_f^I-\mathbf{C}^M\,\alpha^M\right)\right\}df \end{aligned} \tag{10}$$

La ecuación (10) se puede escribir en función de la fracción de volumen según la forma:

$$\left(\mathbf{I}+f\,\mathbf{A}\right)\varepsilon^{int}=f\,\mathbf{B} \tag{11}$$

Los tensores **A** y **B** son función de las propiedades de la matriz, de las propiedades y distribución de orientaciones de las fibras o partículas, y de las condiciones de borde. Dichos tensores no son función de la fracción de volumen. Para obtener las propiedades del compuesto y el campo de interacción, se calculan primero los tensores **A** y **B**, y luego se resuelve la expresión (11) para fracciones de volumen desde 0 hasta 1. Una vez calculado el campo de interacción, las autodeformaciones equivalentes resultan de las ecuaciones (9). Finalmente, las constantes elásticas y los coeficientes de dilatación térmica del compuesto se calculan utilizando las expresiones (6) y (7).

Casos Límites

A fin de simplificar el estudio de los casos límites, consideraremos una distribución de orientaciones unidireccional. En este caso las propiedades de las fibras o partículas, el tensor de Eshelby y la autodeformación equivalente, son los mismos para todas las fibras o partículas, cuando se escriben en el sistema de referencia asociado a la matriz. Las ecuaciones (5) y (6) son reescritas en forma simplificada, y reemplazando estas expresiones en la ecuación (9) resulta, luego de despejar la autodeformación equivalente:

$$
\left\{-f\,\mathbf{C}^{I}+(1-f)\mathbf{C}^{M}(\mathbf{S}-\mathbf{I})-(1-f)\mathbf{C}^{I}\mathbf{S}\right\}\varepsilon^{*}
=\begin{cases}\left(\mathbf{C}^{I}-\mathbf{C}^{M}\right)\mathbf{C}^{M^{-1}}\Sigma & \text{if } \Delta T=0\\ \left(\mathbf{C}^{I}-\mathbf{C}^{M}\right)\alpha^{M}\Delta T- & \\ \left(\mathbf{C}^{I}\alpha^{I}-\mathbf{C}^{M}\alpha^{M}\right)\Delta T \text{ if } \Sigma=0 & \end{cases} \quad (12)
$$

Respecto de la fracción de volumen

A partir de la ecuación (12) es claro que en el caso límite de f = 0 ambas propiedades del compuesto, constantes elásticas y coeficientes de dilatación térmica, se corresponden con los respectivos valores de la matriz para dichas propiedades. En el caso límite de f = 1, las ecuaciones (12) se escriben:

$$
\varepsilon^{*}=-\mathbf{C}^{I^{-1}}\begin{cases}\left(\mathbf{C}^{I}-\mathbf{C}^{M}\right)\mathbf{C}^{M^{-1}}\Sigma \text{ if } \Delta T=0\\ \mathbf{C}^{I}\left(\alpha^{M}-\alpha^{I}\right)\Delta T \text{ if } \Sigma=0\end{cases} \quad (13)
$$

de lo que resulta:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{C}^{I^{-1}} &= \mathbf{C}^{C^{-1}} && \text{if } \Delta T=0\\
\alpha^{I} &= \alpha^{C} && \text{if } \Sigma=0
\end{aligned} \quad (14)
$$

los cuales corresponden a los límites correctos en caso de tener un compuesto con un 100% de de fibras o partículas.

Respecto del factor de inhomogeneidad elástico $(\mathbf{C}^{M^{-1}}\mathbf{C}^{I})$

En esta sección obtendremos los casos límites de interés en función de la relación entre constantes elásticas de matriz e inhomogeneidad (fibras o partículas). Los siguientes tres casos serán analizados: $\mathbf{C}^{M^{-1}}\mathbf{C}^{I}=\mathbf{I}$, $\mathbf{C}^{M^{-1}}\mathbf{C}^{I}\to 0$ and $\mathbf{C}^{M^{-1}}\mathbf{C}^{I}\to\infty$.

- Caso I - $\mathbf{C}^{M^{-1}}\mathbf{C}^{I}=\mathbf{I}$ - Material elástico homogéneo

$$
\begin{aligned}
\mathbf{C}^{I} &= \mathbf{C}^{M}=\mathbf{C}^{C}\\
\alpha^{C} &= f\,\alpha^{I}+(1-f)\alpha^{M}
\end{aligned} \quad (15)
$$

- Caso II - $\mathbf{C}^{M^{-1}}\mathbf{C}^{I}\to 0$ - Inhomogeneidades blandas (o cavidades)

$$
\begin{aligned}
\mathbf{C}^{C} &= \mathbf{C}^{M}\left(\mathbf{I}-f(1-f)^{-1}(\mathbf{S}-\mathbf{I})^{-1}\right)^{-1}\\
\alpha^{C} &= \alpha^{M}
\end{aligned} \quad (16)
$$

- Caso III - $\mathbf{C}^{M^{-1}}\mathbf{C}^{I}\to\infty$ - Inhomogeneidades duras

$$
\begin{aligned}
\mathbf{C}^{C} &= \mathbf{C}^{M}\left(\mathbf{I}-f\left(f\,\mathbf{I}+(1-f)\mathbf{S}\right)^{-1}\right)^{-1}\\
\alpha^{C} &= \alpha^{M}-f\left(f\,\mathbf{I}+(1-f)\mathbf{S}\right)^{-1}\left(\alpha^{M}-\alpha^{I}\right)
\end{aligned} \quad (17)
$$

En el caso I, correspondiente a un material elásticamente homogéneo, los coeficientes de dilatación térmica del compuesto satisfacen la regla de las mezclas. Para inhomogeneidades muy blandas (o cavidades), caso II, los coeficientes de dilatación térmica resultan los correspondientes a la matriz, mientras que las constantes elásticas resultan menores que las de la matriz hasta alcanzar un valor tendiendo a cero cuando la fracción de volumen de inhomogeneidades es 1. Por último, cuando las inhomogeneidades son muy duras, caso III, las constantes elásticas del compuesto aumentan desde el valor correspondiente a la matriz cuando se aumenta la fracción de volumen.

Convergencia del método iterativo de resolución

En esta sección se analizan las condiciones bajo las cuales el método iterativo converge. Consideremos las expresiones (5) y (9), ya simplificadas para una distribución unidireccional para el caso de un incremento nulo de temperatura, y condición de borde de tracción uniforme. Estas expresiones pueden escribirse en forma simplificada según:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{D}_1\left(\varepsilon^{int}+\mathbf{E}\right) &= \varepsilon^{*}\\
\varepsilon^{int} &= \mathbf{D}_2\,\varepsilon^{*}
\end{aligned} \quad (18)
$$

Como se describió previamente, el método iterativo consiste en proponer inicialmente $\varepsilon^{int}=\mathbf{0}$, y obtener las autodeformaciones equivalentes de la ecuación (18.a). Luego reemplazar esta solución en la ecuación (18.b) para calcular el campo de interacción, y así sucesivamente. Esta iteración da la serie:

$$
\varepsilon^{int}=\left[\sum_{n=0}^{\infty}\left(\mathbf{D}_2\,\mathbf{D}_1\right)^{n}-\mathbf{I}\right]\mathbf{E} \quad (19)
$$

la cual converge si $\left\|\mathbf{D}_2\,\mathbf{D}_1\right\|<1$. De la forma de los tensores $\mathbf{D}_1$ y $\mathbf{D}_2$ las siguientes condiciones límites para la relación de inhomogeneidad de constantes elásticas son analizadas:

- Caso I

$$
\begin{gathered}
\mathbf{C}^{M}\gg\mathbf{C}^{I} \;\Rightarrow\; \mathbf{D}_1=(\mathbf{I}-\mathbf{S})^{-1}\to\\
\mathbf{D}_2\,\mathbf{D}_1=-f(\mathbf{S}-\mathbf{I})(\mathbf{I}-\mathbf{S})^{-1}=f\\
\text{Converge}\,\forall\, f<1
\end{gathered} \quad (20)
$$

- Caso II

$$
\begin{gathered}
\mathbf{C}^{M}\ll\mathbf{C}^{I} \;\Rightarrow\; \mathbf{D}_1=-\mathbf{S}^{-1}\to\\
\mathbf{D}_2\mathbf{D}_1=f(\mathbf{S}-\mathbf{I})\mathbf{S}^{-1}=f\left(\mathbf{I}-\mathbf{S}^{-1}\right)\\
\text{Converge}\,\forall\, f<\left\|\left(\mathbf{I}-\mathbf{S}^{-1}\right)\right\|^{-1}
\end{gathered} \quad (21)
$$

Mientras que en el caso de fibras o partículas blandas el método iterativo es convergente independientemente de la fracción de volumen y de la forma de las inhomogeneidades (información contenida en el tensor de Eshelby), para el caso de fibras o partículas rígidas dicho método converge hasta una dada fracción de volumen la cual depende de la forma de las inhomogeneidades.

En el caso de realizarse el método iterativo con los tensores que resultan de imponer la condición de desplazamiento uniforme, la condición bajo la cual se tiene convergencia se invierte. En este caso el método convergerá independientemente de la fracción de volumen y de la forma de las inhomogeneidades para fibras o partículas rígidas, y no será siempre convergente para partículas blandas.

Conclusiones

- Se ha desarrollado el método explícito para calcular propiedades elásticas y térmicas de materiales compuestos bifásicos no diluidos tomando en cuenta el campo de interacción entre fibras o partículas.
- Se ha verificado la validez de las soluciones de dicho método en los casos límites de fracción de volumen y de factor de inhomogeneidad elástico.
- Se propone una relación entre fracción de volumen y forma de inhomogeneidades bajo la cual el método iterativo es convergente.

Referencias

1 - Mori, T. and Tanaka, K., Acta metall. **21** (1973) 571.

2 - Benveniste, Y., Mechanics of Materials **6** (1987) 147.

3 - Mura, T., "Micromechanics of Defects in Solids" (1987) Martin Nijhoff, The Hague.

4 - Bertinetti, M.A., Turner, P.A., Bolmaro, E.R. and Tome, C.N., J.Am.Ceram.Soc. (1996) en prensa.

5 - Mori, T. and Wakashima, K., "Micromechanics and Inhomogeneity" (1990) Springer-Verlag.