

DISEÑO ÓPTIMO DE MATERIALES PARA PIEZAS SUJETAS A ESFUERZOS TERMO-MECÁNICOS

Víctor Fachinotti, Sebastián Toro y Pablo Sánchez

Centro de Investigación de Métodos Computacionales (CIMEC), Universidad Nacional del Litoral (UNL)/ Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Predio CCT-CONICET Santa Fe, Ruta 168, Paraje El Pozo, 3000, Santa Fe, Argentina

Palabras Clave: Diseño Óptimo de Materiales, Multiescala, Homogeneización, Optimización, Cargas Termomecánicas.

Resumen. En este trabajo se propone una metodología para diseñar los materiales que conformarán una pieza (dominio macroscópico) para que respondan de manera óptima a esfuerzos termomecánicos. La respuesta del material es función de variables macroestructurales, macroestructurales, dependientes a su vez de la temperatura y/o el desplazamiento en la pieza. A su vez, diseñar un material implica intervenir sobre su microestructura, de modo que las variables de diseño son parámetros microestructurales.

El problema a resolver se convierte entonces en un problema de minimización de una función dependiente de variables macroestructurales en un espacio de diseño conformado por variables microestructurales.

Las variables macroestructurales primarias, esto es el desplazamiento y la temperatura, se determinan por solución de sendos problemas de elementos finitos sobre una pieza de material no-homogéneo con propiedades efectivas. Dichas propiedades se obtienen por homogeneización de la respuesta microestructural, así que son función de parámetros microestructurales. Asumimos que los materiales exhiben respuestas térmica y mecánica lineales, lo que posibilita homogeneizar las propiedades previamente al análisis térmico o mecánico de la pieza.

Como aplicación, se busca maximizar la rigidez de una viga cantilever sujeta a carga térmica diseñando su microestructura consistente de una matriz de acero y capas horizontales y verticales de cobre. La solución obtenida conduce a una viga que es considerablemente más rígida que si se construyera enteramente en acero (el material con mayor rigidez y menor expansión térmica entre los usados).

1. INTRODUCCIÓN

En los últimos años, impulsado por la potencia creciente de las computadoras y por el desarrollo de modelos computacionales multiescala fiables, se está produciendo un cambio de paradigma en la selección de los materiales para que satisfagan requerimientos ingenieriles específicos, pasando de elegir “materiales de catálogo” a crear “materiales de diseño” (McDowell y Story, 1998), en los que se alteran criteriosamente las propiedades a distintas sub-escalas (micro- y mesoscópicas) a fin de alcanzar una deseada propiedad a escala macroscópica.

Matemáticamente, el diseño de materiales es un problema de optimización en el cual las variables de diseño son características de la microestructura: diámetro, distribución espacial, propiedades mecánicas y dirección de las fibras en compuestos reforzados con fibras, textura y tamaño de los granos en policristales, tamaño, forma y distribución de poros en materiales porosos, morfología de las celdas en materiales celulares, etc.

Mientras las variables de diseño son microestructurales, la función objetivo se formula generalmente en términos de variables observables, a saber, la temperatura y el desplazamiento en un problema termomecánico como el que nos ocupa. La determinación de dichas variables implica definir propiedades termomecánicas macroscópicas, resultado de la homogeneización de respuesta de microestructura, que en general varía en el seno de la pieza.

Resulta en definitiva un problema de minimización de una función no lineal, cuya definición requiere de la solución de un problema termomecánico sobre el dominio macroscópico, función que a través de la homogeneización depende de parámetros microestructurales, que a la sazón constituyen las variables de diseño. Se desarrolla en este trabajo la metodología de resolución de este problema y su aplicación.

2. DISEÑO DE MATERIALES PARA OPTIMIZAR LA RESPUESTA DE LA PIEZA QUE CONFORMAN

El diseño de los materiales que conforman una pieza para que cumpla de manera óptima una tarea específica (soportar una carga dada, experimentar una deformación preestablecida, etc.) es un problema de optimización en el que las variables de diseño representan las características de la microestructura, la que puede variar de un punto a otro de la pieza.

La pieza –escala macroscópica– está representada por el dominio (macroscópico) $\Omega = \Omega^1 \cup \dots \cup \Omega^N$, que se supone dividido en N subdominios (macroscópicos) Ω^I de microestructura homogénea. Sea Ω_μ^I el dominio microscópico o volumen elemental representativo (VER) del subdominio Ω^I .

Suponemos que las características de la microestructura en Ω_μ^I están descritas por una serie de parámetros $\rho^I = [\rho_1^I, \rho_2^I, \dots]$ (definiendo, por ejemplo, el diámetro, la distribución espacial, las propiedades mecánicas y la dirección de las fibras en compuestos reforzados con fibras, la textura y el tamaño de los granos en policristales, el tamaño, la forma y la distribución de poros en materiales porosos, la morfología de las celdas en materiales celulares, etc.). Agrupemos el conjunto de variables de diseño, todas ellas parámetros microestructurales, en el vector

$$\rho = [\rho^1, \rho^2, \dots, \rho^N, \dots] = [\rho_1^1, \rho_2^1, \dots, \rho_1^2, \rho_2^2, \dots, \rho_1^N, \rho_2^N, \dots] \quad (1)$$

Sobre las variables de diseño (diámetro de fibras, tamaño de granos, densidad de poros, etc. en el VER) aparecen generalmente restricciones de límites inferior y superior, o sea, $a_i \leq \rho_i \leq A_i$.

La función a minimizar o función objetivo f_{obj} , por su parte, es planteada en términos de variables macroscópicas, como es el caso, por ejemplo, si se desea minimizar la deformación o la tensión de una pieza sujeta a una carga dada. En el problema termomecánico que nos ocupa,

la función objetivo siempre podrá expresarse como

$$f_{\text{obj}} = f_{\text{obj}}(\mathbf{u}, T) \quad (2)$$

donde T es la temperatura y \mathbf{u} el desplazamiento en el dominio macroscópico Ω , que son las variables macroscópicas primarias que se obtienen como solución del problema termo-mecánico acoplado en el dominio Ω , detallado en la Sección 3.

A su vez, la respuesta macroscópica caracterizada por \mathbf{u} y T depende de las propiedades termomecánicas del material, determinadas por sus características microestructurales, definidas por el vector de variables de diseño $\boldsymbol{\rho}$, o sea,

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(\boldsymbol{\rho}) \quad (3)$$

$$T = T(\boldsymbol{\rho}) \quad (4)$$

y, por ende,

$$f_{\text{obj}} = f_{\text{obj}}(\mathbf{u}(\boldsymbol{\rho}), T(\boldsymbol{\rho})). \quad (5)$$

En general, la función objetivo resulta una función no lineal de las variables de diseño $\boldsymbol{\rho}$.

Luego, simbólicamente, el problema a resolver resulta: hallar $\boldsymbol{\rho}_{\text{opt}}$ tal que

$$f_{\text{obj}}(\mathbf{u}(\boldsymbol{\rho}_{\text{opt}}), T(\boldsymbol{\rho}_{\text{opt}})) = \min_{\boldsymbol{\rho}} f_{\text{obj}}(\mathbf{u}(\boldsymbol{\rho}), T(\boldsymbol{\rho})) \quad (6)$$

sujeto a las restricciones de límite

$$a_i \leq \rho_i \leq A_i \quad (7)$$

3. DEFINICIÓN DEL PROBLEMA TERMOMECAÁNICO EN EL DOMINIO MACROSCÓPICO

En cada iteración del proceso de optimización deberemos resolver un problema termomecánico para conocer los campos de temperatura T y de desplazamiento \mathbf{u} , en general mutuamente acoplados, en el dominio macroscópico Ω . Por un lado, las temperaturas son determinantes de la deformación térmica y pueden cambiar las propiedades mecánicas de los materiales. Por el otro, las deformaciones pueden cambiar la densidad de energía térmica en Ω . Sin embargo, supondremos que las deformaciones son suficientemente pequeñas como para despreciar su influencia sobre el campo de temperaturas.

Así, el problema termomecánico macroscópico de interés deviene débilmente acoplado: primero, resolvemos un problema puramente térmico en Ω para obtener el campo de temperaturas, luego resolvemos un problema puramente mecánico en Ω , con el campo de temperaturas previamente calculado como dato, para obtener el campo de desplazamientos.

Ambos problemas serán resueltos por el método de los elementos finitos (MEF). Son problemas típicos de MEF, ampliamente tratados en la bibliografía clásica (ver Zienkiewicz y Taylor (2000), por ejemplo). Aquí expondremos sólo los conceptos esenciales para nuestro propósito.

3.1. Problema térmico macroscópico

El problema térmico macroscópico consiste en hallar el campo de temperatura T en el dominio Ω , el que está determinado por la ecuación diferencial de conducción de calor en régimen estacionario:

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{q}}(\nabla T) = 0 \quad \forall \mathbf{X} \in \Omega \quad (8)$$

sujeta a las condiciones de borde

$$T = T_w \quad \forall \mathbf{X} \in \partial\Omega_T \quad (9)$$

$$\bar{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{n} = q_w \quad \forall \mathbf{X} \in \partial\Omega_q \quad (10)$$

donde $\bar{\mathbf{q}}(\nabla T)$ es el vector flujo de calor macroscópico u homogeneizado, T_w y q_w son los valores prescritos de temperatura y flujo de calor en las porciones $\partial\Omega_T$ y $\partial\Omega_q$ de la frontera $\partial\Omega$ de Ω , \mathbf{n} es el vector normal exterior a $\partial\Omega$.

Resolvemos el problema usando MEF, esto es, el dominio Ω es representado por una grilla de m elementos finitos y n nodos, y el campo de temperaturas es aproximado como

$$T = \Psi_i(\mathbf{X})T_i \quad (11)$$

donde T_i es la aproximación a la temperatura en el nodo $i = 1, 2, \dots, n$ y $\Psi_i(\mathbf{X})$ es la función de forma asociada al nodo i , tal que $\Psi_i(\mathbf{X}_j) = \delta_{ij}$ en todo nodo j de coordenadas \mathbf{X}_j . Para que la solución sea admisible, hacemos que satisfaga a priori las condiciones de borde sobre $\partial\Omega_T$ imponiendo $T_i = T_w$ para todo nodo i sobre $\partial\Omega_T$.

Finalmente, obtenemos las temperaturas nodales T_i como solución del siguiente sistema de ecuaciones algebraicas (forma MEF de la ecuación del calor):

$$\int_{\Omega} \bar{\mathbf{q}}(\nabla \Psi_i T_i) \cdot \nabla \Psi_j \, dV - \int_{\partial\Omega_q} q_w \Psi_j = 0 \quad (12)$$

Nótese que la temperatura T en el dominio macroscópico Ω es función de parámetros micro-estructurales. Específicamente, la relación funcional entre el vector flujo de calor homogeneizado $\bar{\mathbf{q}}$ y la temperatura T en el punto $\mathbf{X} \in \Omega^I \subset \Omega$ está determinada por la respuesta térmica del VER Ω_{μ}^I , como se explica en la Sección 4.1.

3.2. Problema mecánico macroscópico

Conocido el campo de temperatura T en el dominio macroscópico Ω , el campo de desplazamientos \mathbf{u} en Ω queda determinado por el sistema de ecuaciones diferenciales de equilibrio para cuerpos en régimen elástico:

$$\nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\varepsilon}, T) = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^s \mathbf{u}, \quad \forall \mathbf{X} \in \Omega \quad (13)$$

sujeto a las condiciones de borde

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_w \quad \forall \mathbf{X} \in \partial\Omega_u \quad (14)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}, T)\mathbf{n} = \mathbf{t}_w \quad \forall \mathbf{X} \in \partial\Omega_{\sigma} \quad (15)$$

donde $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}, T)$ es la tensión de Cauchy macroscópica u homogeneizada, $\boldsymbol{\varepsilon}$ la deformación macroscópica, \mathbf{u} es el desplazamiento macroscópico, \mathbf{u}_w y \mathbf{t}_w los valores prescritos de desplazamiento y tracción en las porciones $\partial\Omega_u$ y $\partial\Omega_{\sigma}$ de la frontera $\partial\Omega$ de normal \mathbf{n} .

Como es usual en MEF, empezamos por representar Ω como una grilla de M elementos finitos y N nodos. Estos elementos finitos no necesitan ser iguales, ni en geometría ni en orden de interpolación, a los elementos finitos del problema térmico. Luego, aproximamos el campo de desplazamientos en el dominio Ω como

$$\mathbf{u} = \Phi_i(\mathbf{X})\mathbf{u}_i \quad (16)$$

donde \mathbf{u}_i es la aproximación al desplazamiento del nodo $i = 1, 2, \dots, N$ y $\Phi_i(\mathbf{X})$ es la función de forma asociada al nodo i , tal que $\Phi_i(\mathbf{X}_j) = \delta_{ij}$ para el nodo j de coordenadas \mathbf{X}_j . Para que la solución sea cinemáticamente admisible, imponemos $\mathbf{u}_i = \mathbf{u}_w$ para todo nodo i sobre $\partial\Omega_u$.

Los desplazamientos nodales \mathbf{u}_i se obtienen como solución del siguiente sistema de ecuaciones algebraicas (versión MEF del equilibrio):

$$\int_{\Omega} \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\nabla^s \Phi_i \mathbf{u}_i, T) : \nabla^s \Phi_j \, dV - \int_{\partial\Omega_\sigma} \mathbf{t}_w \Phi_j \, dS = 0 \quad (17)$$

El desplazamiento macroscópico \mathbf{u} depende de variables microestructurales por cuanto la ley constitutiva que define la tensión homogeneizada $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ en función de la deformación $\boldsymbol{\varepsilon}$ y la temperatura T en un punto $\mathbf{X} \in \Omega^I \subset \Omega$ está determinada por la respuesta mecánica del VER Ω_μ^I , como se explica en la Sección 4.2.

4. DEFINICIÓN DEL PROBLEMA EN EL DOMINIO MICROSCÓPICO

Las variables macroscópicas homogeneizadas $\bar{\mathbf{q}}$ y $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ en un punto $\mathbf{X} \in \Omega$, que está inmerso a su vez en el subdominio de microestructura homogénea $\Omega^I \subset \Omega$, están determinadas por la respuesta termomecánica en el dominio microscópico Ω_μ^I , representativo de la microestructura de todos los puntos $\mathbf{X} \in \Omega^I$. Recordemos que el dominio microscópico Ω^I está definido paramétricamente por el vector $\boldsymbol{\rho}^I$.

Específicamente, la determinación del flujo de calor macroscópico $\bar{\mathbf{q}}$ en $\mathbf{X} \in \Omega^I$ exige la solución de la ecuación del calor en Ω_μ^I , mientras que la determinación de la tensión macroscópica $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ en $\mathbf{X} \in \Omega^I$ requiere resolver la ecuación de equilibrio en Ω_μ^I , problemas detallados a continuación.

4.1. Problema térmico microscópico

El campo de temperatura (microscópica) T_μ en el punto $\mathbf{x} \in \Omega_\mu^I$ se asume descompuesto de la forma:

$$T_\mu(\mathbf{x}) = T(\mathbf{X}) + \nabla T(\mathbf{X}) \cdot \mathbf{x} + \tilde{T}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_\mu^I \quad (18)$$

donde \tilde{T} designa la fluctuación de temperatura en Ω_μ^I . Para que T_μ sea admisible, es necesario que la fluctuación \tilde{T} esté “mínimamente restringida” en la frontera $\partial\Omega_\mu^I$ de Ω_μ^I (de Souza Neto y Feijóo, 2006), esto es, que se satisfaga

$$\int_{\partial\Omega_\mu^I} \tilde{T} \mathbf{n}_\mu \, ds = \mathbf{0} \quad (19)$$

donde \mathbf{n}_μ designa la normal a $\partial\Omega_\mu^I$.

Para usar MEF, dividimos Ω_μ en m_μ elementos finitos y n_μ nodos. No es requisito que los elementos usados para el problema microscópico sean iguales a los usados para el problema macroscópico.

Con la fluctuación \tilde{T} como única incógnita, la aproximamos como:

$$\tilde{T}(\mathbf{x}) = \psi_i(\mathbf{x}) \tilde{T}_i \quad (20)$$

donde $\psi_i(\mathbf{x})$ es la función de forma asociada al nodo $i = 1, \dots, n_\mu$, tal que $\psi_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$ para todo nodo j de posición \mathbf{x}_j . Se supone que \tilde{T}_i está prescrito en los nodos i sobre $\partial\Omega_\mu$ de forma tal que se satisfaga la condición de mínima restricción (19).

Luego, obtenemos las fluctuaciones nodales de temperatura \tilde{T}_i como solución del siguiente sistema de ecuaciones algebraicas (forma MEF de la ecuación del calor sobre Ω_μ sujeta a la condición de mínima restricción sobre toda la frontera $\partial\Omega_\mu^I$):

$$\int_{\Omega_\mu^I} \mathbf{q}_\mu(\nabla T_\mu) \cdot \nabla \psi_j \, dv = 0, \quad \nabla T_\mu = \nabla T + \nabla \psi_i \tilde{T}_i \quad (21)$$

donde \mathbf{q}_μ es el vector flujo de calor microscópico.

Suponemos \mathbf{q}_μ en cada punto $\mathbf{x} \in \Omega_\mu^I$ definido por la ley de Fourier

$$\mathbf{q}_\mu(\mathbf{x}) = -\mathbf{k}_\mu(\mathbf{x}) \nabla T_\mu(\mathbf{x}) = -\mathbf{k}_\mu(\mathbf{x}) \left[\nabla T(\mathbf{X}) + \nabla \tilde{T}(\mathbf{x}) \right] \quad (22)$$

donde $\mathbf{k}_\mu(\mathbf{x})$ es la conductividad térmica del material en el entorno del punto $\mathbf{x} \in \Omega_\mu$.

Nótese que, con \mathbf{q}_μ dado por la ley lineal (22), la ecuación de calor (21) define un sistema de ecuaciones algebraicas lineales para las incógnitas \tilde{T}_i .

4.1.1. Homogeneización del flujo de calor

Calculado el campo de fluctuaciones $\tilde{T}(\mathbf{x})$ para todo $\mathbf{x} \in \Omega_\mu^I$, queda determinado el campo de temperaturas $T_\mu(\mathbf{x})$ y el campo vectorial de flujo de calor $\mathbf{q}_\mu(\mathbf{x})$. Finalmente, el campo vectorial de flujo de calor homogeneizado sobre el dominio microscópico Ω_μ^I representativo del punto $\mathbf{X} \in \Omega^I$ resulta

$$\bar{\mathbf{q}}(\mathbf{X}) = \frac{1}{\Omega_\mu^I} \int_{\Omega_\mu^I} \mathbf{q}_\mu(\mathbf{x}) \, dv, \quad \forall \mathbf{X} \in \Omega^I \subset \Omega \quad (23)$$

Derivando esta expresión del flujo de calor homogeneizado respecto al gradiente de la temperatura macroscópica es posible obtener una relación constitutiva homogeneizada del tipo:

$$\bar{\mathbf{q}}(\mathbf{X}) = -\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{X}) \nabla T(\mathbf{X}), \quad \forall \mathbf{X} \in \Omega^I \subset \Omega \quad (24)$$

donde $\bar{\mathbf{k}}$ es el tensor de conductividad macroscópico, definido como

$$\bar{k}_{ij} = -\frac{d\bar{q}_i}{dT_{,j}} \quad (25)$$

4.2. Problema mecánico microscópico

El campo de desplazamiento (microscópico) \mathbf{u}_μ en el dominio microscópico Ω_μ^I representativo del punto $\mathbf{X} \in \Omega^I \subset \Omega$ se descompone como:

$$\mathbf{u}_\mu(\mathbf{x}) = \mathbf{u}(\mathbf{X}) + \varepsilon(\mathbf{X})\mathbf{x} + \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_\mu \quad (26)$$

donde $\tilde{\mathbf{u}}$ denota el campo de fluctuación de desplazamiento en Ω_μ^I . Para que \mathbf{u}_μ sea cinemáticamente admisible, es necesario que la fluctuación $\tilde{\mathbf{u}}$ esté “mínimamente restringida” en la frontera $\partial\Omega_\mu$ de Ω_μ^I (de Souza Neto y Feijóo, 2006), esto es, que se satisfaga

$$\int_{\partial\Omega_\mu^I} \tilde{\mathbf{u}} \otimes^s \mathbf{n}_\mu \, ds = \mathbf{0} \quad (27)$$

Para usar MEF, dividimos Ω_μ^I en M_μ elementos finitos y N_μ nodos. No es necesario que estos elementos finitos sean iguales, en forma u orden de interpolación, a los usados para el problema térmico, así como tampoco es necesario que sean iguales a los usados en el problema mecánico macroscópico.

Siendo incógnita ahora sólo el término fluctuante $\tilde{\mathbf{u}}$ del desplazamiento, se lo aproxima de la manera habitual:

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \phi_i(\mathbf{x})\tilde{\mathbf{u}}_i \quad (28)$$

donde $\tilde{\mathbf{u}}_i$ es la aproximación a la fluctuación del desplazamiento del nodo $i = 1, 2, \dots, N_\mu$ y $\phi_i(\mathbf{x})$ es la función de forma asociada al nodo i , tal que $\phi_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$ para el nodo j de coordenadas \mathbf{x}_j . Las fluctuaciones sobre los nodos ubicados en la frontera $\partial\Omega_\mu^I$ son prescritas de manera que se satisfaga a priori la condición de mínima restricción (27).

Las fluctuaciones nodales $\tilde{\mathbf{u}}_i$ se obtienen como solución del siguiente sistema de ecuaciones algebraicas (versión MEF de la ecuación de equilibrio en Ω_μ sujeta a la condición de mínima restricción sobre toda la frontera $\partial\Omega_\mu^I$):

$$\int_{\Omega_\mu^I} \boldsymbol{\sigma}_\mu(\boldsymbol{\varepsilon}_\mu, T) : \nabla^s \phi_j \, dV = 0, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_\mu = \boldsymbol{\varepsilon} + \nabla^s \phi_i \tilde{\mathbf{u}}_i \quad (29)$$

Asumiendo que los materiales presentes en Ω_μ^I son sólidos isótropos y linealmente elásticos, la tensión de Cauchy en el punto $\mathbf{x} \in \Omega_\mu^I$ está definida por la ley de Hooke:

$$\boldsymbol{\sigma}_\mu = \mathbf{C} : [\boldsymbol{\varepsilon}_\mu - \alpha(T - T_0)\boldsymbol{\delta}] \quad (30)$$

donde \mathbf{C} es el tensor de módulos elásticos, α es el coeficiente de expansión térmica lineal α , propiedades ambos del material específico del entorno del punto $\mathbf{x} \in \Omega_\mu^I$, T_0 es una temperatura de referencia arbitraria, y $\boldsymbol{\delta}$ es el tensor identidad de segundo rango, de componentes δ_{ij} .

Nótese que con $\boldsymbol{\sigma}_\mu$ dada por la ley constitutiva lineal (30), la ecuación de equilibrio (29) en el dominio microscópico Ω_μ^I define un sistema lineal de ecuaciones algebraicas con $\tilde{\mathbf{u}}_i$ como incógnitas.

4.2.1. Homogeneización de la tensión

Calculado el campo de fluctuaciones $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ para todo $\mathbf{x} \in \Omega_\mu^I$, queda determinado el campo de deformaciones $\boldsymbol{\varepsilon}_\mu(\mathbf{x})$ y el campo de tensiones $\boldsymbol{\sigma}_\mu(\mathbf{x})$. Finalmente, el campo de tensiones homogeneizado sobre el dominio microscópico Ω_μ^I representativo del punto $\mathbf{X} \in \Omega^I$ resulta

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{X}) = \frac{1}{\Omega_\mu^I} \int_{\Omega_\mu^I} \boldsymbol{\sigma}_\mu(\mathbf{x}) \, dv \quad (31)$$

Derivando esta expresión de la tensión homogeneizada respecto a la deformación macroscópica $\boldsymbol{\varepsilon}$ y a la temperatura macroscópica T , es posible obtener una relación constitutiva homogeneizada del tipo:

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{X}) = \bar{\mathbf{C}}(\mathbf{X})\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{X}) + \bar{\mathbf{c}}(\mathbf{X}) [T(\mathbf{X}) - T_0], \quad \forall \mathbf{X} \in \Omega^I \subset \Omega \quad (32)$$

donde $\bar{\mathbf{C}}$ es el tensor de módulos elásticos macroscópico, definido como

$$\bar{C}_{ijkl} = \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} \quad (33)$$

y $\bar{\mathbf{c}}$ está definido como

$$\bar{c}_{ij} = \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial T} \quad (34)$$

5. APLICACIÓN: MAXIMIZACIÓN DE LA RIGIDEZ DE UNA VIGA SUJETA A CARGA TÉRMICA

Como ejemplo, consideremos la viga de la figura 1, de largo L y alto H , empotrada en el extremo $X = 0$ y sujeta a una carga de naturaleza puramente térmica. Supondremos además que la viga está sujeta a un estado plano de deformación.

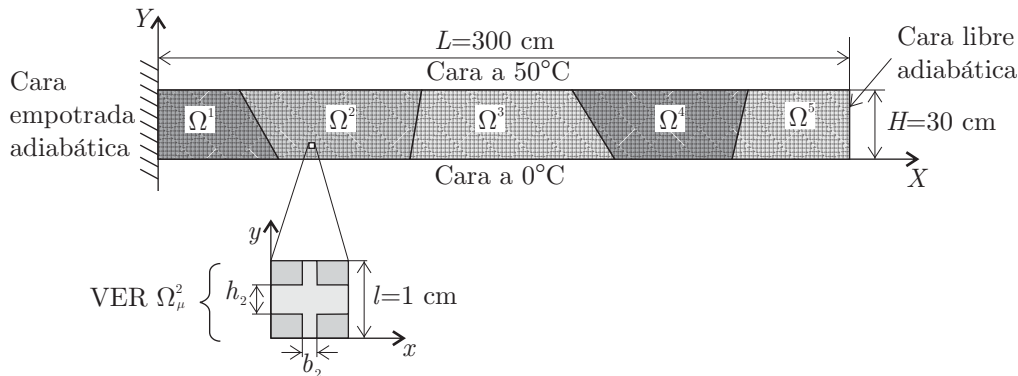


Figura 1: Viga sujeta a carga térmica. Dominio macroscópico Ω dividido en sub-dominios Ω^I de microestructura homogénea, caracterizada por el volumen elemental representativo Ω_μ^I .

La viga está representada por el dominio $\Omega = \Omega^1 \cup \dots \cup \Omega^N$, dividido en N subdominios Ω^I de microestructura homogénea. El volumen elemental representativo (VER) del subdominio Ω^I , es decir Ω_μ^I , es un cuadrado de lado $l \ll H < L$ constituido por una matriz de acero y capas verticales y horizontales de cobre. La elección de acero y cobre responde a la búsqueda de materiales con propiedades térmicas y mecánicas marcadamente diferentes, como se ilustra en la tabla 1. Además, supondremos que los materiales son linealmente elásticos y sus propiedades no dependen de la temperatura.

Tabla 1: Propiedades térmicas y mecánicas del acero y del cobre.

Propiedad	Acero	Cobre
Módulo de Elasticidad E	200. GPa	120. GPa
Coefficiente de Poisson ν	0.30	0.34
Expansión térmica lineal α	$1,0 \times 10^{-5}/^\circ\text{C}$	$1,7 \times 10^{-5}/^\circ\text{C}$
Conductividad térmica k	36.5 W/(m°C)	384.0 W/(m°C)

La microestructura en el subdominio Ω^I está completamente caracterizada por las variables de diseño normalizadas $\rho_1^I = b_I/l$ y $\rho_2^I = h_I/l$, donde b_I y h_I designan el espesor de las capas de cobre verticales y horizontales, respectivamente, en el VER Ω_μ^I . En consecuencia, existen $2N$ variables de diseño, agrupadas en el vector

$$\boldsymbol{\rho} = [\rho_1^1, \rho_2^1, \dots, \rho_1^N, \rho_2^N] \quad (35)$$

Nótese que si $\rho_1^I = b_I/l = 1$ o $\rho_2^I = h_I/l = 1$ el VER está compuesto enteramente de cobre y si $\rho_1^I = \rho_2^I = 0$, el VER se compone únicamente de acero. Luego, surgen naturalmente las restricciones $0 \leq \rho_i^I \leq 1$.

Con el objetivo de maximizar la rigidez de la viga, adoptamos como función f_{obj} a minimizar la magnitud del desplazamiento según el eje Y del punto $\mathbf{X}_{\text{tip}} = (L, 0)$ ubicado en el extremo libre de la viga, o sea $f_{\text{obj}} = v_{\text{tip}} \equiv \|u_Y(\mathbf{X}_{\text{tip}})\|$.

Luego, el problema a resolver consiste en hallar ρ_{opt} tal que

$$v_{\text{tip}}(\rho_{\text{opt}}) = \min_{\rho} v_{\text{tip}}(\rho) \quad (36)$$

sujeto a $2N$ restricciones de límite:

$$0 \leq \rho_i \leq 1, \quad i = 1, 2, \dots, 2N \quad (37)$$

5.1. Homogeneización previa de las propiedades materiales

Para materiales linealmente elásticos con propiedades termomecánicas independientes de la temperatura, se puede reducir considerablemente el tiempo de cálculo insumido por cada iteración del proceso de optimización calculando a priori las propiedades macroscópicas en términos de los parámetros microestructurales.

5.1.1. Conductividad térmica homogeneizada

Sabiendo que las propiedades materiales en el punto $\mathbf{X} \in \Omega^I$ son función de los parámetros microestructurales ρ^I , podemos reescribir la ecuación (24) para el flujo de calor homogeneizado como

$$\bar{\mathbf{q}}(\mathbf{X}) = -\bar{\mathbf{k}}(\rho^I) \nabla T(\mathbf{X}), \quad \forall \mathbf{X} \in \Omega^I \subset \Omega \quad (38)$$

con

$$\bar{k}_{ij} = -\frac{d\bar{q}_i}{dT_{,j}} \quad (39)$$

Por la ley de Fourier (22), el flujo de calor macroscópico $\bar{\mathbf{q}}$ es una función lineal del gradiente de temperatura macroscópico ∇T , por lo que la conductividad macroscópica $\bar{\mathbf{k}}$ resulta función de las variables microestructurales ρ^I únicamente.

Calculemos de $\bar{k}_{11}(\rho^I)$ para $\rho^I = [b_I/l, h_I/l]$ dado (las demás componentes de $\bar{\mathbf{k}}$ se calculan de manera análoga). Primero, resolvemos el problema térmico microscópico (descrito en la sección 4.1) suponiendo $\nabla T = \mathbf{0}$, obteniendo $\bar{\mathbf{q}}^{(0)}(\rho^I)$. Luego, resolvemos el problema térmico microscópico para $\nabla T = [1 \ 0]^T$, obteniendo $\bar{\mathbf{q}}^{(1)}(\rho^I)$. Finalmente, queda determinada \bar{k}_{11} como

$$\bar{k}_{11}(\rho^I) = \bar{q}_1^{(0)}(\rho^I) - \bar{q}_1^{(1)}(\rho^I) \quad (40)$$

Luego, haciendo variar b_I/l y h_I/l entre 0 y 1 con pasos de 0.01 se construye la grilla mostrada en la figura 2.

Una vez construidas todas las grillas \bar{k}_{ij} , suficientemente finas, podemos estimar \bar{k}_{ij} con precisión satisfactoria para cualquier valor de b_I/l y h_I/l en el intervalo $[0, 1]$ por interpolación. Dado el paso usado en la grilla de la figura 2, una interpolación lineal resultó satisfactoria.

Con $\bar{k}_{ij}(\rho^I)$ conocida a priori, queda completamente determinado el flujo de calor macroscópico $\bar{\mathbf{q}}$ por la ley de Fourier (38), evitándose así su determinación por solución de un problema térmico microscópico en cada punto de integración de la malla macroscópica. Con ello, el análisis térmico macroscópico requiere un tiempo de cálculo considerablemente menor. Además, el problema térmico macroscópico resulta idéntico al clásico problema de conducción de calor en régimen estacionario, tratado en todo libro de fundamentos del MEF (Zienkiewicz y Taylor (2000) por ejemplo) y por gran número de códigos computacionales fácilmente disponibles, comerciales o académicos.

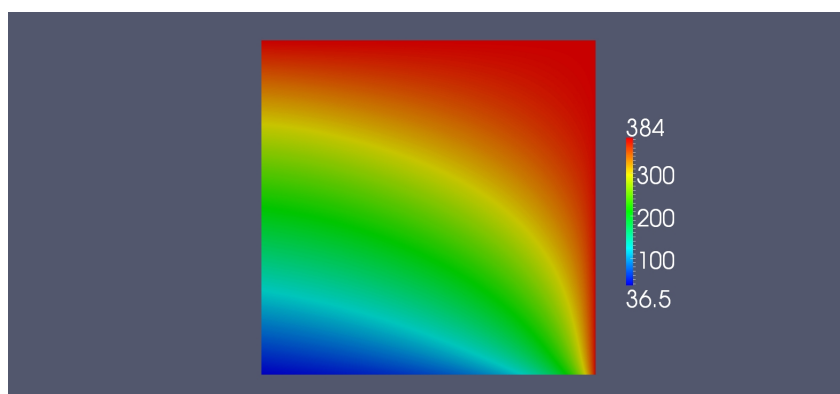


Figura 2: Conductividad térmica macroscópica \bar{k}_{11} en función del espesor las capas verticales b_I (abscisas) y del espesor de las capas horizontales h_I (ordenadas). Escala de \bar{k}_{11} dada en $W/(m^{\circ}C)$.

5.1.2. Propiedades mecánicas homogeneizadas

Así como el flujo de calor macroscópico, la tensión de Cauchy macroscópica, dada por la ecuación (32), puede calcularse como

$$\bar{\sigma}(\mathbf{X}) = \bar{\mathbf{C}}(\boldsymbol{\rho}^I)\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{X}) + \bar{c}(\boldsymbol{\rho}^I)[T(\mathbf{X}) - T_0] \quad (41)$$

con

$$\bar{C}_{ijkl} = \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} \quad (42)$$

$$\bar{c}_{ij} = \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial T} \quad (43)$$

Por la ley constitutiva elástica lineal (32), la tensión macroscópica $\bar{\sigma}$ es una función lineal de la deformación macroscópica $\boldsymbol{\varepsilon}$, por lo que el tensor de módulos elásticos homogeneizado $\bar{\mathbf{C}}$ depende únicamente de la microestructura definida por los parámetros $\boldsymbol{\rho}^I$. Asimismo, habiendo supuesto el coeficiente de expansión térmica independiente de la temperatura, la ley (32) define $\bar{\sigma}$ como función lineal de la temperatura T , de modo que \bar{c} depende únicamente de $\boldsymbol{\rho}^I$.

Empecemos por calcular $\bar{C}_{1111}(\boldsymbol{\rho}^I)$ para $\boldsymbol{\rho}^I$ dado (las demás componentes se calculan de manera análoga). Para $\boldsymbol{\rho}^I = [b_I/l, h_I/l]$ dados, resolvemos el problema mecánico microscópico (descrito en la sección 4.2) suponiendo $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{0}$ y $T = 0$, calculando así $\bar{\sigma}^{(00)}(\boldsymbol{\rho}^I)$. Luego, resolvemos el problema mecánico para $\varepsilon_{11} = 1$, todas las demás componentes de deformación nulas y $T = 0$, obteniendo $\bar{\sigma}^{(10)}(\boldsymbol{\rho}^I)$. Ahora, podemos calcular

$$\bar{C}_{1111}(\boldsymbol{\rho}^I) = \bar{\sigma}_{11}^{(10)}(\boldsymbol{\rho}^I) - \bar{\sigma}_{11}^{(00)}(\boldsymbol{\rho}^I) \quad (44)$$

Si ahora resolvemos el problema mecánico microscópico para $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{0}$ y $T = 1$ para obtener $\bar{\sigma}^{(01)}(\boldsymbol{\rho}^I)$, queda determinado

$$\bar{c}(\boldsymbol{\rho}^I) = \bar{\sigma}^{(01)}(\boldsymbol{\rho}^I) - \bar{\sigma}^{(00)}(\boldsymbol{\rho}^I) \quad (45)$$

Haciendo variar b_I/l y h_I/l entre 0 y 1 con pasos de 0.01 se construyen las grillas mostradas en la figura 3 para \bar{C}_{1111} y en la figura 4 para \bar{c}_{11} .

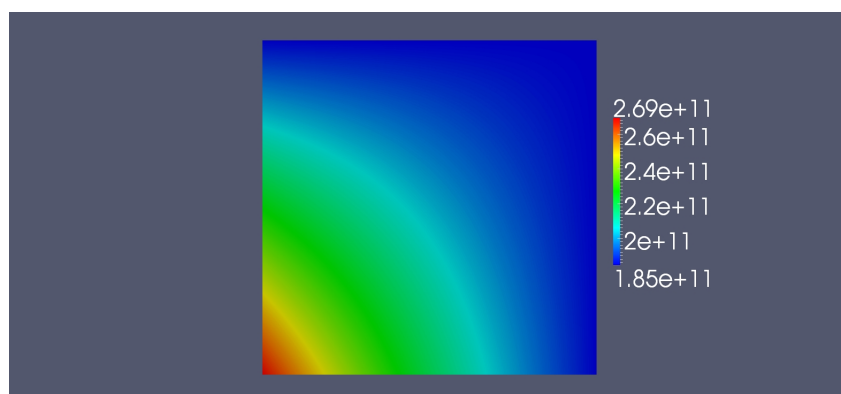


Figura 3: Módulo elástico macroscópico $\bar{C}_{1111} = \partial \bar{\sigma}_{11} / \partial \varepsilon_{11}$ en función del espesor las capas verticales b_I (abscisas) y del espesor de las capas horizontales h_I (ordenadas). Escala de \bar{C}_{1111} dada en Pa.

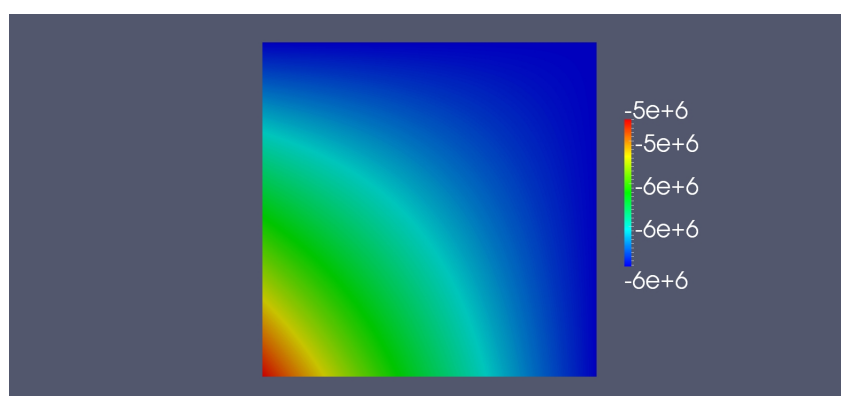


Figura 4: Propiedad mecánica macroscópica $\bar{c}_{11} = \partial \bar{\sigma}_{11} / \partial T$ en función del espesor las capas verticales b_I (abscisas) y del espesor de las capas horizontales h_I (ordenadas). Escala de \bar{c}_{11} dada en Pa/°C.

Una vez construidas todas las grillas \bar{C}_{ijkl} y \bar{c}_{ij} , suficientemente finas, resulta inmediato sus valores para cualquier valor de b_I/l y h_I/l en el intervalo $[0, 1]$ por interpolación lineal, con precisión satisfactoria.

Con \bar{C}_{ijkl} y \bar{c}_{ij} conocidos a priori para ρ^I dado, queda completamente determinada la tensión macroscópica $\bar{\sigma}$ por la ley elástica lineal (41), evitándose así su determinación por solución de un problema mecánico microscópico en cada punto de integración de la malla macroscópica. Con ello, el tiempo de cálculo del problema mecánico macroscópico se reduce considerablemente. Además, el problema mecánico macroscópico resulta idéntico al clásico problema de elasticidad lineal, ampliamente tratado en libros básicos de MEF y por gran número de códigos computacionales fácilmente disponibles, comerciales o académicos.

5.2. Resultados

Supongamos la viga de la figura 1 discretizada usando una malla de $60 \times 14 = 840$ elementos finitos cuadrangulares bilineales, tanto para el análisis térmico como para el análisis mecánico. Cada uno de los elementos finitos de la malla conforma un subdominio de microestructura homogénea Ω^I , $I = 1, \dots, 840$, microestructura que está definida por los parámetros $\rho^I = [b_I/l, h_I/l]$.

El problema de optimización resultante consta entonces de 1680 variables de diseño. Es resuelto usando la función $fmincon$ de Matlab[®] con el algoritmo “active-set” (Powell, 1978).

Las figuras 5 y 6 muestran la distribución de b_I/l y h_I/l , resultado de la optimización, para la cual el desplazamiento según Y del extremo libre de la viga alcanza un mínimo. La figura 7 muestra la distribución de desplazamientos según Y para tal microestructura óptima, donde se observa que la función objetivo alcanza el valor $v_{tip} = \|u_Y(\mathbf{X}_{tip})\| = 5,09$ mm. Si la viga fuera construida completamente en acero, obtenemos $\|u_Y(\mathbf{X}_{tip})\| = 9,78$ mm, esto es, 92 % más que el valor óptimo (en ambos casos se usó la misma malla de elementos finitos). En otras palabras, la viga con microestructura inhomogénea consistente de capas horizontales y verticales de cobre en una matriz de acero distribuida según el patrón resultado de la optimización definido por las figuras 5 y 6, es considerablemente más rígida frente a la carga térmica dada que si se fabricara completamente en acero, que es a la sazón el material de mayor módulo de elasticidad y menor coeficiente de expansión térmica entre los usados.

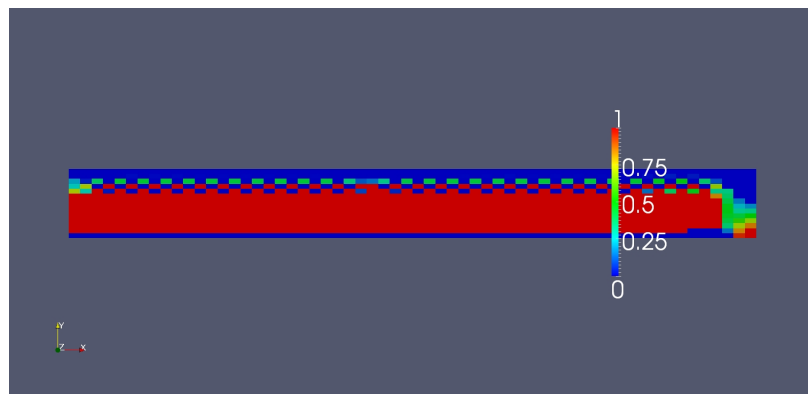


Figura 5: Distribución óptima del espesor relativo de las capas verticales (b_I/l) de la microestructura para maximizar la rigidez de la viga.



Figura 6: Distribución óptima del espesor relativo de las capas horizontales (h_I/l) de la microestructura para maximizar la rigidez de la viga.

Cabe destacar que en este caso se partió de una microestructura inicial de $h_I = b_I = 0,5l$ uniforme en toda la viga. Partiendo de distintas propuestas para la microestructura inicial, por ejemplo de $h_I = b_I = 0$, se llegó a un óptimo diferente, lo que evidencia la no convexidad de la función objetivo con respecto a las variables de diseño. En otras palabras, la solución mostrada corresponde a un mínimo local.

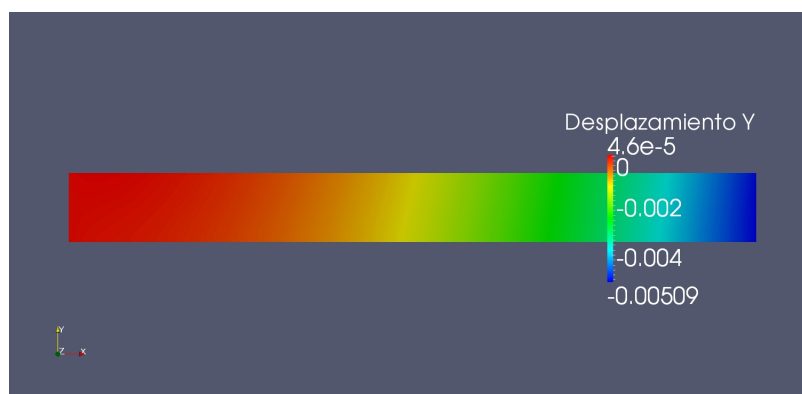


Figura 7: Distribución del desplazamiento según Y en la viga con microestructura optimizada para maximizar la rigidez de la viga.

6. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

En este trabajo se ha demostrado la potencialidad del diseño óptimo de materiales usando simulación computacional para mejorar la respuesta de estructuras sometidas a esfuerzos termo-mecánicos. En la aplicación desarrollada, la maximización de la rigidez de una viga sometida a cargas puramente térmicas cuya, se llegó a una distribución de la microestructura en el seno de la viga que garantiza que la viga sea mucho más rígida que si se construyera enteramente de acero, material de mayor módulo de elasticidad y menor expansión térmica que el acero, ambos presentes en la microestructura propuesta.

En la continuación de este trabajo, se avizoran tres aspectos a tratar:

1. eliminar o atenuar las oscilaciones observadas en la distribución de la microestructura, lo que exigirá reformular la función objetivo y/o las restricciones;
2. garantizar la validez de la hipótesis de elasticidad de los materiales empleados en la microestructura por medio de una restricción adicional;
3. buscar óptimos globales usando, por ejemplo, algoritmos genéticos.

Estas mejoras al modelo implicarán seguramente un encarecimiento del mismo. El primer gran paliativo será el análisis analítico de sensibilidad de la función objetivo respecto de las variables de diseño, realizado en este trabajo de manera numérica.

AGRADECIMIENTOS

La investigación que condujo a este trabajo recibió financiamiento del European Research Council (ERC) en el marco del proyecto “Advanced tools for computational design of engineering materials (COMP-DES-MAT)” (Seventh Framework Programme (FP/2007-2013)/ERC Grant Agreement N.320815).

REFERENCIAS

de Souza Neto E.A. y Feijóo R.A. Variational foundations of multi-scale constitutive models of solid: small and large strain kinematical formulation. Technical report 16/2006, Laboratório Nacional de Computação Científica, Petrópolis, Brasil, 2006.

- McDowell D. y Story T. New directions in materials design science and engineering. Report, Workshop Sponsored by the U.S. National Science Foundation, Georgia Institute of Technology and Morehouse College, Atlanta, GA, USA, 1998.
- Powell M.J.D. A fast algorithm for nonlinearly constrained optimization calculations. En G.A. Watson, editor, *Lecture Notes in Mathematics*, Numerical Analysis. Springer Verlag, 1978.
- Zienkiewicz O.C. y Taylor R.L. *The finite element method. Volume 1: the basis*. Butterworth-Heinemann, 5a edición, 2000.