

**UNIVERSITAT JAUME I**

**ESCOLA SUPERIOR DE TECNOLOGIA I CIÈNCIES**

**EXPERIMENTALS**

**MÀSTER UNIVERSITARI EN ENGINYERIA INDUSTRIAL**

***MODELITZACIÓ MULTIESCALA MITJANÇANT  
MÈTODE SEMIANALÍTIC EN PROBLEMES DE  
CONTACTE***

**TREBALL FI DE MÀSTER**

**AUTOR**

**Josep FORNER ESCRIG**

**TUTOR**

**Roberto PALMA GUERRERO**



## Índex

<b>MEMÒRIA</b> .....	11
1.) Objecte .....	13
2.) Abast .....	14
3.) Antecedents .....	16
3.1) Mètodes de resolució dels problemes de contacte .....	16
3.1.1) Mètodes analítics .....	16
3.1.2) Mètodes numèrics .....	18
3.1.3) Mètodes semianalítics .....	18
3.2) Codi de càlcul de contactes: ISAAC .....	19
3.2.1) Algoritme de contacte.....	20
3.3) Mètode DC-FFT .....	22
3.3.1) Zero-padding .....	24
3.3.2) Wrap-around order .....	24
3.4) Resolució del contacte .....	24
3.4.1) Problema normal .....	24
3.4.2) Problema tangencial .....	25
3.4.3) Acoblament del problema normal i tangencial.....	25
3.4.4) Algoritme del gradient conjugat (CGM).....	26
3.5) Heterogeneïtats .....	27
3.5.1) Teoria d'Eshelby.....	28
3.5.2) Mètode de resolució. Algoritme d'homogeneïtzació .....	31
3.5.3) Càlcul de les tensions induïdes per les heterogeneïtats .....	33
3.5.3.1) Mètode de Chiu.....	33
3.5.3.2) Mètode de Wang .....	35
3.5.3.3) Mètode de Galerkin .....	35
3.5.4) Influència dels gradients de tensions.....	36
3.5.4.1) Aproximació polinomial .....	36
3.5.4.2) Tècnica de voxelització .....	37
4.) Normes i referències .....	38
4.1) Disposicions legals i normes aplicades.....	38
4.2) Programes de càlcul .....	38
4.3) Pla de gestió de la qualitat aplicada durant la redacció del projecte .....	38
4.4) Bibliografia .....	38

4.5) Altres referències .....	40
5.) Definicions i abreviatures.....	40
6.) Requisits de disseny .....	40
7.) Anàlisi de solucions .....	40
7.1) Estudis paramètrics sobre els problemes de contacte .....	40
7.1.1) Estudi paramètric. Influència de la precisió del mallatge .....	43
7.1.2) Estudi paramètric. Influència de la geometria de la inclusió .....	51
7.1.3) Estudi paramètric. Influència de la posició de la inhomogeneïtat.....	53
7.1.4) Estudi paramètric. Influència de la grandària de la inhomogeneïtat respecte del radi de contacte.....	59
7.1.5) Conclusió global dels estudis paramètrics .....	63
7.2) Estudi dels medis heterogenis .....	65
7.2.1) Modificació del codi ISAAC. Implementació del canvi d'escala .....	69
7.2.2) Progressió en la modelització multiescala .....	71
7.2.2.1) Desenvolupament del zoom microestructural .....	71
7.2.2.2) Utilització de la deformació total microscòpica mitjana .....	71
7.2.3) Modelització retinguda per al canvi d'escala.....	72
7.2.3.1) Validació del funcionament de l'algoritme .....	76
7.2.3.2) Casos d'estudi .....	79
Estudi 1) Influència de la fracció volumètrica d'inhomogeneïtat .....	80
Estudi 2) Influència de les sol·licitacions aplicades .....	86
Estudi 3) Influència de la duresa relativa entre la inhomogeneïtat i la matriu.....	91
Estudi 4) Influència de la presència de diverses inhomogeneïtats .....	94
7.2.4) Conclusió de la modelització multiescala .....	98
8.) Resultats finals .....	99
9.) Planificació .....	99
10.) Ordre de prioritat entre els documents.....	100
<b>ANNEXOS</b> .....	103
A.1) Càlcul dels paràmetres d'Hertz.....	105
A.2) Nota tècnica .....	107
A.2.1) Codi Microscòpic.....	107
A.2.2) Codi Macroscòpic.....	107
<b>PRESSUPOST</b> .....	111

## Índex de les figures

Figura 1: Disc de compressor de turboreactor fabricat en material compost [Ler13] .....	14
Figura 2: Representació simplificada d'un turboreactor civil de doble cos i doble flux [Ler13]. 15	
Figura 3: Representació simplificada del contacte entre una bola i el camí de rodament d'un rodament mecànic .....	15
Figura 4: Representació del model de contacte d'Hertz [Joh85] .....	17
Figura 5: Conveni utilitzat per al sistema d'eixos.....	19
Figura 6: Algoritme general del model de contacte semianalític elastoplàstic .....	20
Figura 7: Càrrega discretitzada uniformement en $N_p$ superfícies rectangulars elementals .....	22
Figura 8: Mètode de la inclusió equivalent [Ler13].....	29
Figura 9: Algoritme general del codi de contacte semianalític per a materials elàstics heterogenis .....	31
Figura 10: Mètode de Chiu: descomposició en tres subproblemes.....	34
Figura 11: Representació d'una discretització espacial prohibida: la semillargària de la inhomogeneïtat no ha de ser un múltiple del pas de discretització espacial .....	42
Figura 12: Discretització espacial grollera. Càlcul 1 .....	44
Figura 13: Discretització espacial refinada. Càlcul 2 .....	44
Figura 14: Representació del perfil de pressió de contacte en 3D en el Càlcul 1 .....	45
Figura 15: Representació del perfil de pressió de contacte en 3D en el Càlcul 2 .....	45
Figura 16: Pressió de contacte del Càlcul 1 (discretització $h_x = 0,04$ mm) .....	46
Figura 17: Pressió de contacte del Càlcul 2 (discretització $h_x = 0,008$ mm) .....	47
Figura 18: Superposició dels perfils de pressió en els dos càlculs realitzats per a diferents refinaments del mallatge .....	48
Figura 19: Perfil de cisallament segons l'eix X i Y dels dos càlculs d'aquest primer estudi paramètric.....	49
Figura 20: Evolució de la tensió elàstica en la subsuperfície segons la profunditat .....	49
Figura 21: Evolució de la tensió elàstica en la subsuperfície segons x.....	50
Figura 22: Representació del perfil de la pressió de contacte en 3D en el Càlcul 3 .....	52
Figura 23: Pressió de contacte del Càlcul 3 (discretització $h_x = 0,008$ mm) .....	52
Figura 24: Discretització espacial refinada ( $h_x = 0,008$ mm). Càlcul 4 .....	53
Figura 25: Representació del perfil de la pressió de contacte en 3D en el Càlcul 4 .....	55
Figura 26: Pressió de contacte del Càlcul 4 (discretització $h_x = 0,008$ mm) .....	55
Figura 27: Superposició dels perfils de pressió per a inhomogeneïtats cúbiques situades a diferent profunditat .....	56
Figura 28: Pressió de contacte del Càlcul 4 (discretització $h_x = 0,008$ mm) i perfil de pressió hertzià .....	57
Figura 29: Representació d'una inhomogeneïtat voxelitzada .....	60
Figura 30: Pressió de contacte del Càlcul 5 (discretització $h_x = 0,008$ mm) .....	60
Figura 31: Superposició del perfil de pressió de la simulació amb consideració de les variacions de les eigenstrains i de les influències mútues en una mateixa inhomogeneïtat i del perfil de pressió de la simulació sense considerar la fluctuació de les eigenstrains.....	61
Figura 32: Superposició del perfil de pressió de la simulació considerant les variacions de les eigenstrains i de les influències mútues en una mateixa inhomogeneïtat, del perfil de pressió de la simulació sense considerar la fluctuació de les eigenstrains i del perfil de pressió de la simulació amb voxelització però sense considerar les influències mútues .....	62

Figura 33: Tensió de Von Mises. Teoria d'Hertz. Inhomogeneïtat superposada .....	63
Figura 34: Tensió de Von Mises. Teoria d'Eshelby clàssica: eigenstrain constant .....	63
Figura 35: Tensió de Von Mises. Voxelització + Influències mútues.....	64
Figura 36: Inhomogeneïtats ignorades a causa d'una discretització massa grollera .....	65
Figura 37: Efectes del refinament del mallatge sobre les eigenstrains. ....	67
Figura 38: Representació esquemàtica del principi de funcionament del codi ISAAC per a càlculs multiescala amb la tècnica de zoom microestructural.....	69
Figura 39: Evolució de la tensió de Von Mises segons l'eix x en el pla $y = 0$ per a una profunditat z igual a la del centre de la inhomogeneïtat (cas 1).....	82
Figura 40: Evolució de la tensió de Von Mises segons l'eix x i en pla $y = 0$ per a una profunditat z igual a la del centre de la inhomogeneïtat (cas 2).....	83
Figura 41: Error entre la tensió de Von Mises a l'escala macroscòpica i microscòpica (cas 1) sobre els punts de càlcul a l'escala macroscòpica. ....	85
Figura 42: Error entre la tensió de Von Mises a l'escala macroscòpica i microscòpica (cas 2) sobre els punts de càlcul a l'escala macroscòpica. ....	85
Figura 43: Evolució de la tensió de Von Mises segons l'eix x en el pla $y = 0$ per a una profunditat z igual a la del centre de la inhomogeneïtat (cas 3).....	89
Figura 44: Evolució de la tensió de Von Mises segons l'eix x en el pla $y = 0$ per a una profunditat z igual a la del centre de la inhomogeneïtat (cas 4).....	90
Figura 45: Evolució de la tensió de Von Mises segons l'eix x en el pla $y = 0$ per a una profunditat z igual a la del centre de la inhomogeneïtat (cas 5).....	93
Figura 46: Representació de les inhomogeneïtats contingudes per la metainclusió (cas 6) .....	94
Figura 47: Evolució de la tensió de Von Mises segons l'eix x en el pla $y = 0$ per a una profunditat z igual a la del centre de la inhomogeneïtat (cas 6).....	96
Figura 48: Error entre la tensió de Von Mises a l'escala macroscòpica i microscòpica (cas 6) sobre els punts de càlcul a l'escala macroscòpica .....	97
Figura A. 1 Contacte d'Hertz entre dues esferes .....	105

## **Índex de les taules**

Taula 1: Resum del parametratge dels càlculs 1 i 2 del primer cas d'estudi .....	43
Taula 2: Resum del parametratge del càlcul 3 del segon cas d'estudi.....	51
Taula 3: Resum del parametratge del càlcul 4 del tercer cas d'estudi .....	54
Taula 4: Resum del parametratge del càlcul 5 del quart cas d'estudi .....	59
Taula 5: Algoritme de modelització multiescala basat en l'equilibri energètic a l'escala microscòpica i macroscòpica.....	73
Taula 6: Definició del càlcul de verificació de l'algoritme .....	77
Taula 7: Definició d'un càlcul a dues escales amb una inhomogeneïtat de feble grandària en comparació amb la metainclusió .....	80
Taula 8: Definició d'un càlcul a dues escales amb una inhomogeneïtat de grandària considerable en comparació amb la metainclusió.....	81
Taula 9: Definició d'un càlcul a dues escales amb una inhomogeneïtat sotmesa a tracció i cisallament. ....	87
Taula 10: Definició d'un càlcul a dues escales amb una inhomogeneïtat sotmesa a tracció de gran amplitud. ....	88
Taula 11: Definició d'un càlcul a dues escales amb una inhomogeneïtat dura sotmesa a tracció de gran amplitud. ....	92
Taula 12: Definició d'un càlcul a dues escales amb un cúmulo d'inhomogeneïtats dures sotmeses a tracció de gran amplitud .....	95
Taula 13: Quadre recopilatori del pressupost del projecte .....	113









# MEMÒRIA



## 1.) Objecte

Aquest Treball Fi de Màster (TFM) s'inscriu en el pla d'estudis del Màster Universitari en Enginyeria Industrial de la Universitat Jaume I. L'esmentat Màster permet al graduat d'obtenir les atribucions professionals de l'antic diploma d'enginyer industrial superior. Aquest projecte ha sigut realitzat en l'àrea de Mecànica de Medis Continus i Teoria d'Estructures del Departament d'Enginyeria Mecànica i Construcció de la UJI en Castelló de la Plana sota la tutorització de Roberto PALMA GUERRERO.

Aquest treball porta sobre l'estudi de la modelització de tipus multiescala en els mètodes semianalítics per a resoldre els problemes de contacte. Els mètodes semianalítics són una classe de mètodes numèrics que permeten resoldre fàcilment un cert nombre de problemes mecànics. Aquests mètodes permeten actualment modelitzar fàcilment, i sobretot de manera robusta i ràpida els contactes entre sòlids elastoplàstics, anisòtrops o heterogenis. No obstant això, una limitació important subsisteix: les dimensions del mallatge utilitzat per a aquests mètodes han de ser necessàriament homogènies en les tres direccions de l'espai. La grandària del model està així restringida pel més petit element a modelitzar.

Ens interessem a més, en aquest treball, a estudiar sòlids que contenen heterogeneïtats, la qual cosa complexifica l'estudi del problema de contacte. Per a estudiar aquestes heterogeneïtats, el formalisme inclusional proposat per Eshelby permet determinar el camp de tensions induït per la presència d'una inhomogeneïtat en una matriu isòtropa.

L'objectiu serà doncs establir un zoom microestructural basat en aquest formalisme que permeta realitzar una descripció fina de l'estat de tensions i deformacions al voltant d'un defecte local i així intentar pal·liar una limitació important dels mètodes semianalítics. Aquest treball està organitzat en dos grans eixos: primerament unes sèries d'estudis paramètrics han sigut realitzats per a permetre'ns conèixer la influència dels diferents paràmetres sobre els problemes de mecànica de contacte i, en un segon temps, la modelització multiescala ha sigut abordada en el marc dels mètodes semianalítics.

## 2.) Abast

L'àmbit d'aplicació d'aquest treball s'emmarca en una càtedra d'investigació existent entre l'escola d'enginyers INSA de Lyon i Snecma, que és una empresa del grup francès Safran, que s'especialitza en la fabricació de motors per a la indústria aeronàutica i espacial. El laboratori titular de la càtedra és el LaMCoS (Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Structures) i la realització d'aquest treball fi de màster ha estat possible gràcies a la bona relació que es guarda amb alguns dels investigadors del mateix laboratori. Per a la realització d'aquest treball es fa servir el codi de càlcul ISAAC, creat al LaMCoS i utilitzat per Snecma.

Més concretament, l'aplicació d'aquest treball fi de màster, dins del camp de l'aeronàutica, està enfocada a l'estudi dels fenòmens de contacte que tenen lloc en les lligadures existents entre els àleps i el disc del compressor i la turbina d'un turboreactor. La tendència en el sector de l'aeronàutica és la d'alleujar el pes de les naus per tal de reduir el consum de combustible. Per tant, en aquest sector, s'està tendint a substituir els elements metàl·lics per altres menys feixucs. Encara que, inicialment, aquestes substitucions només afectaven les estructures secundàries de les naus (capots, trapes, elements interiors), actualment, s'estan estenent també a certes parts de les estructures primàries, com ara, els discs dels compressors i les turbines dels turboreactors. Una manera d'alleujar el pes dels esmentats discs és substituir el material metàl·lic, utilitzat de manera clàssica per a aquesta mena d'aplicacions, per materials compostos (composite) de matriu orgànica, que són els que presenten els processos d'elaboració més rentables actualment dins de l'espectre dels materials compostos. En la Figura 1, es pot apreciar la utilització de materials compostos en el disc del compressor d'un turboreactor.

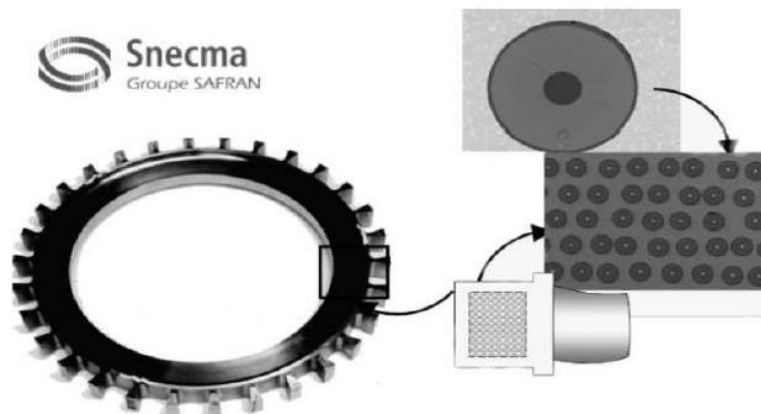


Figura 1: Disc de compressor de turboreactor fabricat en material compost [Ler13]

Per tant, l'estudi dels fenòmens de contacte adquireix una rellevància especial en aquest noves configuracions de disc ja que la proximitat geomètrica de les fibres dels materials compostos a les zones de contacte (que constitueixen el punt d'unió amb els àleps) poden donar lloc a fenòmens de sobrepressió no previstos en el disseny clàssic i que poden provocar la ruptura de la lligadura àlep - disc durant el funcionament del turboreactor.

Per tal d'aclarir la ubicació dels discs amb àleps en el turboreactor s'adjunta, a continuació, una imatge on s'han encerclat en roig els discs corresponents a un compressor i a una turbina del turboreactor.

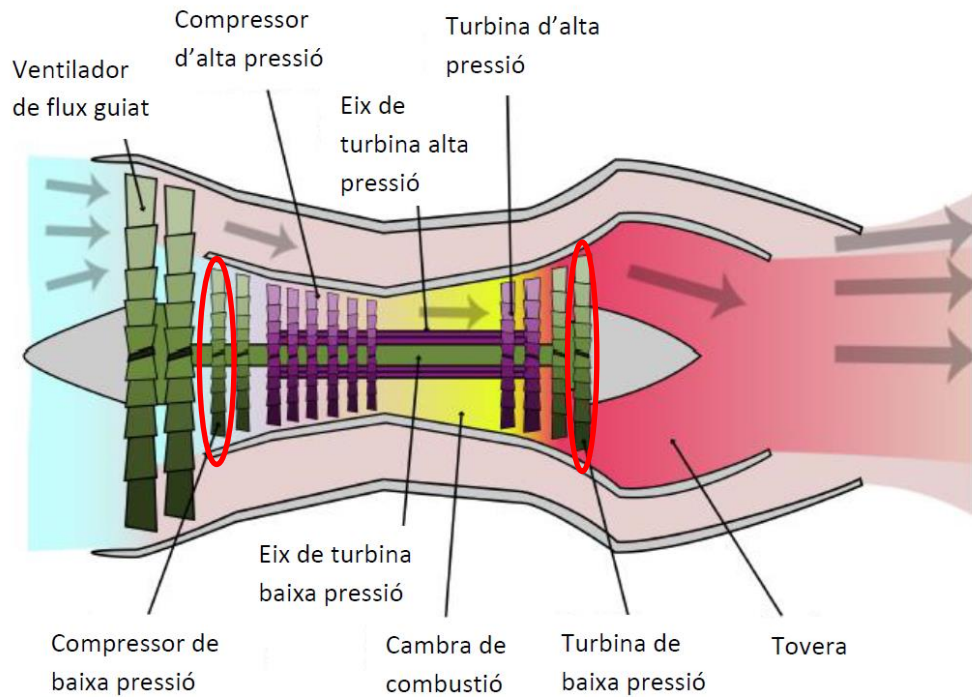


Figura 2: Representació simplificada d'un turboreactor civil de doble cos i doble flux [Ler13]

Una altra aplicació possible d'aquest treball i que és objecte d'una altra càtedra entre l'INSA de Lyon i SKF (líder mundial en el camp dels rodaments mecànics), és la utilització del codi ISAAC per al dimensionament de les carcasses de rodament fabricades amb carburs ja que la presència d'inhomogeneïtats en les immediacions de les zones de contacte del camí de rodament genera greus problemes de sobrepressió, que han de ser resolts en l'etapa de disseny per a evitar ruptures prematures dels rodaments durant el seu funcionament. Seguidament, s'adjunta una imatge que representa el contacte entre una bola i el camí de rodament:

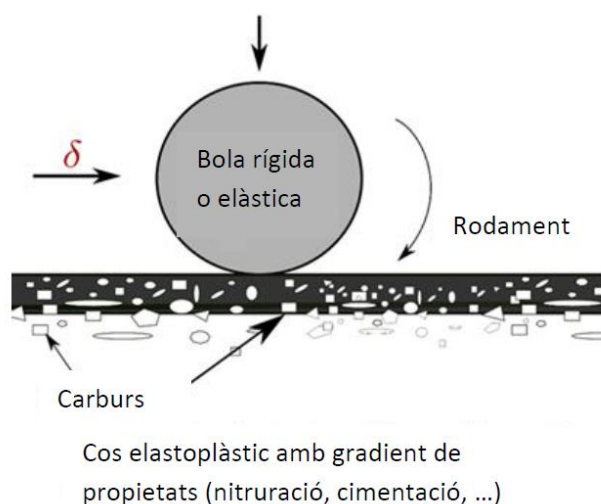


Figura 3: Representació simplificada del contacte entre una bola i el camí de rodament d'un rodament mecànic

### 3.) Antecedents

Per a tenir una bona comprensió del tema tractat, presentarem, en aquesta part del treball, els principals elements de l'estat de l'art: mètodes de resolució dels problemes de contacte, el funcionament del codi de càlcul utilitzat per a aquest treball (codi ISAAC, desenvolupat al LaMCoS), la teoria d'Eshelby per a tractar problemes d'heterogeneïtats i, ulteriorment, els principis del canvi d'escala seran abordats.

#### 3.1) Mètodes de resolució dels problemes de contacte

##### 3.1.1) Mètodes analítics

En 1882, Hertz realitza el primer anàlisi satisfactori de les tensions existents en el contacte entre dos sòlids elàstics. La seua teoria ha resistit el pas del temps i és utilitzada encara en l'actualitat. La teoria d'Hertz proporciona així un primer marc de referència per al tractament de problemes de mecànica de contactes.

Per al càlcul de deformacions locals, introdueix la simplificació que cada cos en contacte pot ser considerat com un semiespai elàstic carregat sobre una xicoteta regió el·líptica de la seua superfície plana. Llavors, perquè aquesta hipòtesi siga justificable, cal que les dimensions de l'àrea de contacte siguen petites en comparació amb les dimensions de cada cos i amb els radis de curvatura de les superfícies. La primera condició és necessària per a assegurar que el camp de tensions calculat sobre un sòlid que és infinit en extensió no es troba fortament influenciat per la proximitat de les fronteres de la zona que experimenta tensions elevades. La segona condició és necessària, en primer lloc, per a assegurar que les superfícies que es troben fora de la zona de contacte s'aproximen a la superfície plana del semiespai i, en segon lloc, també perquè les deformacions en la zona de contacte siguen prou petites per a romandre en el marc de la teoria de l'elasticitat lineal (HPP: hipòtesi de petites pertorbacions).

En resum, les hipòtesis de la teoria d'Hertz són les següents:

- 1) Les superfícies de contacte són contínues i no conformes (és a dir, es toquen en un punt o en una línia).
- 2) Les deformacions són petites.
- 3) Cada sòlid pot ser considerat com un semiespai elàstic.
- 4) No existeix fregament entre les superfícies de contacte.

Els paràmetres del model de contacte d'Hertz estan representats en la Figura 4 on la variable "a" representa el radi de contacte,  $\delta_i$  representa l'aproximació de sòlid rígid del cos "i" i  $\bar{u}_{zi}$  representa els desplaçaments elàstics entre el perfil no deformat del sòlid "i" i el pla de contacte x-y.  $S_1(x, y, z_1)$  i  $S_2(x, y, z_2)$  representen els punts de les superfícies que corresponen als sòlids 1 i 2 respectivament. Els perfils traçats amb línia discontinua són aquells que obtindríem si els sòlids no es deformaren (interpenetració de la matèria).



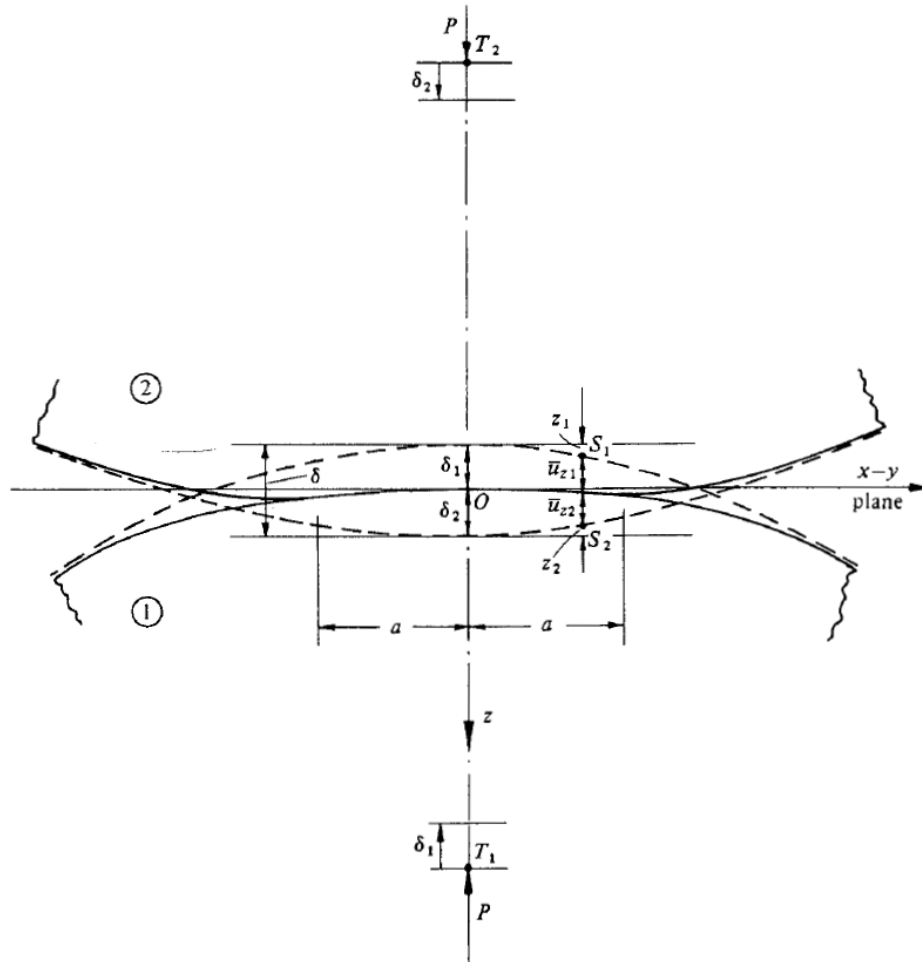


Figura 4: Representació del model de contacte d'Hertz [Joh85]

Sabent que  $\delta = \delta_1 + \delta_2$  i que la variable "h" representa la separació entre els sòlids en contacte ( $h = z_1 - z_2$ ), les condicions de contacte poden doncs estar expressades com segueix:

$$\text{Condicció de contacte : } \bar{u}_{z1} + \bar{u}_{z2} = \delta - h \quad (1)$$

$$\text{Condicció de no-contacte : } \bar{u}_{z1} + \bar{u}_{z2} > \delta - h \quad (2)$$

Com podem adonar-nos-en, encara que la teoria d'Hertz constitueix la base de la mecànica de contactes, està prou limitada per a tractar d'abordar amb ella problemes reals de contacte a causa de la gran quantitat d'hipòtesis fortes que presenta. Encara que altres científics com Coulomb, Cattaneo o Mindlin han aportat també contribucions al domini de la mecànica de contactes, aquestes resulten limitades per a analitzar fenòmens de contacte que es manifesten en sectors com l'aeronàutica, etc. Per això, actualment, es consideren altres mètodes per a la resolució de problemes complexos de mecànica de contacte.

El llibre de Johnson [Joh85] és una de les obres de referència de la mecànica de contactes que recull la major part d'aquestes solucions analítiques.

### 3.1.2) Mètodes numèrics

La modelització numèrica en mecànica que presenta un ús més estès actualment és el Mètode dels Elements Finitos. La quantitat de fenòmens que poden ser descrits amb aquest mètode és prou gran (dinàmica, tèrmica, plasticitat, mecànica de la fractura, camps magnètics, etc.) i existeix també una gran quantitat de literatura sobre la resolució de problemes de contacte per mitjà dels elements finits. Una obra de referència pot ser el llibre de Wriggers [Wri06].

No obstant això, els temps de càlcul d'aquest mètode són importants i això especialment en aquest camp de la mecànica perquè des que hi haurà gradients de tensió importants en les zones pròximes al contacte, s'haurà d'afinar el mallatge considerablement.

Encara que existeixen també altres mètodes numèrics interessants que permeten mallar solament la frontera de la estructura (BEM, Boundary Element Method), en el marc d'aquest treball ens concentrarem exclusivament en els mètodes semianalítics.

### 3.1.3) Mètodes semianalítics

Quan les solucions analítiques són difícils d'obtenir, és possible discretitzar el problema i resoldre'l sumant numèricament solucions analítiques de problemes elementals com les solucions de Boussinesq [Bou85]. Aquest tipus de model s'anomena mètode "semianalític" i es troba en diversos dominis de la mecànica. Les tècniques numèriques utilitzades pels diferents autors varien considerablement segons el tipus de problema resolt. Alguns han proposat utilitzar l'algoritme de Newton-Raphson per a la resolució del problema estudiat mentre que altres han preferit l'algoritme de Gauss-Seidel. Aquests mètodes han sigut posteriorment millorats amb la utilització de tècniques d'acceleració del càlcul com els mètodes Multigrid o les transformades de Fourier ràpides (FFT) i algoritmes eficaços com el del gradient conjugat. Els mètodes semianalítics permeten doncs discretitzacions molt fines, la qual cosa els fa imprescindibles per a tractar contactes rugosos. Els mètodes semianalítics són també aplicables a problemàtiques variades com la plasticitat, el desgast dels contactes mecànics o també entre materials heterogenis i anisòtrops.

### 3.2) Codi de càlcul de contactes: ISAAC

ISAAC és el nom que rep el codi de càlcul que ha sigut desenvolupat a partir de 2001 al laboratori LaMCoS (Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Structures) de l'INSA de Lyon gràcies al treball de diferents doctorands que s'han succeït. El codi ha sigut desenvolupat des de llavors i aplicat amb èxit a problemàtiques:

- de contactes termoelastoplàstics
- de plasticitat i acumulació de deformació plàstica en mecànica del contacte
- de rodament elastoplàstic
- de desgast de contactes mecànics
- de contacte entre materials anisòtrops
- de contacte entre materials heterogenis
- de granallatge
- de consideració d'efectes dinàmics en la resolució del contacte
- de consideració de contactes viscoelàstics heterogenis, de rodament viscoelàstic sobre sòlids homogeni / heterogenis
- de contacte fretting en presència d'un sòlid viscoelàstic

El conveni utilitzat per al sistema d'eixos del problema de contacte en el codi és el representat en la Figura 5. El cos 1 serà anomenat també a partir d'ara com "indentador" i el cos 2 "indentat".

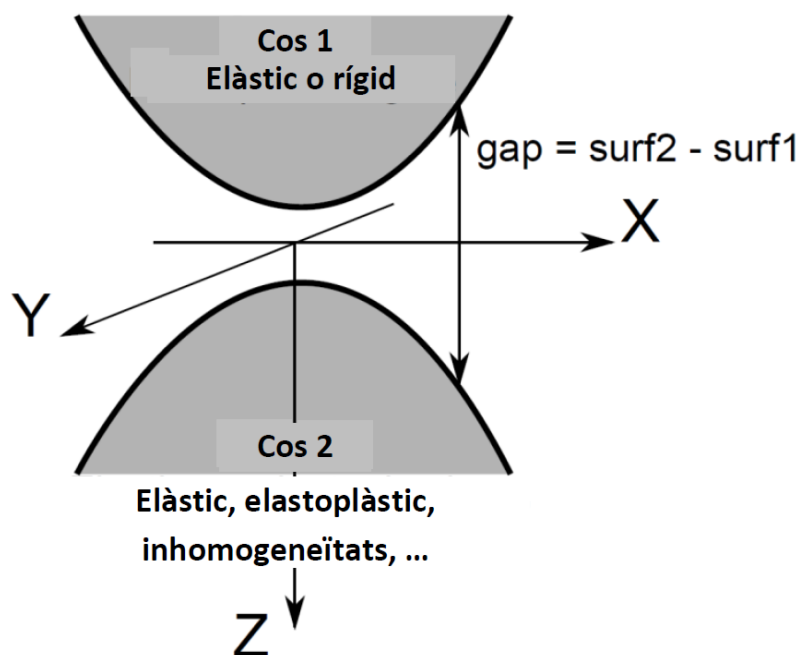


Figura 5: Conveni utilitzat per al sistema d'eixos

### 3.2.1) Algorisme de contacte

El funcionament global del codi de càlcul està representat en l'organigrama de la Figura 6. El codi presenta una diversitat de mòduls de càlcul que depenen d'un algorisme principal de resolució i que permeten tractar casos d'estudi un poc més particulars com el desgast de contacte, les heterogeneïtats i els fenòmens d'impacte.

Primerament el codi ha de ser inicialitzat. Per a fer-ho, s'han de definir les geometries dels dos cossos en contacte així com les propietats materials associades a cadascun. Només un d'aquests cossos en contacte pot ser considerat elastoplàstic i contenir heterogeneïtats. Igualment, es poden considerar deformacions o tensions inicials com dades d'entrada del càlcul. El trajecte de càrrega també ha d'estar definit: forces de contacte o desplaçament del sòlid rígid, la zona de rodament i la càrrega corresponent si ens trobem en un cas de càrrega rodant, etc.

La pròxima etapa consisteix a resoldre el problema de contacte pilotat en força o en desplaçament. El mètode del gradient conjugat (CGM) és utilitzat per tal de resoldre el problema de contacte. Si es consideren els efectes tangencials, s'han de resoldre el problema de contacte normal i tangencial alternativament (un d'aquests problemes és mantingut constant mentre es resol l'altre) fins que els dos problemes convergisquen. En aquest estadi del càlcul, les pressions de contacte així com els desplaçaments i els cisallaments imposats a la superfície ja han sigut determinats.

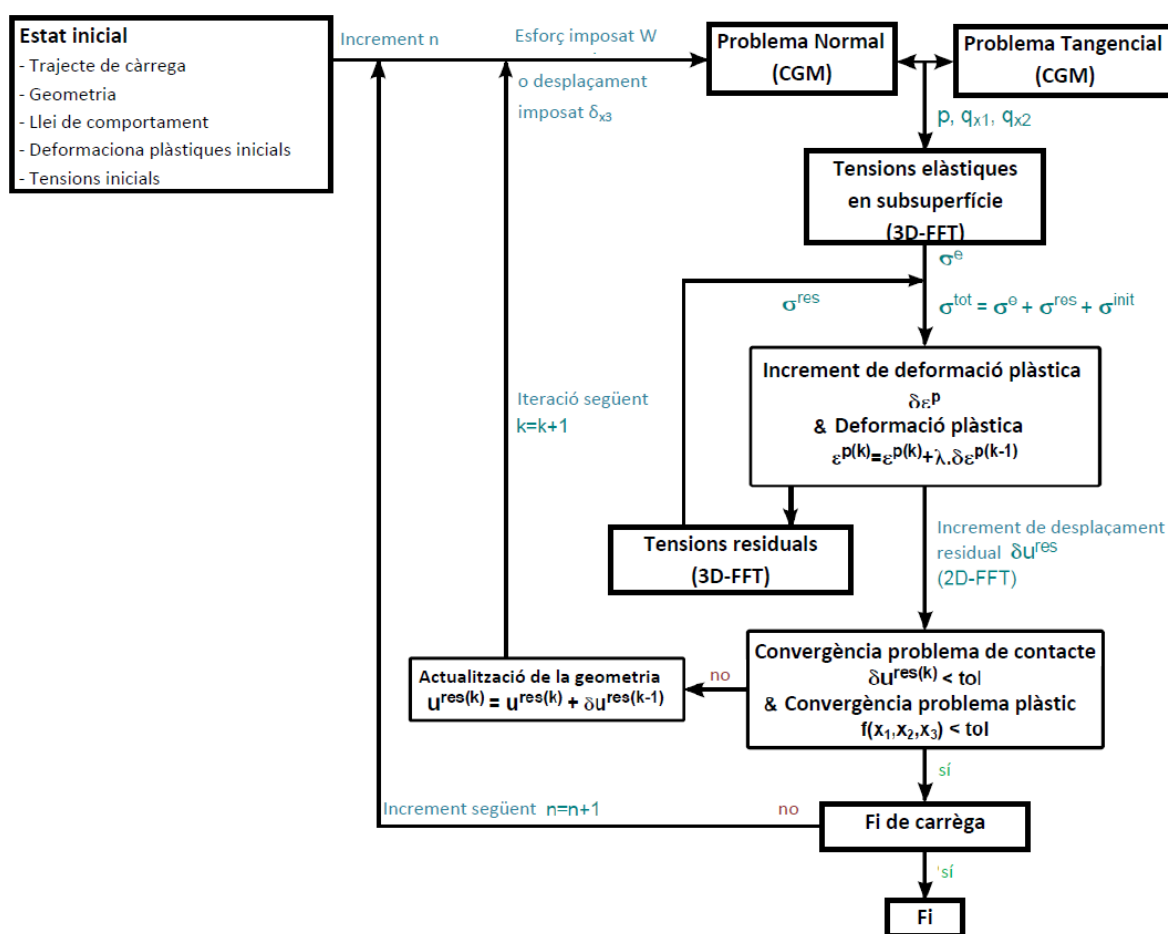


Figura 6: Algorisme general del model de contacte semianalític elastoplàstic

A partir dels camps de pressió i de cisallament determinats precedentment, es poden calcular les tensions tridimensionals elàstiques a partir de les solucions analítiques elementals. Aplicant el teorema de superposició (ja que la modelització està realitzada en el marc de les petites pertorbacions), la tensió total en el cos indentat<sup>1</sup> val:

$$\underline{\underline{\sigma}}^{\text{tot}}(\underline{x}) = \underline{\underline{\sigma}}^e(\underline{x}) + \underline{\underline{\sigma}}^{\text{res}}(\underline{x}) + \underline{\underline{\sigma}}^{\text{init}}(\underline{x}) \quad (3)$$

on  $\underline{\underline{\sigma}}^{\text{tot}}(\underline{x})$  és la tensió total en el cos indentat

$\underline{\underline{\sigma}}^e(\underline{x})$  representa la tensió elàstica conseqüència de la càrrega aplicada sobre el cos indentat

$\underline{\underline{\sigma}}^{\text{res}}(\underline{x})$  representa la tensió residual a causa de la presència de fenòmens com la plasticitat residual

$\underline{\underline{\sigma}}^{\text{init}}(\underline{x})$  representa les tensions inicials generades per les deformacions inelàstiques que provenen de les inclusions heterogènies

Tres magnituds mecàniques necessiten una resolució numèrica conseqüent en cost de càlcul: els desplaçaments de la superfície, les tensions i les deformacions en el volum del sòlid.

**Deformacions plàstiques.** Es determinen per a cada element de discretització utilitzant l'algoritme de "return mapping".

**Desplaçaments de la superfície.** Els desplaçaments elàstics presents en la superfície del sòlid són calculats a partir de les pressions i cisallaments superficials. Els desplaçaments residuals són calculats a partir de les deformacions plàstiques.

**Tensions en el volum del sòlid.** Les tensions elàstiques en el volum són calculades a partir de les pressions i cisallaments superficials. Les tensions residuals en el volum són calculades a partir de les deformacions plàstiques.

---

<sup>1</sup> El cos indentat és aquell que pateix la penetració d'un altre cos.

En canvi, el cos indentador és aquell que exerceix la pressió (o el que penetra) el cos indentat.

### 3.3) Mètode DC-FFT

L'objectiu dels càlculs és de resoldre el problema de Neumann, és a dir, determinar l'estat de deformació i tensió (estat elàstic) del semiespai sotmés a l'acció de les tensions normals  $p(x_1, x_2)$  i tangencials  $q_1(x_1, x_2)$  i  $q_2(x_1, x_2)$  aplicades sobre una superfície tancada  $S$  pròxima a l'origen. La teoria dels potencials de Boussinesq [Bou85] ha sigut utilitzada per a determinar els camps de tensió i deformació d'aquest semiespai elàstic. Aquest plantejament ha sigut représ per Love [Lov20] i resumit per Johnson [Joh85] posteriorment. El cas d'estudi que ens interessa és el d'una superfície rectangular sotmesa a una càrrega normal i tangencial. Aquestes solucions elementals són calculades mitjançant les funcions de Green (també conegudes com coeficients d'influència).

Per a poder resoldre un problema de contacte numèricament, una discretització del problema és necessària. La superfície està definida per una quadrícula de punts de grandària  $N_p = N_1 \cdot N_2$  on cada punt està espaiat d'una distància  $\Delta_1$  en  $x_1$  i  $\Delta_2$  en  $x_2$ . La utilització de la transformada de Fourier discreta obligarà, d'ara endavant, a mantenir un pas de discretització espacial constant. La discretització segons la profunditat  $x_3$  s'afegeix per a poder determinar les tensions en el volum.

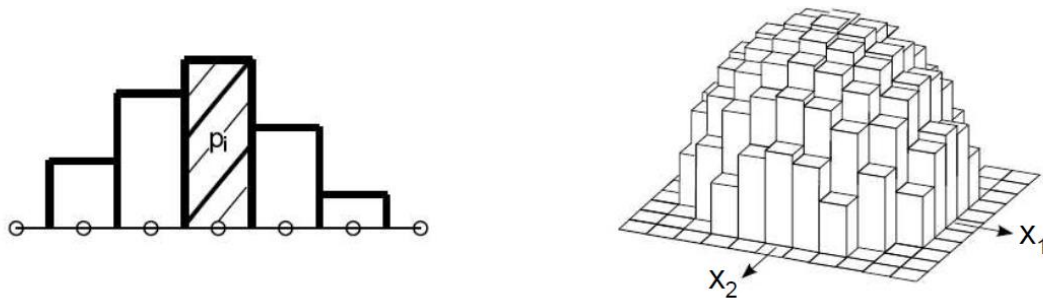


Figura 7: Càrrega discretitzada uniformement en  $N_p$  superfícies rectangulars elementals

La teoria de l'elasticitat lineal permet realitzar la superposició de cada solució elemental. D'aquesta manera, es poden obtenir les expressions dels desplaçaments elàstics a la superfície a partir d'un doble sumatori:

$$u_1(i, j) = \sum_{k=1}^{N_1} \sum_{l=1}^{N_2} K_{x_1}^p(i-j, k-1) \cdot p(k, l) + \sum_{k=1}^{N_1} \sum_{l=1}^{N_2} K_{x_1}^{q_1}(i-j, k-1) \cdot q_1(k, l) + \sum_{k=1}^{N_1} \sum_{l=1}^{N_2} K_{x_1}^{q_2}(i-j, k-1) \cdot q_2(k, l) \quad (4)$$

$$u_2(i, j) = \sum_{k=1}^{N_1} \sum_{l=1}^{N_2} K_{x_1}^p(i-j, k-1) \cdot p(k, l) + \sum_{k=1}^{N_1} \sum_{l=1}^{N_2} K_{x_1}^{q_1}(i-j, k-1) \cdot q_1(k, l) + \sum_{k=1}^{N_1} \sum_{l=1}^{N_2} K_{x_1}^{q_2}(i-j, k-1) \cdot q_2(k, l) \quad (5)$$

$$\begin{aligned}
u_3(i, j) = & \sum_{k=1}^{N_1} \sum_{l=1}^{N_2} \sum_{x_1}^p K(i-j, k-1) \cdot p(k, l) + \sum_{k=1}^{N_1} \sum_{l=1}^{N_2} \sum_{x_1}^{q_1} K(i-j, k-1) \cdot q_1(k, l) + \\
& + \sum_{k=1}^{N_1} \sum_{l=1}^{N_2} \sum_{x_1}^{q_2} K(i-j, k-1) \cdot q_2(k, l)
\end{aligned}
\tag{6}$$

Els índexs  $(i, j)$  designen les coordenades espacials dels punts i les matrius  $K$  representen els coeficients d'influència, que depenen de les propietats materials dels dos sòlids en contacte i de la distància relativa entre el punt de càlcul del desplaçament i el punt d'aplicació de la càrrega.

Els desplaçaments de la superfície i les tensions en el volum del sòlid poden expressar-se llavors amb productes de convolució discrets entre els coeficients d'influència i la sol·licitació excitadora en la superfície o el volum del sòlid. L'escriptura pot fer-se de manera matricial o indicial amb dobles sumatoris (per als desplaçaments de la superfície) i triples sumatoris (per a les tensions en el volum). La grandària de la matriu pot ser prou conseqüent. Si la grandària de la zona de càlcul és  $N$ , el nombre d'operacions a efectuar per a un dels dobles sumatoris és  $O(N^2)$ . El temps de càlcul pot ser, per tant, considerable. Convé emprar tècniques d'acceleració de càlcul. Un mètode, iniciat per Ju i Farris [Ju96], es basa en la utilització de la transformada ràpida de Fourier (FFT). Aquest algorisme permet efectuar la transformada de Fourier (FT) en  $O(N \cdot \log N)$  en comptes de  $O(N^2)$  operacions. Aleshores, resulta interessant utilitzar el teorema de convolució per tal d'efectuar una convolució en el domini freqüencial, la qual cosa té un cost de càlcul de l'ordre  $O(N)$  operacions en comptes de  $O(N^2)$  en el domini inicial (temporal o espacial). Finalment, caldran  $O(N + 3 \cdot N \cdot \log N)$  operacions en comptes de  $O(N^2)$  i açò resulta molt avantatjós per a un  $N$  important.

Quan es va introduir aquest mètode en els càlculs de contacte, es va constatar un error en el resultat si la grandària de la zona de càlcul no era almenys igual a cinc vegades la grandària de la zona de contacte [Ju96] o fins i tot huit vegades. No obstant això, es va identificar l'origen dels errors posteriorment: en els problemes de contacte, les funcions a convolucionar no són periòdiques. Per a resoldre aquest problema, Liu et al. [Liu00] van introduir una metodologia basada en les DC-FFT (Discrete Convolution and Fast Fourier Transform), que fa ús de les tècniques de "zero-padding" i de "wrap-around order".

Si ens interessem a càlculs tridimensionals, la tècnica a emprar és la 3D-FFT, que consisteix a utilitzar la transformada de Fourier ràpida segons les tres direccions  $x_1, x_2, x_3$ . Com que aquesta tècnica executa 3 transformades directes, el nombre d'operacions necessàries és  $O(3 \cdot 2N_1 \cdot 2N_2 \cdot 2N_3 \cdot \log(2N_1 \cdot 2N_2 \cdot 2N_3))$ .

### 3.3.1) Zero-padding

Aquesta tècnica consisteix en augmentar la grandària de les mostres de la magnitud física discretitzada a convolucionar (també anomenada “origen de la sol·licitació”) però no els coeficients d’influència. La grandària d’aquestes mostres està definida de 0 a N-1 i s’incrementa de N a 2N + 1 amb zeros. [Pre92]

### 3.3.2) Wrap-around order

Els coeficients d’influència (en els quals no s’aplica el zero-padding) estan definits de 0 a N-1. La tècnica de wrap-around order fixa el coeficient d’índex N igual a zero i els coeficients de N+1 a 2N-1 són obtinguts a partir dels coeficients 1 a N-1 però ordenats en sentit contrari. Un signe negatiu pot ser afegit eventualment a aquests últims coeficients segons la paritat de la funció dels coeficients d’influència.

Es poden trobar més detalls en els treballs de Liu [Liu00] i Gallego [Gal07]

## 3.4) Resolució del contacte

La resolució del contacte està dividida en dues etapes: el contacte normal i el contacte tangencial. Quan els materials dels sòlids en contacte són diferents, s’han d’acoblar les resolucions del problema normal i del problema tangencial per a estar en disposició de tenir en compte les interaccions introduïdes pels cisallaments i les pressions de contacte.

El problema de contacte pot ser pilotat en força o en desplaçament de sòlid rígid.

### 3.4.1) Problema normal

Per a un problema pilotat en força, la força normal W és coneguda. El domini d’estudi  $\Gamma_p$  ha de ser més gran que la zona real de contacte  $\Gamma_c$ , que de moment continua sent una incògnita.

El sistema d’equacions i d’inequacions que defineix el problema de contacte és el següent:

$$p(x_1, x_2) > 0 \quad \forall (x_1, x_2) \in \Gamma_c \quad (7)$$

$$h(x_1, x_2) + \bar{u}_z^{\text{tot}}(x_1, x_2) - \delta_3 = 0 \quad \forall (x_1, x_2) \in \Gamma_c \quad (8)$$

$$p(x_1, x_2) = 0 \quad \forall (x_1, x_2) \ni \Gamma_c \quad (9)$$

$$h(x_1, x_2) + \bar{u}_z^{\text{tot}}(x_1, x_2) - \delta_3 > 0 \quad \forall (x_1, x_2) \ni \Gamma_c \quad (10)$$

$$\sum_{\Gamma_p} p(x_1, x_2) \cdot S = W \quad (11)$$

On  $\bar{u}_z^{\text{tot}}(x_1, x_2)$  representa el desplaçament total dels dos sòlids al punt (i, j) de la superfície de contacte que comprén l’efecte de la pressió, cisallaments i deformacions inelàstiques.



$h(x_1, x_2)$  representa la separació entre els perfils dels sòlids en contacte i  $\delta_3$  representa l'aproximació del sòlid rígid en la direcció vertical (indicada ací amb l'índex "3").

### 3.4.2) Problema tangencial

Si els desplaçaments tangencials  $u_r$  són no nuls (és a dir, un dels components  $u_1$  i  $u_2$  és no nul), s'ha de resoldre el problema tangencial. Per a un problema pilotat en força, es coneix la càrrega tangencial  $Q_r$  així com el domini de contacte  $\Gamma_c$  determinat a partir de la resolució del problema normal. El sistema d'equacions i d'inequacions a resoldre tradueix les condicions de contacte de stick-slip. Els cisallaments s'expressen a través d'una llei de Coulomb.

$$q_r(x_1, x_2) = -\mu \cdot p(x_1, x_2) \cdot \frac{\Delta s_r(x_1, x_2)}{\|\Delta s_r(x_1, x_2)\|} \quad \forall (x_1, x_2) \in \Gamma_{sl} \quad (12)$$

$$\Delta u_r^{\text{tot}}(x_1, x_2) - \Delta \delta_r = \Delta s_r(x_1, x_2) \quad \forall (x_1, x_2) \in \Gamma_{sl} \quad (13)$$

$$\|q_r(x_1, x_2)\| < \mu \cdot p(x_1, x_2) \quad \forall (x_1, x_2) \in \Gamma_{st} \quad (14)$$

$$\Delta u_r^{\text{tot}}(x_1, x_2) - \Delta \delta_r = 0 \quad \forall (x_1, x_2) \in \Gamma_{st} \quad (15)$$

$$\sum_{\Gamma_p} q(x_1, x_2) \cdot S = Q_r \quad (16)$$

$$\Gamma_{sl} \cup \Gamma_{st} = \Gamma_c \quad (17)$$

El domini  $\Gamma_{st}$  defineix la zona d'adherència ("stick") i  $\Gamma_{sl}$  la zona anular de lliscament ("slip"). La variable  $q_r$  és un component del camp de cisallament  $q$ ,  $q_1$  o  $q_2$ ,  $\delta_r$  un dels components tangencials del desplaçament de sòlid rígid,  $\delta_1$  o  $\delta_2$ ,  $s_r$  un dels components del lliscament,  $s_1$  o  $s_2$ . Els desplaçaments de la superfície  $u_r^{\text{tot}}$  són la resultant dels desplaçaments elàstics generats pel camp de cisallament i pressió, i dels desplaçaments residuals generats per les deformacions inelàstiques en el volum.

### 3.4.3) Acoblament del problema normal i tangencial

S'utilitza un primer mètode iteratiu per a resoldre el problema de contacte. Es resolen els problemes normal i tangencial un després de l'altre:

- 1.) Es resol el problema normal sense prendre en compte els cisallaments de la superfície. Es determinen l'àrea de contacte  $\Gamma_c$  i el camp de pressió  $p$ .
- 2.) Seguidament, es resol el problema tangencial considerant el camp de pressió  $p$  determinat en l'etapa precedent. Es determinen els cisallaments de la superfície  $q_1$  i  $q_2$ , els lliscaments  $s_1$  i  $s_2$  així com la zona de lliscament  $\Gamma_{sl}$  i d'adherència  $\Gamma_{st}$ .

- 3.) Si els cisallaments són no nuls, es resol una altra vegada el problema normal considerant els cisallaments a la superfície  $q_1$  i  $q_2$ .

Es repeteix aquest bucle iteratiu fins que les solucions del problema normal i tangencial convergisquen (procés de Panagiatopoulos [Pan75]). Com a recordatori, aquest acoblament entre el problema normal i tangencial només és necessari quan les propietats elàstiques dels dos materials en contacte són diferents.

#### 3.4.4) Algoritme del gradient conjugat (CGM)

Per a la resolució del problema de contacte, l'algoritme retingut és el del gradient conjugat, proposat inicialment per Hestenes i Stiefel [Hes80]. Aquest algoritme serà utilitzat també per a la resolució del problema d'heterogeneïtat. Es tracta d'un mètode iteratiu per a resoldre problemes lineals:

$$A \cdot x = b \quad (18)$$

On  $A$  és una matriu quadrada simètrica i definida positiva. Aquest problema és doncs equivalent a la minimització de la forma quadràtica:

$$\phi(x) = \frac{1}{2} \cdot x^T \cdot A \cdot x - b^T \cdot x \quad (19)$$

El gradient conjugat pot ser interpretat com un algoritme per a resoldre sistemes lineals, o una tècnica de minimització de formes quadràtiques convexes. El gradient de  $\phi$  és el residu del sistema lineal:

$$\nabla\phi(x) = A \cdot x - b \equiv r(x) \quad (20)$$

El mètode és iteratiu i la solució és obtinguda a partir dels vectors de direcció de descens  $p_k$ ,

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k \cdot p_k \quad (21)$$

El gradient conjugat resulta un algoritme eficaç en termes de temps de càlcul però també en guany de memòria en comparació a altres mètodes. A cada iteració, una combinació lineal entre la direcció precedent  $p_{k-1}$  i la direcció de descens més directa  $-\nabla\phi(x_k) = -r(x_k) \equiv -r_k$  defineix la nova direcció de descens:

$$p_k = -r_k + \beta_k \cdot p_{k-1} \quad (22)$$

On  $\beta_k$  és escollit per a poder verificar la propietat de conjugació,  $p_{k-1}^T \cdot A \cdot p_k = 0$ . Finalment, l'algoritme és el següent:

Elecció d'un valor inicial  $x_0$ ;

Inicialització de les variables:  $r_0 \leftarrow A \cdot x_0$ ,  $p_0 \leftarrow -r_0$ ,  $k = 0$ ;

**while**  $r_k \neq 0$

$$\alpha_k \leftarrow \frac{r_k^T \cdot r_k}{p_k^T \cdot A \cdot p_k}; \quad (23)$$

$$x_{k+1} \leftarrow x_{k+1} + \alpha_k \cdot p_k; \quad (24)$$

$$r_{k+1} \leftarrow r_{k+1} + \alpha_k \cdot A \cdot p_k; \quad (25)$$

$$\beta_{k+1} \leftarrow \frac{r_{k+1}^T \cdot r_{k+1}}{r_k^T \cdot r_k}; \quad (26)$$

$$p_{k+1} \leftarrow -r_{k+1} + \beta_{k+1} \cdot p_k; \quad (27)$$

$$k \leftarrow k + 1; \quad (28)$$

**end while**

Es pot adaptar l'algoritme del gradient conjugat per a tractar també problemes d'optimització amb restriccions.

### 3.5) Heterogeneïtats

Els medis heterogenis es caracteritzen per presentar una combinació de diferents tipus d'inhomogeneïtats o fases. A partir d'ara, anomenarem "inhomogeneïtat" al domini de l'espai que posseeix característiques materials diferents de les del material la presència del qual és majoritària. Aquest material majoritari rebrà el nom de "material matriu" ja que envolta, en la major part dels casos, el domini espacial de les esmentades inhomogeneïtats.

L'interés per l'estudi d'aquest tipus de material resideix en el fet que la presència d'heterogeneïtats altera considerablement les propietats físiques i mecàniques del material a l'escala local i global. Més precisament, en la disciplina de la mecànica, les inhomogeneïtats contribueixen a l'aparició de fenòmens de sobretensió al voltant dels seus dominis espacials a causa de les deformacions d'incompatibilitat que existeixen entre les inhomogeneïtats i el material que l'envolta (la matriu). Eshelby va estudiar les variacions de tensions generades per inhomogeneïtats el·lipsoïdals en un sòlid infinit i és el seu Mètode d'Inclusió Equivalent (EIM, Equivalent Inclusion Method) en què ens basarem a partir d'ara per a tractar aquests problemes d'inhomogeneïtats.

No obstant això, molts dels desenvolupaments aplicats als problemes d'heterogeneïtats estan basats sobre una gran quantitat d'hipòtesis generalment incompatibles per a l'estudi

de contactes tridimensionals [Ler13]. Una modelització precisa d'un contacte entre dos sòlids elàstics ha de descriure el comportament de les heterogeneïtats en un sòlid semiinfinit amb formulacions analítiques per a sòlids infinits. S'han retingut tres possibilitats pels successius programadors del codi ISAAC. La primera consisteix en utilitzar un mètode de descomposició del semiespai en subespais infinits que necessita una resolució numèrica [Zho09]. La segona està basada en la determinació numèrica dels camps de tensió normal i tangencial per a sostraure'ls seguidament a l'estat de tensió provocat per la inclusió en una formulació infinita i determinar així el camp de tensió induït per les inhomogeneïtats en el semiespai del problema de contacte. La tercera és un mètode directe dit de Galerkin [Liu05, Liu12], inicialment proposat per Mindlin i Cheng [Min50], que permet determinar analíticament la solució del camp elàstic causada per una deformació d'incompatibilitat en un sòlid semiinfinit elàstic.

A part d'aquesta problemàtica, la coexistència de diverses inhomogeneïtats en la zona inferior de la superfície del material indentat obliga a tenir en compte les interaccions entre les diferents inhomogeneïtats per a ser capaços d'estimar la contribució de totes elles sobre el fenomen de sobretensió que es manifesta als seus voltants. Dues possibilitats han sigut considerades pels diferents desenvolupadors del codi ISAAC. La primera consisteix en emprar els desenvolupaments analítics de Moschovidis i Mura [Mos75a] expressant els camps elàstics de manera polinomial. El segon mètode considerat es basa en la discretització d'una heterogeneïtat de forma arbitrària en diversos prismes cuboïdals elementals, de grandària corresponent a la de la discretització numèrica del problema (tècnica de voxelització). Les deformacions d'incompatibilitat en cadascun dels prismes cuboïdals es consideren uniformes. Aquests mètodes seran presentats amb més detall a continuació.

### 3.5.1) Teoria d'Eshelby

En la teoria d'Eshelby [Esh06], es presenten dos tipus de problemes per a distingir entre una "inclusió" i una "heterogeneïtat" però els dos fan al·lusió a la teoria de l'elasticitat lineal.

Una "heterogeneïtat" és una regió inhomogènia de domini  $\Omega$  de l'espai que té propietats materials diferents de les del medi que les envolta (matriu). Per exemple, una cavitat tindrà constants d'elasticitat nul·les. Les heterogeneïtats no generen cap deformació en el material si no s'aplica cap càrrega. Per contra, si la matriu està sotmesa a un camp de deformació uniforme a l'infinit, les deformacions induïdes no nul·les seran llavors diferents a l'interior i a l'exterior de l'heterogeneïtat. Aquestes deformacions dites d'incompatibilitat entre la inhomogeneïtat i la matriu reben el nom d'eigenstrain i poden representar les transformacions inelàstiques d'una inhomogeneïtat, poden ser ocasionades pels canvis de fase, per deformacions plàstiques i/o tèrmiques. En canvi, una inclusió és també una regió inhomogènia de domini  $\Omega$  de l'espai però que posseeix les mateixes propietats materials que el material matriu que es troba al voltant.

### Mètode de la inclusió equivalent

Cada heterogeneïtat (o també anomenada “inclusió heterogènia”) pot ser simulada per una inclusió (homogènia) que conté una eigenstrain inicial  $\underline{\varepsilon}^p$  i una eigenstrain equivalent  $\underline{\varepsilon}^*$ . Així el problema d’inclusió heterogènia (Problema A) és equivalent al problema de la inclusió homogènia (Problema B) representada en la Figura 8. L’eigenstrain equivalent representa les diferències de propietats materials entre les heterogeneïtats i la matriu, les interaccions entre les heterogeneïtats, i les seues respostes front a una càrrega externa o eigenstrains inicials  $\underline{\varepsilon}^p$  que contenen les mateixes inhomogeneïtats [Ler13].

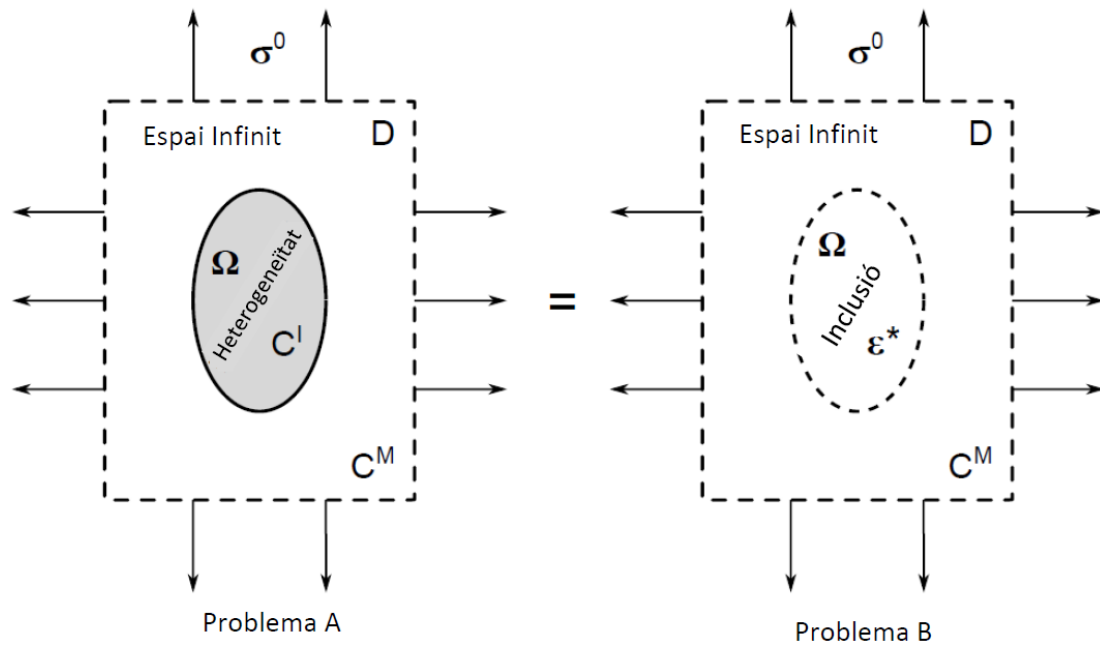


Figura 8: Mètode de la inclusió equivalent [Ler13]

En el cas d'un problema d'heterogeneïtat, la deformació total  $\underline{\varepsilon}$  induïda en un punt de l'interior de la inclusió es descompon de la següent manera:

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}^e + \underline{\underline{\varepsilon}}^p \quad (29)$$

On  $\underline{\underline{\varepsilon}}^e$  representa la deformació elàstica i  $\underline{\underline{\varepsilon}}^p$  representa l'eigenstrain inicial.

Així, a partir de la llei d'Hooke, l'equació següent pot ser obtinguda per a qualsevol punt de l'interior d'una heterogeneïtat amb un tensor material elàstic  $\underline{\underline{C}}^I$ :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}}^I : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^p) \quad (30)$$

En el cas d'un problema d'inclusió equivalent, el camp de tensió a l'interior d'aquesta inclusió ve donada per l'expressió:

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}}^M : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^* - \underline{\underline{\varepsilon}}^p) \quad (31)$$

On  $\underline{\underline{C}}^M$  és el tensor material elàstic de la matriu.

Substituint l'equació (30) en l'equació (31), obtenim l'equació següent:

$$\underline{\underline{C}}^I : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^p) = \underline{\underline{C}}^M : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^* - \underline{\underline{\varepsilon}}^p) \quad (32)$$

Reorganitzant els termes trobem:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^p &= \underline{\underline{C}}^{I^{-1}} : \underline{\underline{C}}^M (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^* - \underline{\underline{\varepsilon}}^p) \rightarrow (\underline{\underline{C}}^{I^{-1}} : \underline{\underline{C}}^M - \underline{\underline{I}}^d) : \underline{\underline{\varepsilon}} - (\underline{\underline{C}}^{I^{-1}} : \underline{\underline{C}}^M - \underline{\underline{I}}^d) : \underline{\underline{\varepsilon}}^p - \\ & - \underline{\underline{C}}^{I^{-1}} : \underline{\underline{C}}^M : \underline{\underline{\varepsilon}}^* = \underline{\underline{0}} \rightarrow (\underline{\underline{C}}^{I^{-1}} : \underline{\underline{C}}^M - \underline{\underline{I}}^d) : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^p) - (\underline{\underline{C}}^{I^{-1}} : \underline{\underline{C}}^M) : \underline{\underline{\varepsilon}}^* = \underline{\underline{0}} \rightarrow \\ (\underline{\underline{C}}^{I^{-1}} : \underline{\underline{C}}^M) : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^* - \underline{\underline{\varepsilon}}^p) - (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^p) &= \underline{\underline{0}} \xrightarrow{(30)} (\underline{\underline{C}}^{I^{-1}} : \underline{\underline{C}}^M) : (\underline{\underline{C}}^{I^{-1}} : \underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^*) = \underline{\underline{C}}^{I^{-1}} : \underline{\underline{\sigma}} \end{aligned}$$

Doncs,

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}}^M : (\underline{\underline{C}}^{I^{-1}} : \underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^*) \quad (33)$$

El camp de tensió  $\sigma$  a l'interior de la inclusió equivalent es descompon en tres parts:

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\sigma}}^0 + \underline{\underline{\sigma}}^p + \underline{\underline{\sigma}}^* \quad (34)$$

On  $\underline{\underline{\sigma}}^0$  representa la tensió aplicada com a conseqüència de la càrrega externa,  $\underline{\underline{\sigma}}^p$  la tensió causada per l'eigenstrain inicial  $\underline{\underline{\varepsilon}}^p$ , i  $\underline{\underline{\sigma}}^*$  la tensió generada per l'eigenstrain equivalent  $\underline{\underline{\varepsilon}}^*$ . Utilitzant l'equació (34), podem reescriure l'expressió (33) com:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}}^0 + \underline{\underline{\sigma}}^p + \underline{\underline{\sigma}}^* &= \underline{\underline{C}}^M : (\underline{\underline{C}}^{I^{-1}} : (\underline{\underline{\sigma}}^0 + \underline{\underline{\sigma}}^p + \underline{\underline{\sigma}}^*) - \underline{\underline{\varepsilon}}^*) \rightarrow \\ \rightarrow \underline{\underline{C}}^I : \underline{\underline{C}}^{M^{-1}} : (\underline{\underline{\sigma}}^0 + \underline{\underline{\sigma}}^p + \underline{\underline{\sigma}}^*) &= (\underline{\underline{\sigma}}^0 + \underline{\underline{\sigma}}^p + \underline{\underline{\sigma}}^*) - \underline{\underline{C}}^I : \underline{\underline{\varepsilon}}^* \rightarrow \end{aligned}$$

Així doncs, obtenim l'expressió següent, que es coneix també amb el nom de "sistema d'equivalència":

$$\left( \underline{\underline{C}}^I : \underline{\underline{C}}^{M^{-1}} - \underline{\underline{I}}^d \right) : \underline{\underline{\sigma}}^* + \underline{\underline{C}}^I : \underline{\underline{\varepsilon}}^* = \left( \underline{\underline{I}}^d - \underline{\underline{C}}^I : \underline{\underline{C}}^{M^{-1}} \right) : (\underline{\underline{\sigma}}^0 + \underline{\underline{\sigma}}^p) \quad (35)$$

On  $\underline{\underline{I}}^d$  és la matriu identitat.

L'equació (35) és necessària i suficient per a resoldre el problema d'inclusió heterogènia amb l'única incògnita de l'eigenstrain equivalent  $\underline{\underline{\varepsilon}}^*$ . No obstant això, no s'han establert les

expressions que relacionen la tensió equivalent  $\underline{\underline{\sigma}}^*$  amb l'eigenstrain equivalent  $\underline{\underline{\varepsilon}}^*$  i la tensió inicial  $\underline{\underline{\sigma}}^p$  amb l'eigenstrain inicial  $\underline{\underline{\varepsilon}}^p$  i, per tant, no es pot resoldre el problema. Per a fer-ho, s'ha d'implementar un mètode numèric per a determinar aquestes relacions.

### 3.5.2 Mètode de resolució. Algorisme d'homogeneïtzació

Per a poder resoldre el problema presentat precedentment, s'ha definit un algorisme d'homogeneïtzació. Aquest mòdul de càlcul pren com variables d'entrada les tensions locals aplicades "a l'infinít"  $\sigma_0$ , les geometries de les inclusions, així com les propietats materials de la matriu i les heterogeneïtats. Com a valors de sortida, aquesta eina de càlcul ens permet d'obtenir els "eigen-displacements" i eigenstrains determinats a l'escala microscòpica al voltant de les inhomogeneïtats.

L'algorisme de resolució del problema és llavors:

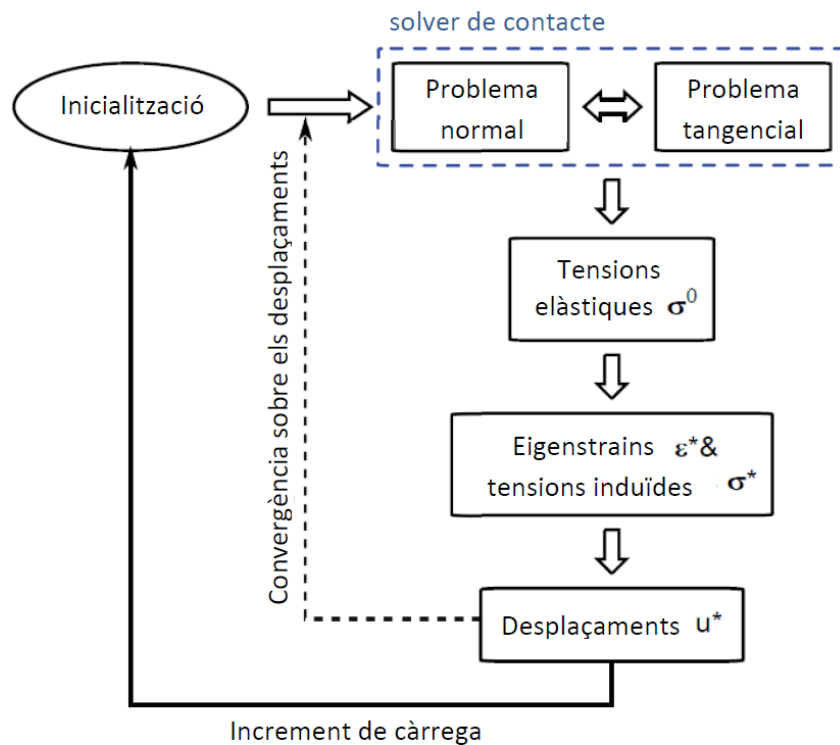


Figura 9: Algorisme general del codi de contacte semianalític per a materials elàstics heterogenis

La resolució del sistema d'equivalència necessita doncs la discretització de l'equació (35), la qual cosa dóna lloc a l'expressió:

$$\left( \mathbf{C}_{\alpha,\beta,\gamma}^I \mathbf{C}^{M^{-1}} - \mathbf{I}^d \right) \sigma_{\alpha,\beta,\gamma}^* + \mathbf{C}_{\alpha,\beta,\gamma}^I \varepsilon_{\alpha,\beta,\gamma}^* = \left( \mathbf{I}^d - \mathbf{C}_{\alpha,\beta,\gamma}^I \mathbf{C}^{M^{-1}} \right) \left( \sigma_{\alpha,\beta,\gamma}^0 + \sigma_{\alpha,\beta,\gamma}^p \right) \quad (36)$$

$$(0 \leq \alpha \leq N_1 - 1, \quad 0 \leq \beta \leq N_2 - 1, \quad 0 \leq \gamma \leq N_3 - 1)$$

Per tal d'evitar problemes de visibilitat amb els índexs, hem decidit eliminar les ratlles que indiquen l'ordre dels tensors en la notació.

El domini geomètric d'estudi  $D$  està discretitzat en aquest cas en  $N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$  elements de la mateixa grandària  $2 \cdot \Delta_1 + 2 \cdot \Delta_2 + 2 \cdot \Delta_3$ , indexats amb una seqüència de tres enters  $[\alpha, \beta, \gamma]$ .

$C_{\alpha, \beta, \gamma}^I$  és el tensor material d'elasticitat de la inclusió heterogènia  $[\alpha, \beta, \gamma]$  centrada en  $(x_1^\alpha, x_2^\beta, x_3^\gamma)$ .

La tensió elàstica en un punt d'observació  $(x_1^\alpha, x_2^\beta, x_3^\gamma)$  de l'element  $[\alpha, \beta, \gamma]$  induïda per cadascuna de les inclusions heterogènies centrades en  $(x_1^\xi, x_2^\zeta, x_3^\varphi)$  de l'element  $[\xi, \zeta, \varphi]$  és obtinguda sumant el conjunt de contribucions de totes les inclusions contingudes en el domini d'estudi  $D$ :

$$\sigma_{\alpha, \beta, \gamma}^* = \sum_{\varphi=0}^{N_3-1} \sum_{\zeta=0}^{N_2-1} \sum_{\xi=0}^{N_1-1} B_{\alpha-\xi, \beta-\zeta, \gamma-\varphi} \varepsilon_{\xi, \zeta, \varphi}^* \quad (37)$$

$$(0 \leq \alpha \leq N_1 - 1, \quad 0 \leq \beta \leq N_2 - 1, \quad 0 \leq \gamma \leq N_3 - 1)$$

On  $B_{\alpha-\xi, \beta-\zeta, \gamma-\varphi}$  són els coeficients d'influència, que només depenen de la geometria de la inclusió i de les propietats materials de la matriu. Per a més detall sobre aquests coeficients cal veure p 65-71, [Ler13].

L'expressió de la tensió induïda per les deformacions plàstiques inicials és anàloga a la precedent:

$$\sigma_{\alpha, \beta, \gamma}^p = \sum_{\varphi=0}^{N_3-1} \sum_{\zeta=0}^{N_2-1} \sum_{\xi=0}^{N_1-1} B_{\alpha-\xi, \beta-\zeta, \gamma-\varphi} \varepsilon_{\xi, \zeta, \varphi}^p \quad (38)$$

$$(0 \leq \alpha \leq N_1 - 1, \quad 0 \leq \beta \leq N_2 - 1, \quad 0 \leq \gamma \leq N_3 - 1)$$

Substituint (37) i (38) en el sistema d'equivalència (36)

$$\left( C_{\alpha, \beta, \gamma}^I C^{M^{-1}} - I^d \right) \sum_{\varphi=0}^{N_3-1} \sum_{\zeta=0}^{N_2-1} \sum_{\xi=0}^{N_1-1} B_{\alpha-\xi, \beta-\zeta, \gamma-\varphi} \varepsilon_{\xi, \zeta, \varphi}^* + C_{\alpha, \beta, \gamma}^I \varepsilon_{\alpha, \beta, \gamma}^* =$$

$$= \left( I^d - C_{\alpha, \beta, \gamma}^I C^{M^{-1}} \right) \left( \sum_{\varphi=0}^{N_3-1} \sum_{\zeta=0}^{N_2-1} \sum_{\xi=0}^{N_1-1} B_{\alpha-\xi, \beta-\zeta, \gamma-\varphi} \varepsilon_{\xi, \zeta, \varphi}^p + \sigma_{\alpha, \beta, \gamma}^0 \right) \quad (39)$$

$$(0 \leq \alpha \leq N_1 - 1, \quad 0 \leq \beta \leq N_2 - 1, \quad 0 \leq \gamma \leq N_3 - 1)$$

L'equació (39) és, per tant, l'equació general necessària i suficient per a resoldre el problema d'inclusions heterogènies. Si el domini d'estudi  $D$  conté  $n$  heterogeneïtats, cal resoldre un sistema de  $6n$  equacions,  $6n$  components d'eigenstrains desconegudes gràcies a la simetria  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$  ( $i, j = 1, 2, 3$ ). Abans de resoldre aquest sistema d'equacions equivalents, cal encara calcular



els sumatoris triples (algoritme 3D-FFT) de les equacions (37) i (38) inserides en l'equació (39), conèixer les solucions analítiques dels coeficients d'influència, i una metodologia per a resoldre'l de manera eficaç. [Ler13]

### 3.5.3) Càlcul de les tensions induïdes per les heterogeneïtats

Com s'ha indicat prèviament, existeixen tres mètodes que permeten determinar les tensions induïdes per les heterogeneïtats en el material indentat. S'abordaran un poc més en detall a continuació.

#### 3.5.3.1) Mètode de Chiu

Aquest mètode es basa sobre formulacions en espai infinit. Per tant, el camp de desplaçament induït "eigendisplacement" per una eigenstrain pot expressar-se a través de la funció de Green  $G_{ij}$  per a un sòlid infinit. La funció  $G_{ij}(x, x')$  representa el  $i$ -èsim component del desplaçament en un punt  $x(x'_1, x'_2, x'_3)$  en la direcció  $x_j$ . Es pot demostrar que una distribució de tipus eigenstrain és equivalent a una distribució de força tal que,

$$f_i^* = -C_{ijkl}^M \varepsilon_{kl,j}^* \quad (40)$$

El camp de desplaçament induït per una força s'escriu com,

$$\begin{aligned} u_i(x) &= \iiint_{-\infty}^{+\infty} G_{ij}(x, x') f_j^*(x') dx' = \\ &= \iiint_{-\infty}^{+\infty} C_{jlmn}^M \frac{\partial}{\partial x'_1} \varepsilon_{mn}^*(x') G_{ij}(x, x') dx' \end{aligned} \quad (41)$$

El camp elàstic generat per una inclusió que conté una eigenstrain uniforme en un espai semiinfinit isòtrop s'obté descomponent el problema en tres subproblemes (veure Figura 10):

1. Una inclusió que conté un eigenstrain  $\varepsilon^* = (\varepsilon_{11}^*, \varepsilon_{22}^*, \varepsilon_{33}^*, \varepsilon_{12}^*, \varepsilon_{13}^*, \varepsilon_{23}^*)^t$  en un espai infinit,
2. Una inclusió espill que conté, en el mateix espai infinit, una eigenstrain de la forma  $\varepsilon^{s*} = (\varepsilon_{11}^*, \varepsilon_{22}^*, \varepsilon_{33}^*, \varepsilon_{12}^*, -\varepsilon_{13}^*, -\varepsilon_{23}^*)^t$ ;
3. Un problema en un semiespai sotmés a una repartició de tensió normal (pressió)  $\sigma^n$ .

La suma de les dues primeres solucions, resoltes per Chiu [Chi77], genera una superfície en  $x_3 = 0$  lliure de tensions tangencials però amb una tensió normal residual. La subtracció de la tercera solució simula aleshores un espai semiinfinit isòtrop. La solució final pot escriure's llavors com:

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij}(x_1, x_2, x_3) = & B_{ijkl}(x_1 - x'_1, x_2 - x'_2, x_3 - x'_3) \varepsilon_{kl}^*(x'_1, x'_2, x'_3) + \\
& + B_{ijkl}(x_1 - x'_1, x_2 - x'_2, x_3 - x'_3) \varepsilon_{kl}^{S*}(x'_1, x'_2, -x'_3) - \\
& - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} T_{ij}(x_1 - x''_1, x_2 - x''_2, x_3) \sigma^n(x''_1, x''_2, 0) dx''_1 dx''_2, \\
& (i, j, k, l = 1, 2, 3)
\end{aligned} \tag{42}$$

Els coeficients d'influència  $B_{ijkl}$  permeten l'obtenció de la tensió elàstica al punt  $(x_1, x_2, x_3)$  causada per una inclusió centrada en  $(x'_1, x'_2, x'_3)$  o  $(x'_1, x'_2, -x'_3)$ . Les funcions  $T_{ij}(\cdot)$  relacionen la tensió elàstica en un punt  $(x_1, x_2, x_3)$  amb la tensió normal  $\sigma^n$  al punt  $(x''_1, x''_2, 0)$ . El detall d'aquestes funcions es troba en l'obra de Johnson [Joh85].

Discretitzant l'equació (42) per a un domini d'estudi  $D$  que conté diverses inhomogeneïtats, trobem l'expressió de la tensió induïda per aquestes:

$$\begin{aligned}
\sigma_{\alpha, \beta, \gamma} = & \sum_{\varphi=0}^{N_3-1} \sum_{\zeta=0}^{N_2-1} \sum_{\xi=0}^{N_1-1} B_{\alpha-\xi, \beta-\zeta, \gamma-\varphi} \varepsilon_{\xi, \zeta, \varphi}^* + \sum_{\varphi=0}^{N_3-1} \sum_{\zeta=0}^{N_2-1} \sum_{\xi=0}^{N_1-1} B_{\alpha-\xi, \beta-\zeta, \gamma-\varphi} \varepsilon_{\xi, \zeta, \varphi}^{S*} - \\
& - \sum_{\zeta=0}^{N_2-1} \sum_{\xi=0}^{N_1-1} M_{\alpha-\xi, \beta-\zeta, \gamma-\varphi} \sigma_{\xi, \zeta}^n
\end{aligned} \tag{43}$$

$$(0 \leq \alpha \leq N_1 - 1, \quad 0 \leq \beta \leq N_2 - 1, \quad 0 \leq \gamma \leq N_3 - 1)$$

On

$$M_{\alpha-\xi, \beta-\zeta, \gamma-\varphi} = \int_{x_1^{\xi-\Delta_1}}^{x_1^{\xi+\Delta_1}} \int_{x_2^{\zeta-\Delta_2}}^{x_2^{\zeta+\Delta_2}} T_{x_1^{\alpha-x_1}, x_2^{\beta-x_2}, x_3^{\gamma}} dx_1 dx_2 \tag{44}$$

$$(0 \leq \alpha, \quad \xi \leq N_1 - 1, \quad 0 \leq \beta, \quad \zeta \leq N_2 - 1, \quad 0 \leq \gamma, \quad \varphi \leq N_3 - 1)$$

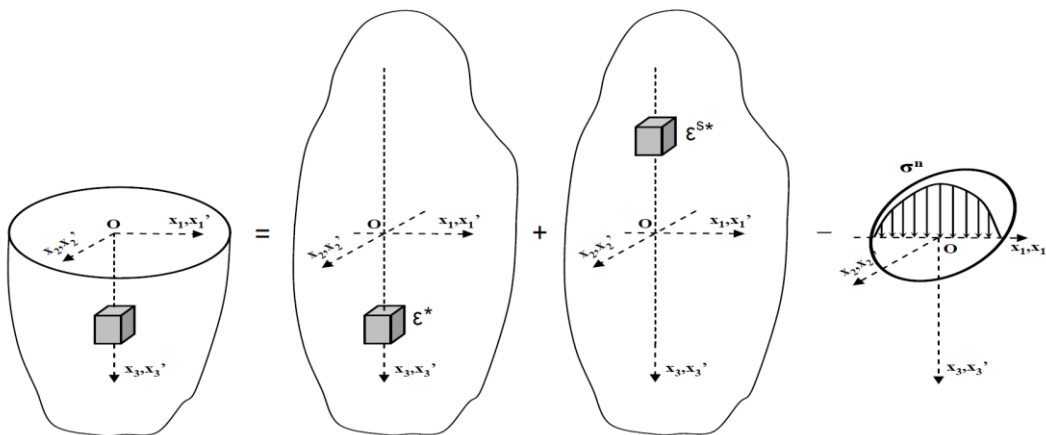


Figura 10: Mètode de Chiu: descomposició en tres subproblemes

### 3.5.3.2) Mètode de Wang

El mètode de Wang proposa el càlcul de la tensió normal i de les tensions tangencials a través de les funcions  $T_{ij}(\cdot)$ , que relacionen la tensió elàstica en un punt  $(x_1, x_2, x_3)$  amb la tensió normal  $\sigma^n$  al punt  $(x''_1, x''_2, 0)$ , i les funcions anàlogues per a les tensions de cisallament. Per tant, una vegada que s'han calculat aquestes magnituds, es poden sostraure a l'estat de

$$\text{tensió } \sigma_{\alpha,\beta,\gamma} = \sum_{\varphi=0}^{N_3-1} \sum_{\zeta=0}^{N_2-1} \sum_{\xi=0}^{N_1-1} B_{\alpha-\xi,\beta-\zeta,\gamma-\varphi} \varepsilon_{\xi,\zeta,\varphi}^* \text{ per a obtenir una superfície en } x_3 = 0$$

lliure de tensions normals i tangencials.

La diferència principal amb el mètode de Chiu és que aquesta última calcula les eigenstrains d'una inhomogeneïtat espill (simètrica a l'original) per a anul·lar les tensions de cisallament mentre que amb el mètode de Wang les tensions són anul·lades numèricament.

### 3.5.3.3) Mètode de Galerkin

Contràriament al mètode de descomposició, les fórmules desenvolupades ací s'inscriuen en el cas de referència d'un sòlid semiinfinit elàstic i isòtrop  $(O x_1 x_2 x_3)$  que conté almenys una inclusió de regió  $\Omega$  sotmesa a una eigenstrain de natura qualsevol  $\varepsilon_{ij}^*$ . Les propietats materials del semiespai venen donades pels coeficients de Lamé  $\lambda_m$  i  $\mu_m$  així com pel coeficient de Poisson  $\nu_m$ . Com a recordatori, el vector  $x$  denota el punt d'observació mentre que el punt  $x'$  denota la font d'excitació. Es notará  $a_{i,j} = \frac{\partial a_i}{\partial x_j}$  la derivada d'una magnitud respecte a un punt d'observació. El camp elàstic  $(u_i, \sigma_{ij})$  generat per una font d'eigenstrains és expressat, en aquest cas, mitjançant els vectors "F" de Galerkin [Yu91].

$$2\mu_m u_i(x) = 2H F_{i,jj} - F_{k,ki} \quad (45)$$

$$\sigma_{ij}(x) = \nu_m F_{k,kmm} \delta_{ij} - F_{k,kij} + H(F_{i,kkj} + F_{j,kki}), \quad x \notin \Omega \quad (46)$$

$$\sigma_{ij}(x) = \nu_m F_{k,kmm} \delta_{ij} - F_{k,kij} + H(F_{i,kkj} + F_{j,kki}) - 2\mu_m \varepsilon_{ij}^* - \lambda_m \varepsilon_{kk}^* \delta_{ij}, \quad x \in \Omega \quad (47)$$

Amb  $H = 1 - \nu_m$

Els vectors de Galerkin es poden expressar també sota la forma d'una integral de volum [Yu91]:

$$F(x) = \frac{\mu_m}{4\pi H} \int_{\Omega} (2\nu_m \varepsilon_{kk}^* g_c - \varepsilon_{jk}^* g_{jk}) dx' \quad (48)$$

On  $g_c$  és el vector de Galerkin associat a una font única de dilatació uniforme en un semiespai, i  $g_{jk}$  és el vector de Galerkin associat a diferents càrregues que generen singularitats, també

anomenades “nuclei of strain” per Mindlin [Min36]. Les expressions dels vectors de Galerkin són diferents per a les diverses fonts de deformació. Es pot trobar el detall sobre aquestes diferents expressions en la tesi [Ler13], p81.

Amb aquests vectors de Galerkin, és possible obtenir una expressió analítica del camp de tensió a l'exterior i a l'interior de la inclusió  $\Omega$  així com del camp de desplaçament a la superfície. Per tant, també és possible estimar la tensió induïda per les inhomogeneïtats gràcies a les formulacions en espai semiinfinit.

### 3.5.4) Influència dels gradients de tensions

En la teoria d'Eshelby, les deformacions inelàstiques (anomenades també eigenstrains) són formulades amb el mètode de la inclusió equivalent de tal manera que aquestes deformacions romanen constants a l'interior de la inhomogeneïtat. Aquesta representació de la realitat física, no obstant això, només és vàlida per a les inclusions heterogènies de feble talla ja que aleshores les deformacions són poc susceptibles de fluctuar a l'interior de la inclusió. En canvi, quan la grandària d'aquestes inhomogeneïtats serà conseqüent, encara que el formalisme d'Eshelby proporcione valors d'eigenstrains constants, sabem que aquests resultats estaran distorsionats respecte de la realitat física del problema. La situació és anàloga quan la inhomogeneïtat està sotmesa a un gradient de tensió provocat, per exemple, per la presència de fenòmens de contacte al voltant de la inclusió o per les influències mútues entre diverses inhomogeneïtats que es troben pròximes entre elles.

Per a pal·liar aquest problema de la formulació clàssica de la teoria d'Eshelby, es poden utilitzar dues tècniques diferents: el desenvolupament de les eigenstrains sota la forma d'expressions polinomials d'ordre superior o la utilització de la tècnica de voxelització.

#### 3.5.4.1) Aproximació polinomial

En el cas d'una inclusió isòtropa que es troba en un sòlid infinit elàstic isòtrop i, a més a més, la inclusió conté eigenstrains que poden escriure's de manera polinomial, l'expressió d'aquestes eigenstrains és:

$$\varepsilon_{ij}^* = E_{ij}^* + E_{ijk}^* x_k + E_{ijkl}^* x_k x_l + \dots \quad (49)$$

on els termes  $E_{ij}^*$ ,  $E_{ijk}^*$ ,  $E_{ijkl}^*$ ,... són constants que respecten les simetries sobre els índexs  $i, j$  i que respecten  $E_{ijkl}^* = E_{ijlk}^*$ ,  $E_{ijklm}^* = E_{ijkml}^*$ , ... Les tesis de Sendeckyj [Sen67] i de Moschovidis [Mos75b] constitueixen les dues grans referències sobre els desenvolupaments de les expressions polinomials per a les inclusions el·lipsoïdals. Normalment l'ordre polinomial que serveix per a descriure l'evolució de les tensions a l'interior de la inhomogeneïtat així com a la interfície inclusió / matriu és l'1 o el 2. La realització de desenvolupaments a ordres més importants requeriria més espai en el disc de l'ordinador per a ser capaços d'emmagatzemar tots els coeficients d'influència.

Aquesta formulació que s'acaba de presentar pot recórrer també a funcions potencials harmòniques i biharmòniques. Es poden trobar més detalls sobre els desenvolupaments polinomialment per a diferents geometries d'inclusions en la tesi de Julien Leroux [Ler13].

#### 3.5.4.2) Tècnica de voxelització

La tècnica de voxelització consisteix en discretitzar una geometria volumètrica (tridimensional) en elements paral·lelepipèdics, que equivalen a la pixelització en dues dimensions. Una heterogeneïtat amb dimensions del mateix ordre de magnitud que la zona de contacte pot ser llavors discretitzada en elements cuboïdals elementals que es corresponguen amb la discretització de la resta del model. Els gradients de tensió generats pel contacte podran ser captats per les heterogeneïtats elementals cuboïdals si la discretització ho permet. [Ler13]

Els dos plantejaments que s'acaben d'exposar estan implementats en el codi ISAAC i igualment l'un o l'altre poden ser utilitzats per a tenir en compte els gradients de tensió.

## 4.) Normes i referències

### 4.1) Disposicions legals i normes aplicades

No aplica.

### 4.2) Programes de càlcul

El programa de càlcul utilitzat per a la realització d'aquest treball fi de màster s'anomena ISAAC, desenvolupat al laboratori LaMCoS (Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Structures) de l'INSA de Lyon.

### 4.3) Pla de gestió de la qualitat aplicada durant la redacció del projecte

No aplica.

### 4.4) Bibliografia

La realització d'aquest treball s'ha basat en la següent bibliografia:

- [Alb16] Albaret, T.; Tanguy, A.; Boioli F.; Rodney D.: *Mapping between Atomistic Simulations and Eshelby Inclusions in the Shear Deformation of an Amorphous Silicon model*. Phys. Rev. E 93, 053002, Vol. 93, Iss. 5 – Published 5 May 2016
- [Bou85] J. Boussinesq : *Application des potentiels à l'étude de l'équilibre et du mouvement des solides élastiques*. Gauthier-Villars, 1885.
- [Cha12] Eduardo W. V. Chaves : *Mecánica del Medio Continuo : Conceptos Básicos* (3a edición), Universidad Castilla La Mancha (UCLM), 2012
- [Chi77] YP Chiu: *On the stress field due to initial strains in a cuboid surrounded by an infinite elastic space*. Journal of Applied Mechanics, 44:587, 1977.
- [Dur06] Dureisseix, D.; Bavestrello H.: *Information transfer between incompatible finite element meshes: Application to coupled thermo-viscoelasticity*. Computer methods in applied mechanics and engineering. Volume 195, Issues 44-47, 15 September 2006
- [Esh06] J.D. Eshelby: *Collected Works of JD Eshelby. The Mechanics of Defects and Inhomogeneities*. Springer, 2006.
- [Gal07] L. Gallego: *Fretting et usure des contacts mécaniques : Modélisation numérique*. Thèse de doctorat, INSA Lyon, 2007.
- [Hes80] M.R. Hestenes: *Conjugate direction methods in optimization*, volume 175. Springer-Verlag New York, 1980.

- [Joh85] K.L. Johnson: *Contact mechanics*. Press syndicate of the university of Cambridge, 1985.
- [Ju96] Farris-T.N. Ju, Y.: *Spectral analysis of two-dimensional contact problems*. Journal of tribology, 118(2):320–328, 1996.
- [Kou15] Koumi, K.E. Modélisation du contact entre matériaux hétérogènes : Application au contact Aube/Disque. Thèse de doctorat, INSA Lyon, 2015.
- [LeM14] Le Moal, S. Rapport de Master. Modélisation de la présence d'une fissure dans un massif semi-infini par méthode semi-analytique. INSA de Lyon, 2014
- [Ler13] Leroux J. Modélisation numérique du contact pour matériaux composites. Thèse de doctorat, INSA Lyon, 2013.
- [Liu00] Wang-Q. Liu G. Liu, S.: *A versatile method of discrete convolution and fft (dc-fft) for contact analyses*. Wear, 243(1-2):101–111, 2000.
- [Liu05] Wang-Q. Liu, S.: *Elastic fields due to eigenstrains in a half-space*. TRANSACTIONS-AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS JOURNAL OF APPLIED MECHANICS, 72(6):871, 2005.
- [Liu12] Jin-X.Wang Z. Keer L.M.Wang Q. Liu, S.: *Analytical solution for elastic fields caused by eigenstrains in a half-space and numerical implementation based on fft*. International Journal of Plasticity, 2012.
- [Lov20] Love, A.E.H. : *A treatise on the mathematical theory of elasticity*. at the University Press, 1920.
- [Min50] Cheng-D.H. Mindlin, R.D.: *Thermoelastic stress in the semi-infinite solid*. Journal of Applied Physics, 21:931–933, 1950.
- [Mos75a] Mura-T. Moschovidis, Z.A.: *Two-ellipsoidal inhomogeneities by the equivalent inclusion method*. Journal of Applied Mechanics, 42:847, 1975.
- [Mos75b] Z.A. Moschovidis: *Two Ellipsoidal Inhomogeneities and Related Problems Treated by the Equivalent Inclusion Method*. Thèse de doctorat, 1975.
- [Pan75] P.D. Panagiotopoulos: *A nonlinear programming approach to the unilateral contact-, and friction-boundary value problem in the theory of elasticity*. Archive of Applied Mechanics, 44(6):421–432, 1975.
- [Pre92] Teukolsky-S.A. Vetterling W.T. Flannery B.P. Press, W.H.: *Numerical recipes in fortran 77: the art of scientific computing, vol. 1. Fortran Numer. Recipes*, 994, 1992.
- [Wri06] P. Wriggers: *Computational contact mechanics*. Springer, 2006.
- [Yu91] Sanday-S.C. Yu, H.Y.: *Elastic field in joined semi-infinite solids with an inclusion*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences, 434(1892):521–530, 1991.
- [Zho09] Chen-W.W. Keer L.M. Wang Q.J. Zhou, K.: *A fast method for solving three-dimensional arbitrarily shaped inclusions in a half space*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 198(9):885–892, 2009.

## 4.5) Altres referències

No aplica.

## 5.) Definicions i abreviatures

No aplica.

## 6.) Requisits de disseny

No aplica.

## 7.) Anàlisi de solucions

### 7.1) Estudis paramètrics sobre els problemes de contacte

Una observació a realitzar a nivell del formalisme matemàtic és que, com ja ha sigut introduït prèviament, els mètodes semianalítics del codi ISAAC recorren al càlcul de les funcions de Green, la qual cosa es realitza mitjançant la utilització de la transformada de Fourier ràpida (FFT) i, per tant, el mallatge o discretització espacial presenta certes particularitats que no existeixen quan fem per exemple el mètode dels elements finits. Com a recordatori, la base matemàtica del mètode dels elements finits i dels mètodes semianalítics presents en el codi de càlcul que hem utilitzat per a aquest treball no és la mateixa.

El mètode dels elements finits utilitza funcions de forma de suport compacte i amb partició de la unitat mentre que la transformada ràpida de Fourier (FFT) és utilitzada per a accelerar els càlculs dels productes de convolució de les funcions de Green que permeten descriure l'estat de deformació i tensió del material. Més precisament, no s'hauria d'emprar el terme "mallatge" en el context dels mètodes semianalítics ja que aquesta denominació dona a entendre l'existència de relacions de connectivitat entre els diferents nodes que discretitzen un domini espacial, com és el cas en la tècnica dels elements finits. No obstant això, amb la transformada discreta de Fourier aquestes relacions de connectivitat no existeixen. El terme més apropiat per a evitar confusions seria "discretització espacial" més aviat que "mallatge" però, d'ara endavant en la memòria, les dues formes són utilitzades indistintament per abús de llenguatge. A més, utilitzant la transformada de Fourier discreta no s'ha de distingir entre nodes i punts de càlcul (punts de Gauss) com cal fer-ho, en canvi, quan utilitzem el mètode dels elements finits. Amb aquesta tècnica de la transformada de Fourier, tenim punts de càlcul que estan igualment espaiats en les tres direccions de l'espai i que es defineixen a partir dels punts de la superfície del semiespai on s'aplica el contacte. De vegades també s'adopta el terme "nodes" per abús de llenguatge per a designar els "punts de càlcul", que són els únics que existeixen en el cas de les transformades de Fourier discretes. És per totes aquestes raons que per a la representació gràfica de la discretització espacial del semiespai d'ara endavant, només hem traçat els punts de càlcul ja que les malles no existeixen. Les úniques situacions en



què és admissible interessar-se a nocions de volum (o d'alguna manera a la malla) és quan s'aborden els problemes de plasticitat. Tanmateix, aquest últim fet és estrictament excepcional.

En la primera part d'aquest projecte, el treball ha portat principalment sobre estudis paramètrics amb el codi ISAAC per a intentar apropiat-se la física del problema. Per tant, ens hem interessat a estudiar, entre altres, l'impacte de la discretització espacial sobre la precisió de les magnituds calculades, a analitzar la influència de la posició de l'heterogeneïtat sobre les sobrepressions generades en la zona de contacte, estudiar la influència de la voxelització sobre la precisió dels resultats, etc.

Hi ha certes precaucions que cal tenir en compte també per a la definició d'un càlcul amb ISAAC per a no llançar simulacions que no siguin coherents des d'un punt de vista físic:

- 1) Quan ens interessem a simulacions de contacte amb inclusions en el cos indentat, una d'aquestes precaucions és que la semillargària de la inclusió (o el radi de la inhomogeneïtat si aquesta és el·lipsoïdal) no ha de ser un múltiple del pas de discretització espacial. Aquesta configuració apareix representada en la Figura 11.

El problema amb aquesta configuració és que com el nostre codi utilitza transformades ràpides de Fourier per a calcular les funcions de Green que permeten obtenir el camp de tensió i deformació en qualsevol punt del sòlid semiinfinit, els punts de càlculs no han de trobar-se exactament sobre la frontera que separa el domini de la inhomogeneïtat del de la matriu que l'envolta. Aquesta situació impossibilita el càlcul de les esmentades grandàries físiques ja que un mateix punt de càlcul es troba a cavall de dos dominis diferents.

- 2) Les inhomogeneïtats han d'estar també posicionades de tal manera que estiguen centrades sobre els punts de càlcul de la discretització espacial. Açò és estrictament necessari per a calcular correctament els coeficients d'influència que ens permeten determinar l'estat de tensió i deformació en qualsevol punt del sòlid. Si la definició del problema no és correcta, és a dir, les inhomogeneïtats estan descentrades respecte de la discretització espacial del sòlid estudiat, el codi disposa de l'ordre `"*enableInhomogeneityCentering"` per a corregir aquestes posicions.

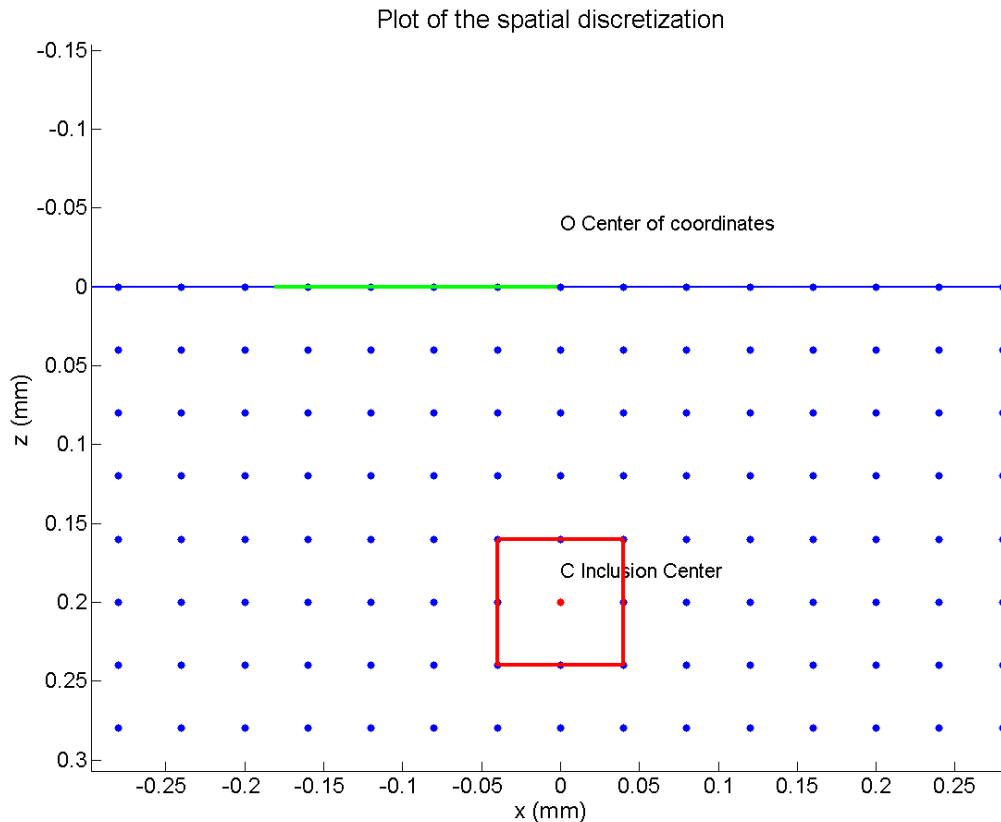


Figura 11: Representació d'una discretització espacial prohibida: la semillargària de la inhomogeneïtat no ha de ser un múltiple del pas de discretització espacial

Aquesta ordre permet posicionar tots els nodes de la inhomogeneïtat sobre els nodes de la discretització espacial per tal d'assegurar el càlcul correcte de les funcions de forma. No obstant això, convé definir la posició de la inhomogeneïtat correctament des del principi perquè sinó es degradarà la convergència del càlcul.

- 3) Quan treballem amb inhomogeneïtats de grandària considerable en comparació amb el radi de contacte del problema, la hipòtesi que la deformació d'incompatibilitat (eigenstrain) prengui un valor constant a l'interior d'aquesta inhomogeneïtat ja no és justificable a priori. Per això, cal estendre l'expressió d'aquesta eigenstrain a la d'un polinomi d'ordre 1 o 2 per a poder descriure millor aquesta evolució de la deformació dins de la inhomogeneïtat.

A part d'aquest canvi de formalisme matemàtic, existeix també una altra possibilitat per a traduir l'evolució de la deformació a l'interior d'una mateixa inhomogeneïtat: la voxelització. La tècnica de voxelització consisteix en discretitzar una geometria volumètrica (tridimensional) en elements paral·lelepípedics, equivalent a la pixelització en dues dimensions. D'aquesta manera, quan el cos indentat presentarà una gran inclusió, serà necessari discretitzar-la per a disposar d'una representació correcta de la seua deformació i caldrà activar també l'opció de càlcul `"*mutualInfluence"` per a poder tenir en compte els efectes d'interacció entre cadascun dels petits volums cúbics que conformen la gran inhomogeneïtat per al càlcul de la tensió. La consideració d'aquestes influències mútues contribueix a augmentar el temps de resolució del càlcul però sense aquestes influències mútues, els resultats obtinguts no són representatius de la realitat.

### 7.1.1) Estudi paramètric. Influència de la precisió del mallatge

Per a quantificar la influència del mallatge sobre la precisió de les magnituds obtingudes en la fase de post-tractament, considerarem els següents casos d'estudi. A continuació, s'especificaran les diferents informacions necessàries per a la definició del càlcul de contacte. Les magnituds escrites en roig i marcades en groc corresponen a aquelles que farem variar al llarg dels diferents estudis paramètrics:

Càlcul 1: Mallatge Groller	Càlcul 2: Mallatge Refinat
<b>Propietats Geomètriques</b>	<b>Propietats Geomètriques</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>61</b></li> <li>- Pas de mallatge: <b>0,04 mm</b></li> <li>- Tipus de contacte: esfera-pla</li> <li>- Punts de càlcul dins de la llargària del contacte: 9</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b></li> <li>- Pas de mallatge: <b>0,008 mm</b></li> <li>- Tipus de contacte: esfera-pla</li> <li>- Punts de càlcul dins de la llargària del contacte: 45</li> </ul>
<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>	<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)</li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,12)</b> mm</li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: (0,2 ; 0,2 ; 0,2) mm</li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) rad</li> <li>- Mòdul de Young: E = 500 GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li>- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0</li> <li>-Tipus d'inclusió: <b>esfèrica</b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)</li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,12)</b> mm</li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: (0,2 ; 0,2 ; 0,2) mm</li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) rad</li> <li>- Mòdul de Young: E = 500 GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li>- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0</li> <li>-Tipus d'inclusió: <b>esfèrica</b></li> </ul>
<b>Tipus de Contacte</b>	<b>Tipus de Contacte</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força Normal Imposada</li> <li>- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força Normal Imposada</li> <li>- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)</li> </ul>
<b>Càrrega</b>	<b>Càrrega</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força normal: 50 N</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força normal: 50 N</li> </ul>
<b>Materials</b>	<b>Materials</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mòdul de Young indentador: <math>E_1 = 114,6</math> GPa</li> <li>- Coef. de Poisson indentador: <math>\nu_1 = 0,3</math></li> <li>- Mòdul de Young indentat: <math>E_2 = 114,6</math> GPa</li> <li>- Coef. de Poisson indentat: <math>\nu_2 = 0,3</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mòdul de Young indentador: <math>E_1 = 114,6</math> GPa</li> <li>- Coef. de Poisson indentador: <math>\nu_1 = 0,3</math></li> <li>- Mòdul de Young indentat: <math>E_2 = 114,6</math> GPa</li> <li>- Coef. de Poisson indentat: <math>\nu_2 = 0,3</math></li> </ul>
<b>Algoritme de resolució</b>	<b>Algoritme de resolució</b>
Mètode de Chiu	Mètode de Chiu
<b>Paràmetres del contacte d'Hertz</b>	<b>Paràmetres del contacte d'Hertz</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Radi del contacte hertzià: <math>a = 0,1813</math> mm</li> <li>- Pressió d'Hertz màxima: <math>P_0 = 726,607</math> MPa</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Radi del contacte hertzià: <math>a = 0,1813</math> mm</li> <li>- Pressió d'Hertz màxima: <math>P_0 = 726,607</math> MPa</li> </ul>

Taula 1: Resum del parametratge dels càlculs 1 i 2 del primer cas d'estudi

La configuració d'estudi del Càlcul 1 representada en 2D és la següent:

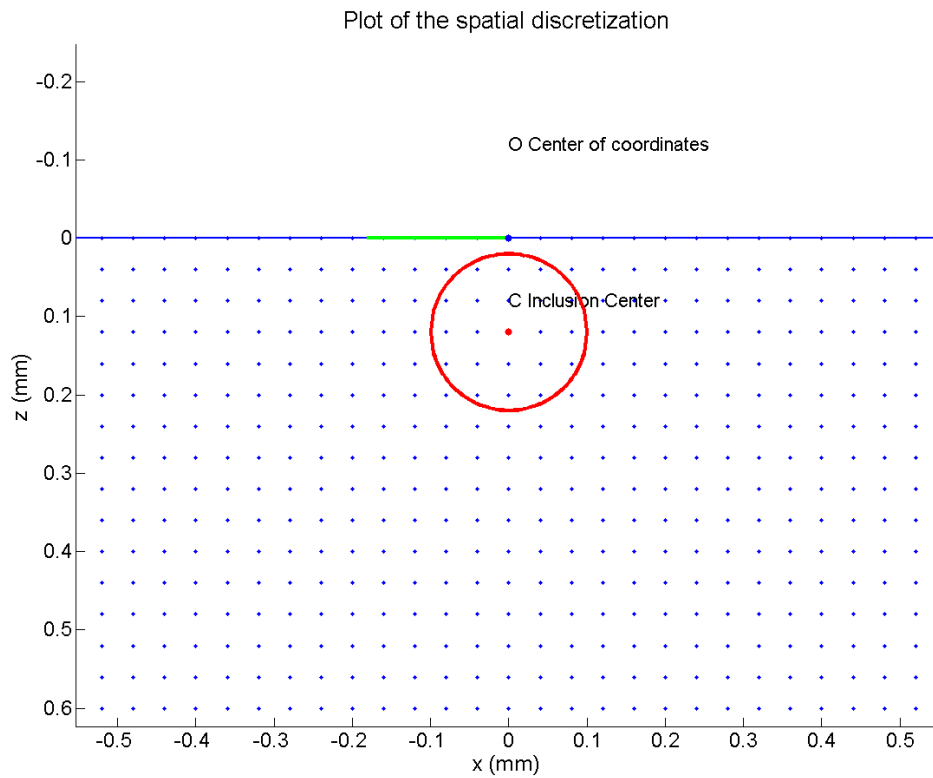


Figura 12: Discretització espacial grollera. Càlcul 1

La configuració d'estudi del Càlcul 2 representada en 2D és la següent:

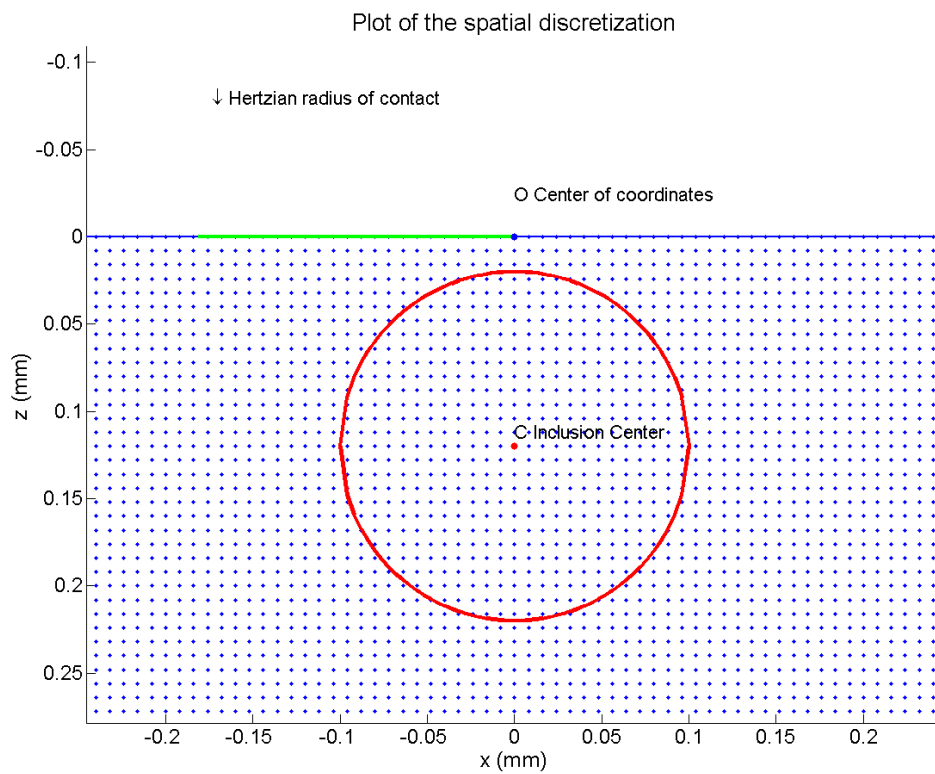


Figura 13: Discretització espacial refinada. Càlcul 2

Nota: encara que el mallatge està representat en 2D per dificultats de visualització de la representació tridimensional, els càlculs de contacte estan realitzats en 3D.

Si ens interessem als perfils de pressió de contacte en 3D obtinguts gràcies a aquests càlculs podem observar els següents resultats:

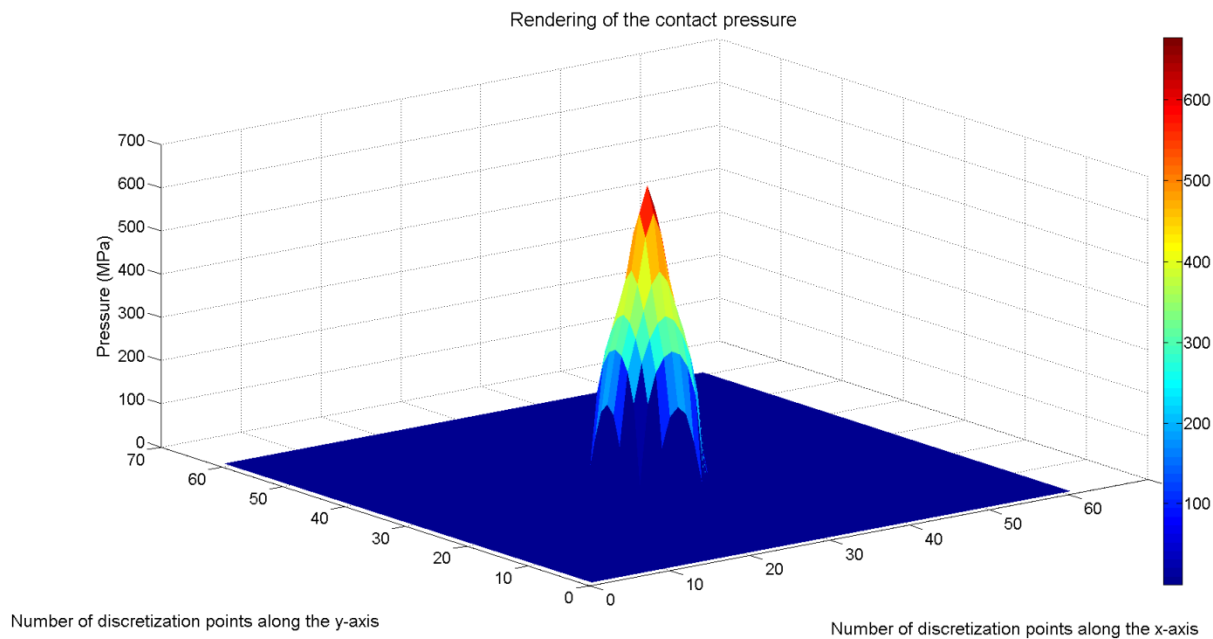


Figura 14: Representació del perfil de pressió de contacte en 3D en el Càlcul 1

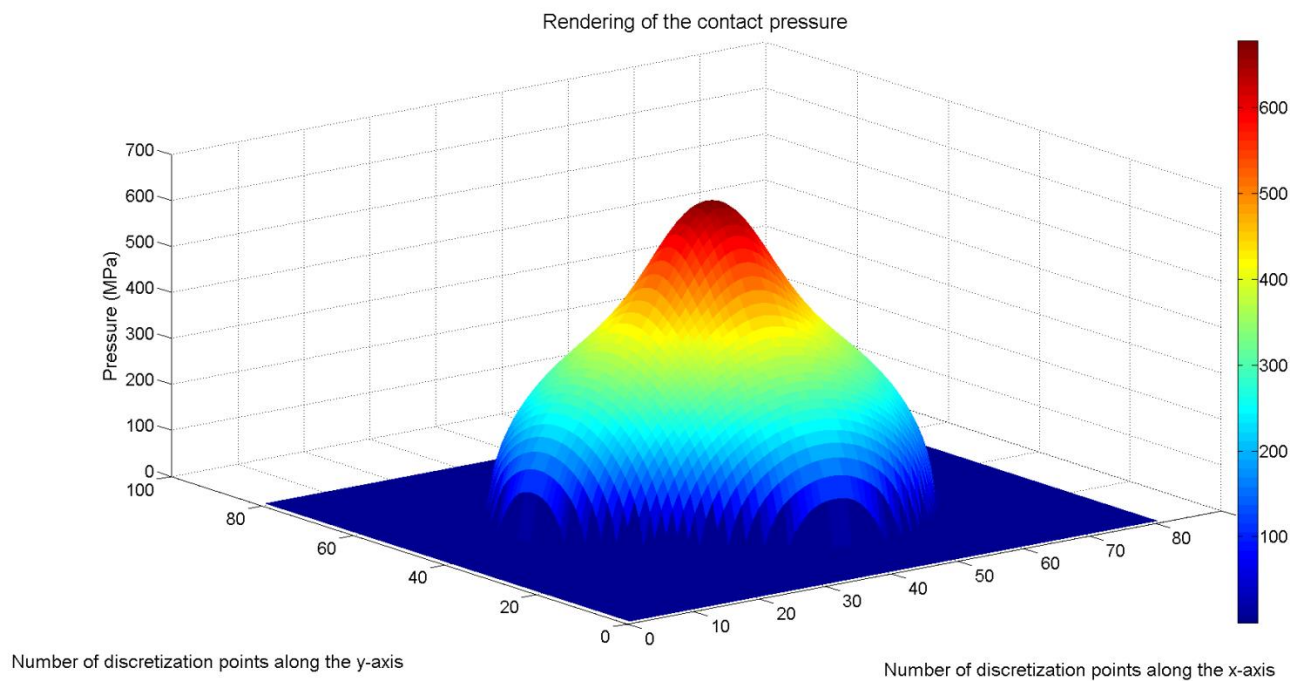


Figura 15: Representació del perfil de pressió de contacte en 3D en el Càlcul 2

A partir d'aquestes imatges, podem constatar la importància de definir una discretització refinada per a poder descriure correctament les variacions de les magnituds físiques; en aquest cas la pressió de contacte. No obstant això, les diferències no són tan grans com ho poden paréixer mirant ambdues gràfiques per separat. Hem passat d'una descripció inicial, en què el radi de la inhomogeneïtat s'aproximava al valor del pas de discretització espacial, a un segon cas en què aquest mateix radi està representat pel valor de 6 passos de discretització, la qual cosa dóna lloc a un perfil de pressió més allisat que l'obtingut en el Càlcul 1. A més, com que la inhomogeneïtat està situada relativament prop de la superfície de contacte, és important tenir una discretització espacial refinada per a poder traduir el gradient de tensió causat pel contacte i els efectes de sobrepressió a causa de la inhomogeneïtat. Com es pot observar en la Figura 12, és el fet de disposar d'una inhomogeneïtat de forma esfèrica prop de la superfície de contacte el que dóna lloc a aquest pic de sobrepressió de forma arrodonida. Cal assenyalar també que existeix un pic de sobrepressió en la zona on es troba la inhomogeneïtat perquè la duresa de la inclusió és més important que la del material matriu. Si la duresa de la inclusió fóra inferior a la de la matriu, en comptes de tenir un pic de pressió, el perfil de pressió presentaria un pic en forma de depressió o vall en la zona on es troba la inclusió.

Seguidament, traçarem els perfils de pressió en 2D per a poder quantificar sobre quina extensió real tenen lloc aquests pics de pressió de contacte:

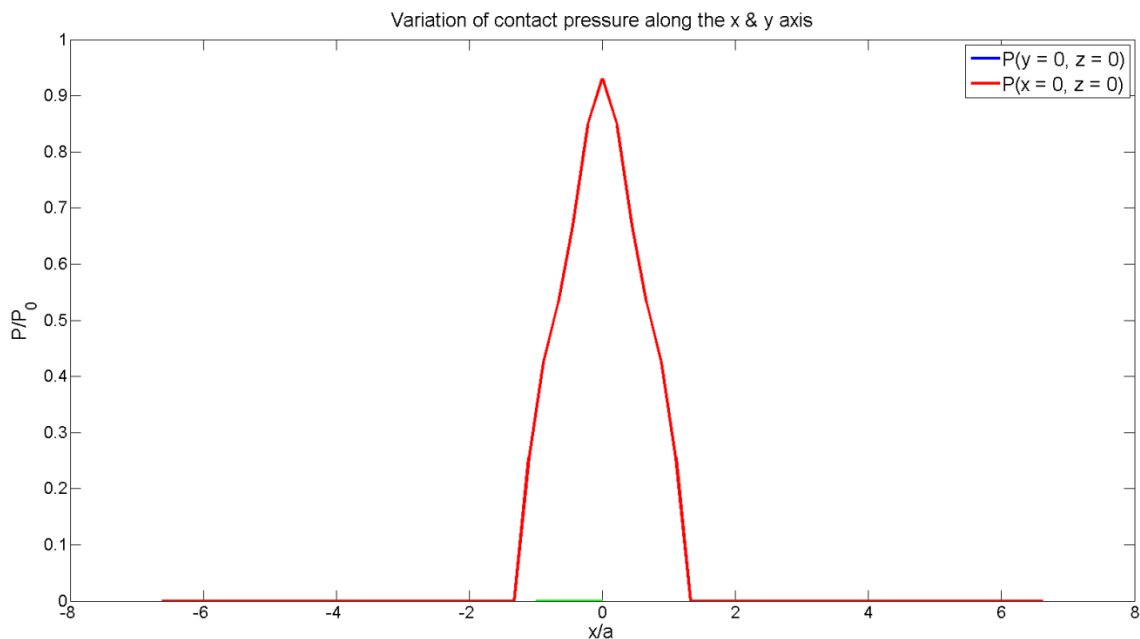


Figura 16: Pressió de contacte del Càlcul 1 (discretització  $h_x = 0,04$  mm)

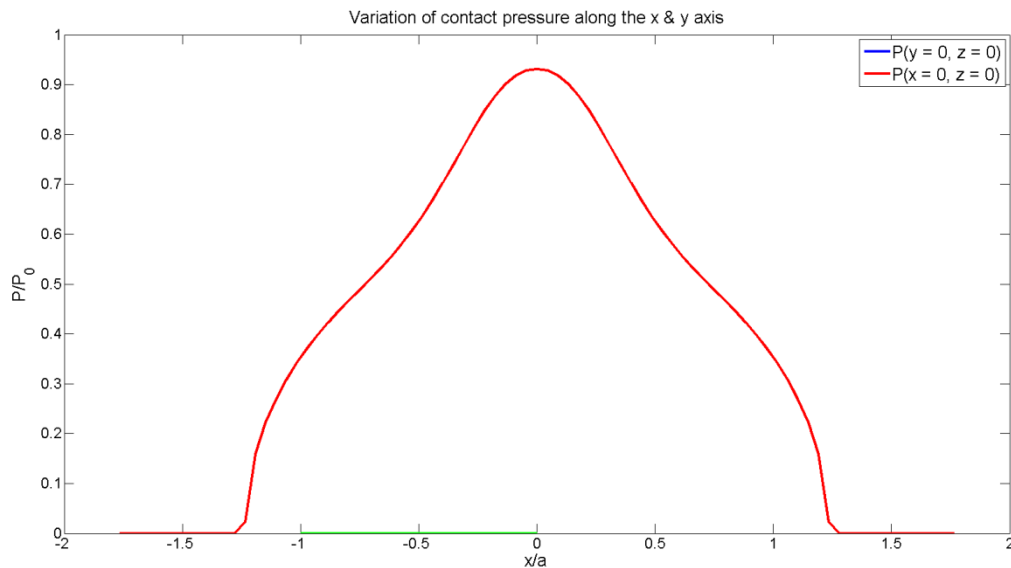


Figura 17: Pressió de contacte del Càlcul 2 (discretització  $h_x = 0,008$  mm)

Com que el perfil de pressió obtingut durant el càlcul era tridimensional, hem decidit traçar només els perfils bidimensionals continguts en el pla x (perfil en blau) i el pla y (perfil en roig). Com que en aquest cas d'estudi, el material indentat conté una sola inhomogeneïtat esfèrica en les proximitats de la zona de la superfície (que a partir d'ara també serà anomenada com "subsuperfície"), els dos perfils de pressió se superposen.

La línia representada en verd sobre l'eix d'abscisses és el radi de contacte hertzià que correspon a la semilongitud del contacte predita per la teoria d'Hertz. Malgrat el fet que aquesta teoria està construïda amb diverses hipòtesis restrictives que hem enumerat prèviament (pàgina 16), aquesta dóna un primera aproximació de l'extensió de la zona de contacte que hem decidit representar per a contrastar els resultats dels mètodes analítics i semianalítics.

Les magnituds dels eixos s'expressen de manera adimensionalitzada a través dels paràmetres de la teoria d'Hertz on "a" és el radi de contacte hertzià i " $P_0$ " és la pressió màxima de la teoria d'Hertz. Per a aquest primer estudi paramètric, hem imposat una sol·licitació en força de 50 N, la qual cosa dóna com a resultats els següents paràmetres d'Hertz:  $a = 0,1813$  mm i  $P_0 = 726,6$  MPa. El càlcul d'aquestes magnituds amb la teoria d'Hertz està detallat als annexos.

Per a concloure aquest apartat de la influència de la precisió de la discretització espacial, superposem les dues figures precedents:

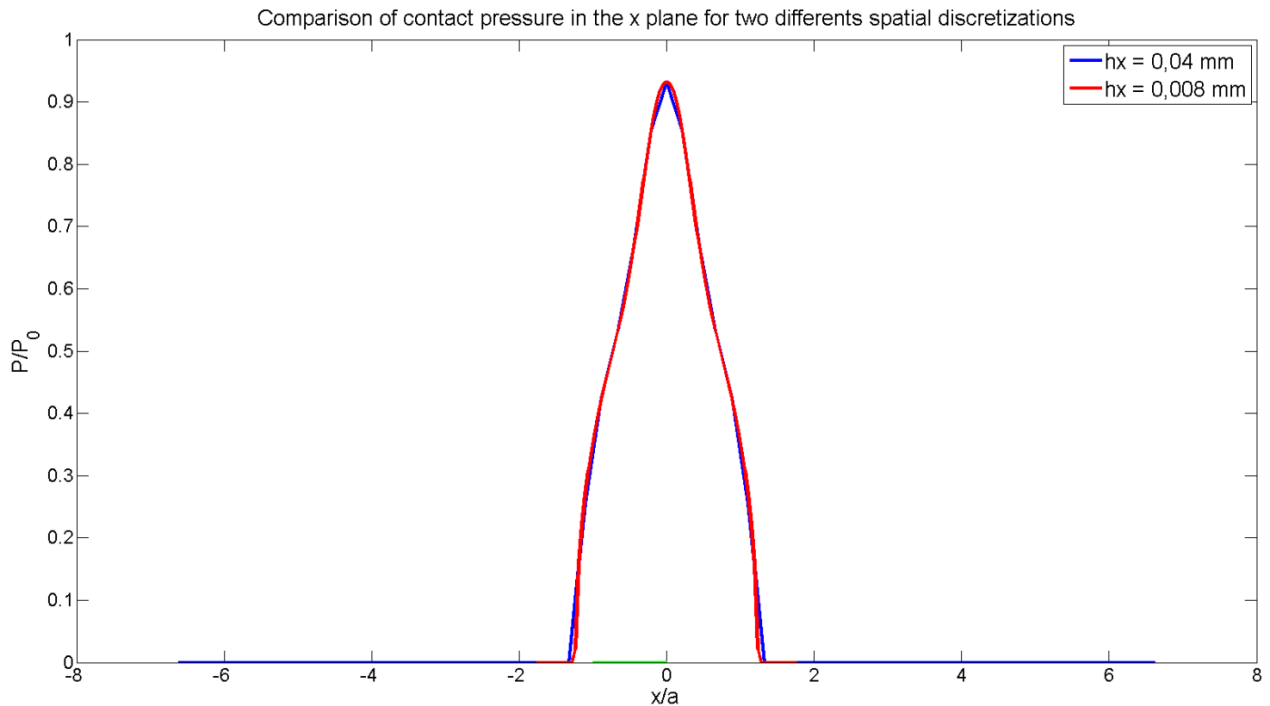


Figura 18: Superposició dels perfils de pressió en els dos càlculs realitzats per a diferents refinaments del mallatge

Com podem adonar-nos-en en la gràfica superior, finalment les diferències entre les dues discretitzacions retingudes no són molt importants. Les diferències més notables es troben a nivell de les vores del perfil de pressió i al seu pic, però no deixen de ser poc importants. Per tant, podem concloure que no és el contacte el que dicta el pas de discretització espacial, sinó la microestructura del material indentat (si aquest és heterogeni), com ho veurem més endavant en aquesta memòria.

Una altra observació a realitzar és que per a aconseguir un compromís òptim entre el temps de càlcul i la precisió dels resultats, el nombre de punts de càlcul a definir en la zona de contacte és 9 quan el material indentat és homogeni o, dit altrament, quan ens interessem a estudiar exclusivament el problema de contacte. Aleshores, com podem constatar-ho sobre la imatge superior, el fet d'utilitzar 9 punts o 45 en la longitud de contacte no té un impacte molt gran sobre la precisió del perfil de pressió (però aquest serà important per a la precisió de la descripció de l'estat elàstic de la inhomogeneïtat). No obstant això, el temps de càlcul és prou diferent. La simulació amb 9 punts de càlcul en la longitud de contacte pren un temps CPU de 2,2 minuts<sup>2</sup> mentre que la simulació amb 45 punts de contacte dura 18,5 minuts. Doncs, quasi un factor 9 entre les dues simulacions. Així, podem concloure que la definició de quasi 9 punts de càlcul en la longitud de contacte serà suficient per a obtenir una descripció fina de les magnituds físiques alhora que els temps de càlculs resten prou curts. Des que el medi indentat serà heterogeni, serà necessari prendre un pas de discretització més fi per a descriure precisament l'estat de tensió i deformació de la inhomogeneïtat.

<sup>2</sup> Els càlculs han sigut realitzats amb una "workstation" personal que posseeix les característiques següents: 8 GB de memòria RAM, processador Intel® Core™ i7-3630QM CPU 2,4/3,4 GHz.



Encara que en els dos càlculs que hem realitzat en aquest cas d'estudi hem definit un contacte normal sense tenir en compte els fenòmens de lliscament, hem traçat de totes formes l'aparença del perfil de cisallament per a estar segurs que el càlcul s'ha dut a terme correctament.

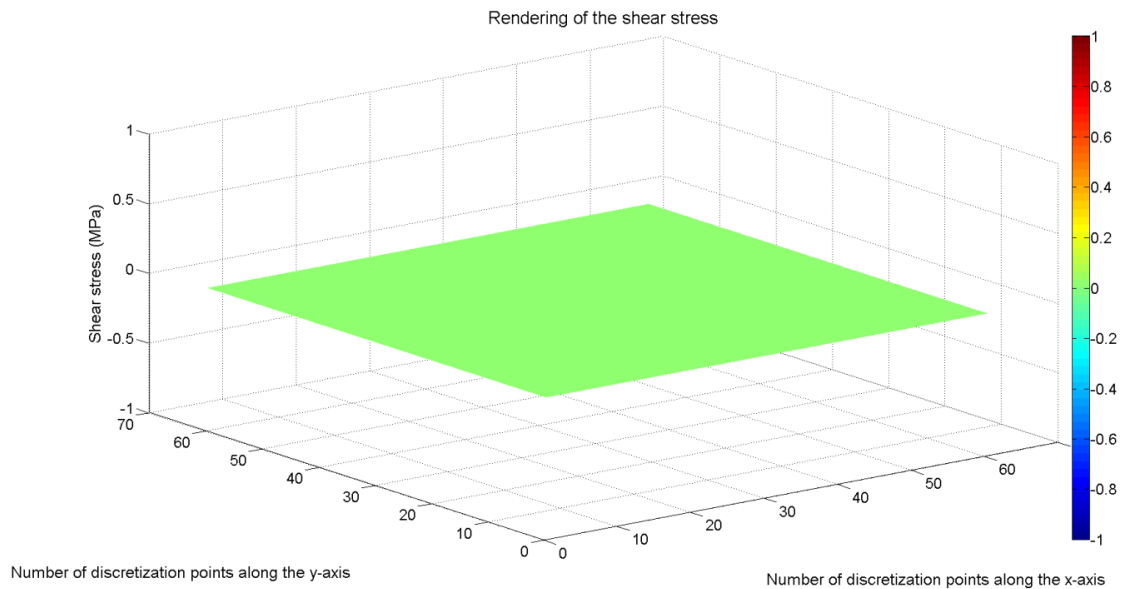


Figura 19: Perfil de cisallament segons l'eix X i Y dels dos càlculs d'aquest primer estudi paramètric

Per tant, no hi ha hagut lliscament.

Finalment, ens hem interessat també a post-tractar els valors de tensions elàstiques en la subsuperfície a mesura que recorrem l'eix  $z$  i l'eix  $x$ . Només representarem els resultats obtinguts en el càlcul 2 del cas d'estudi, és a dir, amb un mallatge refinat, el pas de discretització del qual és  $h_x = 0,008$  mm:

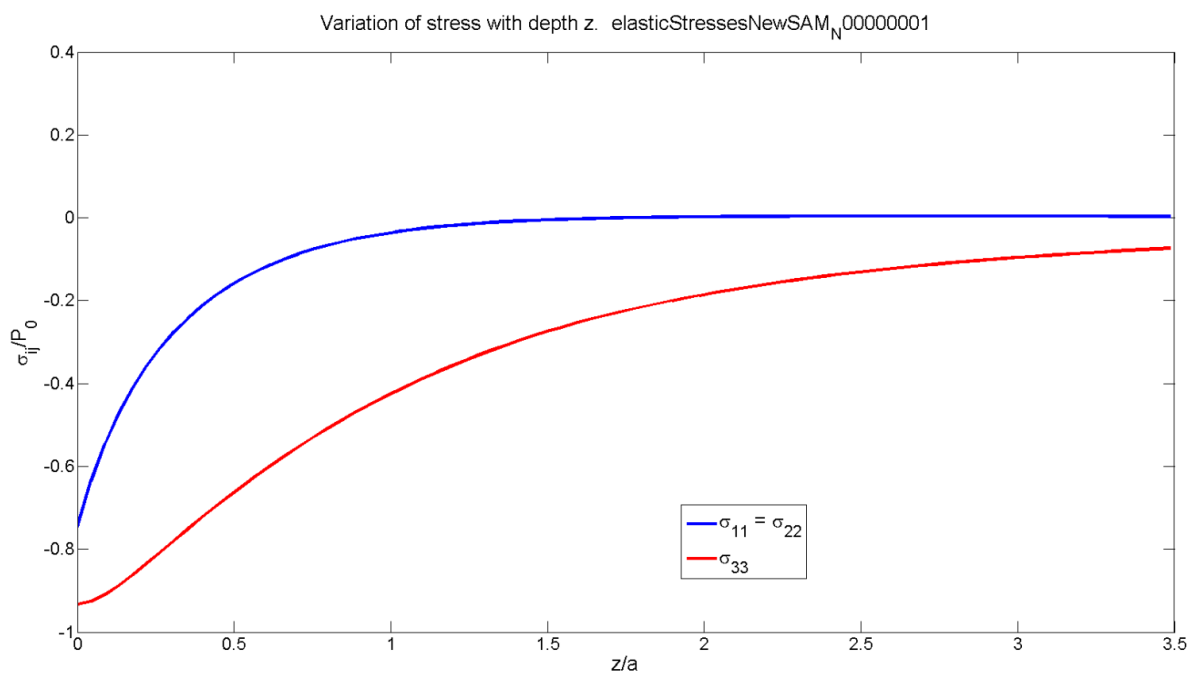


Figura 20: Evolució de la tensió elàstica en la subsuperfície segons la profunditat

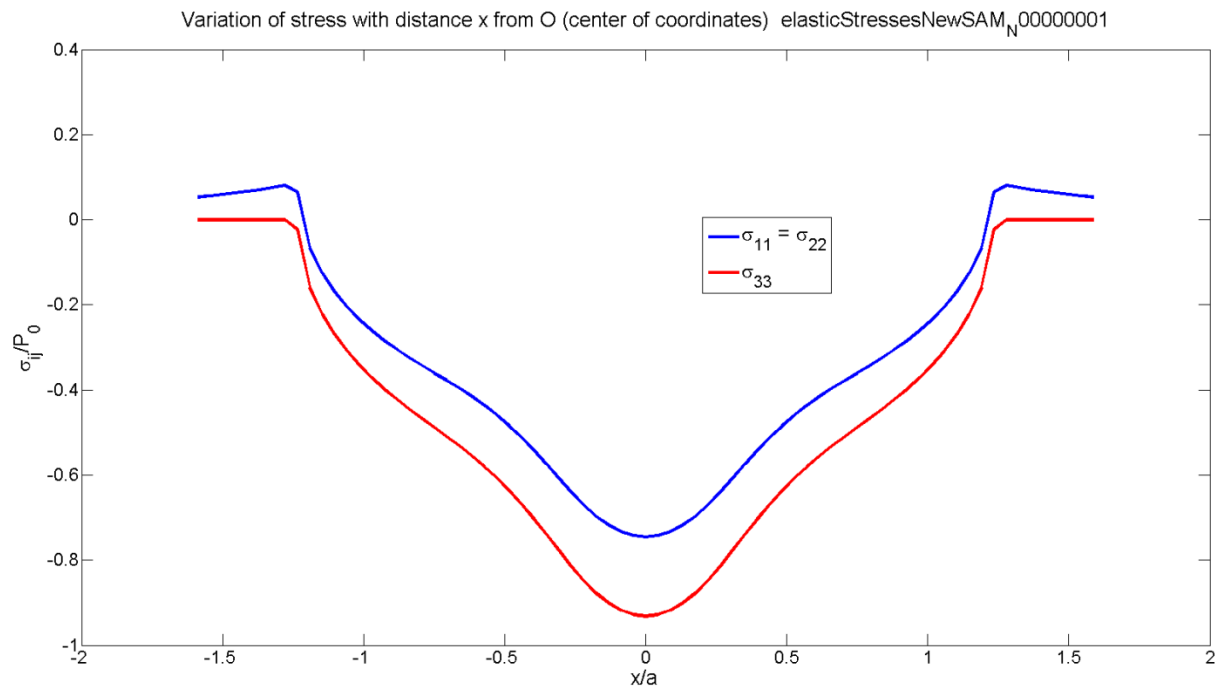


Figura 21: Evolució de la tensió elàstica en la subsuperfície segons x

A partir de les gràfiques de la Figura 20, podem afirmar que a mesura que la posició sobre l'eix z està allunyada de la superfície de contacte, el valor de la tensió descendeix també progressivament fins a abastar un valor nul, la qual cosa correspon a la realitat física del problema del contacte. Pel que fa a les gràfiques de la Figura 21, podem observar que els perfils de tensió, com ho esperàvem a priori, coincideixen amb l'aparença del perfil de pressió de contacte.

Així doncs, en els dos casos trobem dos resultats coherents amb la física del problema.

### 7.1.2) Estudi paramètric. Influència de la geometria de la inclusió

En aquest segon cas d'estudi, definirem un material indentat que conté una inhomogeneïtat cúbica de la mateixa dimensió i que es troba a la mateixa profunditat que la del cas d'estudi 1, és a dir:  $z = 0,12$  mm. Aquests són els paràmetres del Càlcul 3 d'aquest cas d'estudi:

Càlcul 3: Mallatge Refinat
<b>Propietats Geomètriques</b>
- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b>
- Pas de mallatge: <b>0,008 mm</b>
- Tipus de contacte: esfera-pla
<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>
- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)
- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,12)</b> mm
- Grandària de la inhomogeneïtat: (0,2 ; 0,2 ; 0,2) mm
- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) rad
- Mòdul de Young: $E = 500$ GPa
- Coeficient de Poisson: $\nu = 0,3$
- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0
- Tipus d'inclusió: <b>cúbica</b>
<b>Tipus de Contacte</b>
- Força Normal Imposada
- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)
<b>Càrrega</b>
- Força normal: 50 N
<b>Materials</b>
- Mòdul de Young indentador: $E_1 = 114,6$ GPa
- Coef. de Poisson indentador: $\nu_1 = 0,3$
- Mòdul de Young indentat: $E_2 = 114,6$ GPa
- Coef. de Poisson indentat: $\nu_2 = 0,3$
<b>Algoritme de resolució</b>
Mètode de Chiu
<b>Paràmetres del contacte d'Hertz</b>
- Radi del contacte hertzià: $a = 0,1813$ mm
- Pressió d'Hertz màxima: $P_0 = 726,607$ MPa

Taula 2: Resum del parametratge del càlcul 3 del segon cas d'estudi

Si ens interessem al traçat del perfil de pressió de contacte:

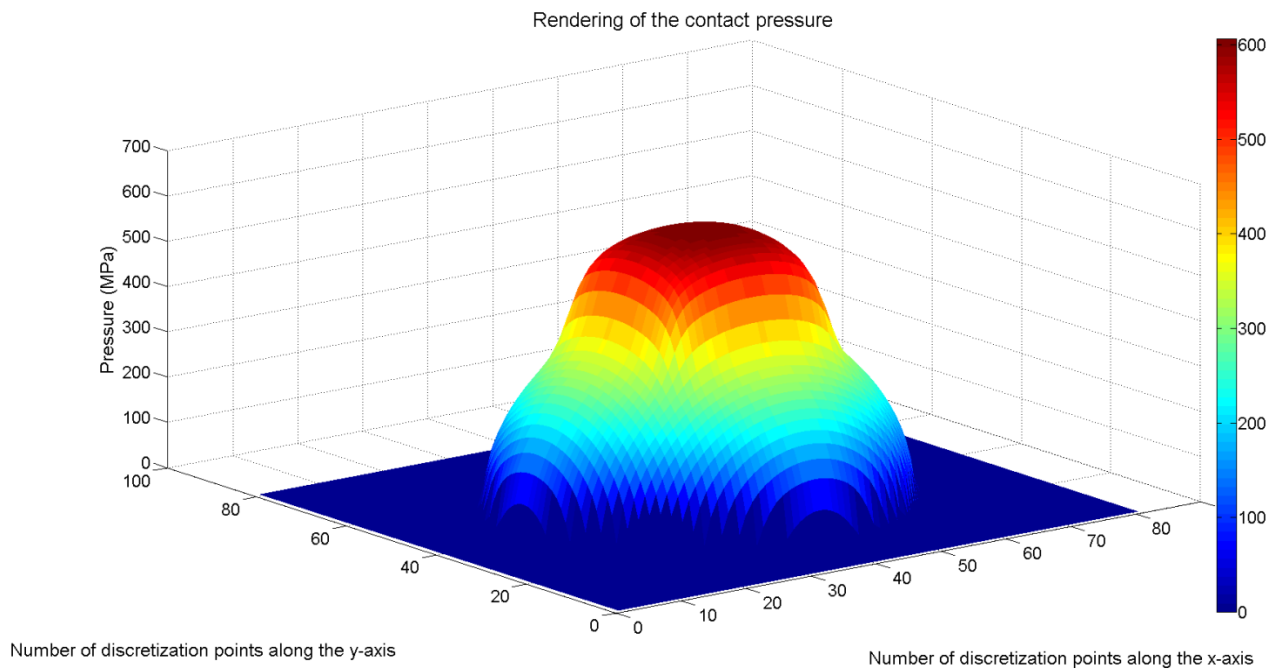


Figura 22: Representació del perfil de la pressió de contacte en 3D en el Càlcul 3

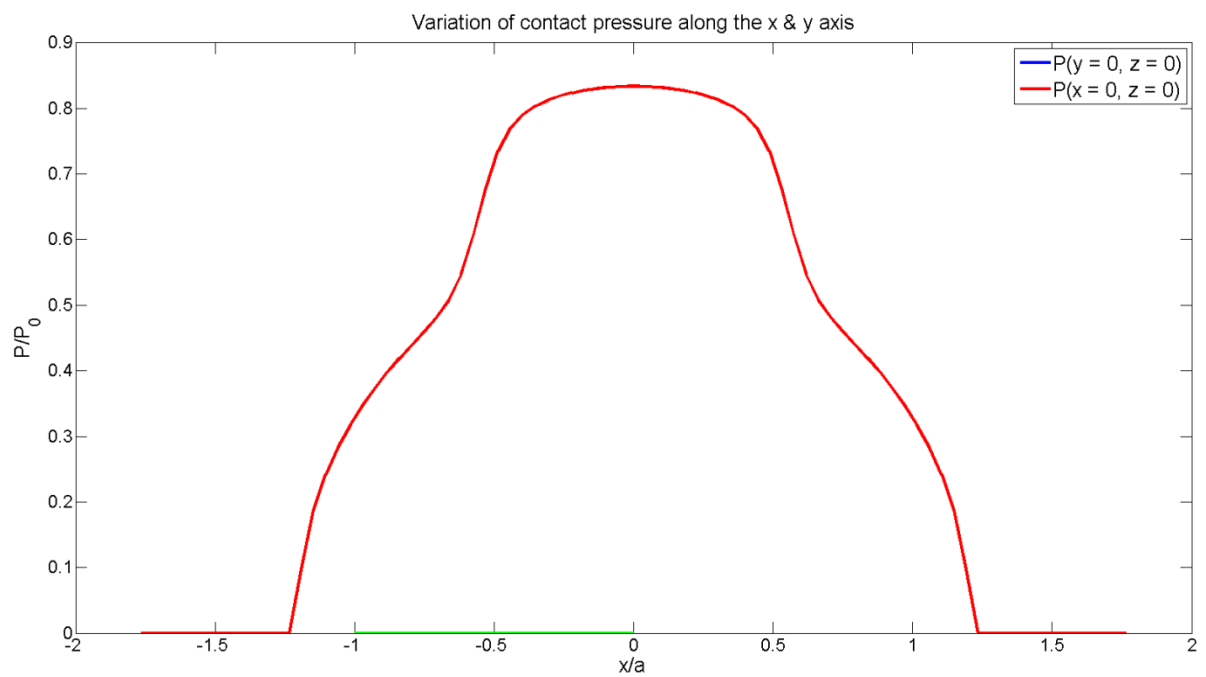


Figura 23: Pressió de contacte del Càlcul 3 (discretització  $h_x = 0,008$  mm)

Com ho demostren les gràfiques precedents, el fenomen de sobrepressió dóna lloc a aquesta línia quasi horitzontal que podem observar en la gràfica superior. Així, podem concloure que la natura geomètrica de la inhomogeneïtat continguda en el cos indentat condicionarà la distribució i la grandària de la pressió abastada.

Igualment, cal assenyalar que en aquests primers casos d'estudi que hem post-tractat, hem trobat fenòmens de sobrepressió de contacte com a conseqüència de la presència d'inhomogeneïtats en la subsuperfície del material indentat. No obstant això, la presència d'inhomogeneïtats pròximes a la superfície no implica fenòmens de sobrepressió en tots els casos ja que açò depèn de la duresa relativa del material matriu i del de la inhomogeneïtat com ja ho hem exposat prèviament. Si el mòdul de Young de la inhomogeneïtat ( $E_i$ ) és més gran que el del material de la matriu ( $E_m$ ), obtenim els fenòmens de sobrepressió des que un sòlid entra en contacte amb un altre, com ho hem pogut apreciar sobre les figures precedents. En canvi, si la inhomogeneïtat és més molla que la matriu ( $E_i < E_m$ ), en comptes de presentar pics, el perfil de pressió causat pel contacte presentarà depressions o valls. Doncs, en aquest cas, no hi ha presència de fenòmens de sobrepressió, la qual cosa pot ser important per al dimensionament de certes aplicacions.

### 7.1.3) Estudi paramètric. Influència de la posició de la inhomogeneïtat

En aquest tercer cas d'estudi, s'estudiarà la influència de la posició de la inhomogeneïtat sobre la pressió de contacte retenint per a l'estudi una geometria de tipus cúbica amb les mateixes dimensions que en el segon cas d'estudi. A continuació, mostrem una representació esquemàtica de la discretització espacial d'aquest cas d'estudi:

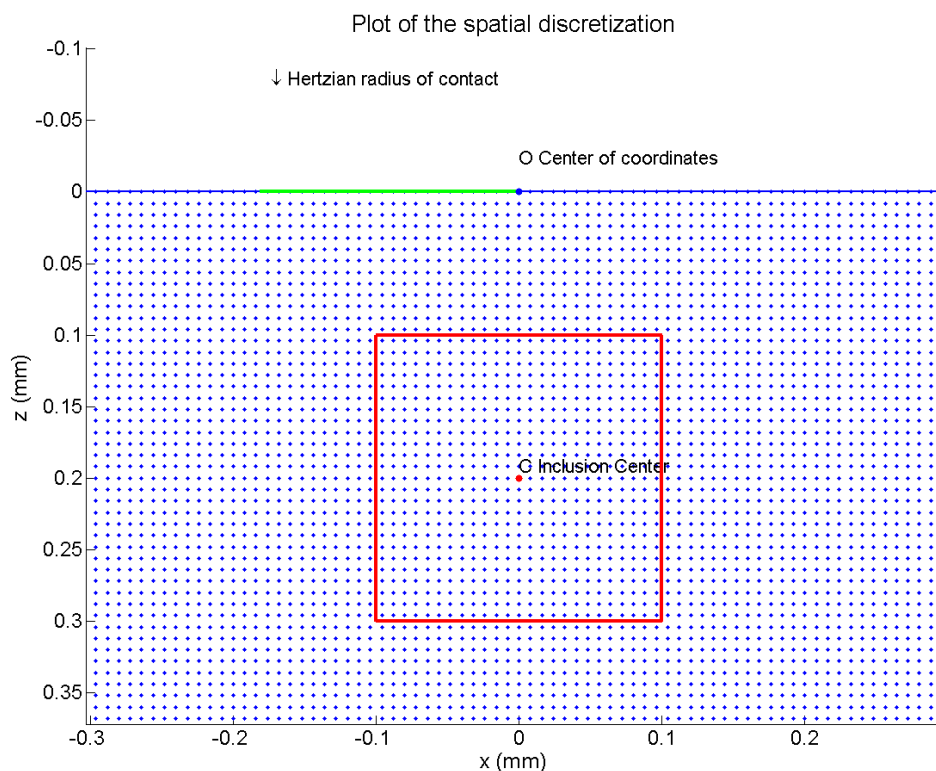


Figura 24: Discretització espacial refinada ( $h_x = 0,008$  mm). Càlcul 4

El resum de la definició d'aquest tercer cas d'estudi està presentat en la taula següent:

Càlcul 4: Mallatge Refinat
<b>Propietats Geomètriques</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b></li> <li>- Pas de mallatge: <b>0,008 mm</b></li> <li>- Tipus de contacte: esfera-pla</li> </ul>
<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)</li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,2)</b> mm</li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: (0,2 ; 0,2 ; 0,2) mm</li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) rad</li> <li>- Mòdul de Young: <math>E = 500</math> GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li>- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0</li> <li>- Tipus d'inclusió: <b>cúbica</b></li> </ul>
<b>Tipus de Contacte</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força Normal Imposada</li> <li>- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)</li> </ul>
<b>Càrrega</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força normal: 50 N</li> </ul>
<b>Materials</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mòdul de Young indentador: <math>E_1 = 114,6</math> GPa</li> <li>- Coef. de Poisson indentador: <math>\nu_1 = 0,3</math></li> <li>- Mòdul de Young indentat: <math>E_2 = 114,6</math> GPa</li> <li>- Coef. de Poisson indentat: <math>\nu_2 = 0,3</math></li> </ul>
<b>Algoritme de resolució</b>
Mètode de Chiu
<b>Paràmetres del contacte d'Hertz</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Radi del contacte hertzià: <math>a = 0,1813</math> mm</li> <li>- Pressió d'Hertz màxima: <math>P_0 = 726,607</math> MPa</li> </ul>

Taula 3: Resum del parametratge del càlcul 4 del tercer cas d'estudi

El simple fet d'haver desplaçat la inhomogeneïtat a una profunditat de  $z = 2$  mm dona lloc als següents perfils de pressió:

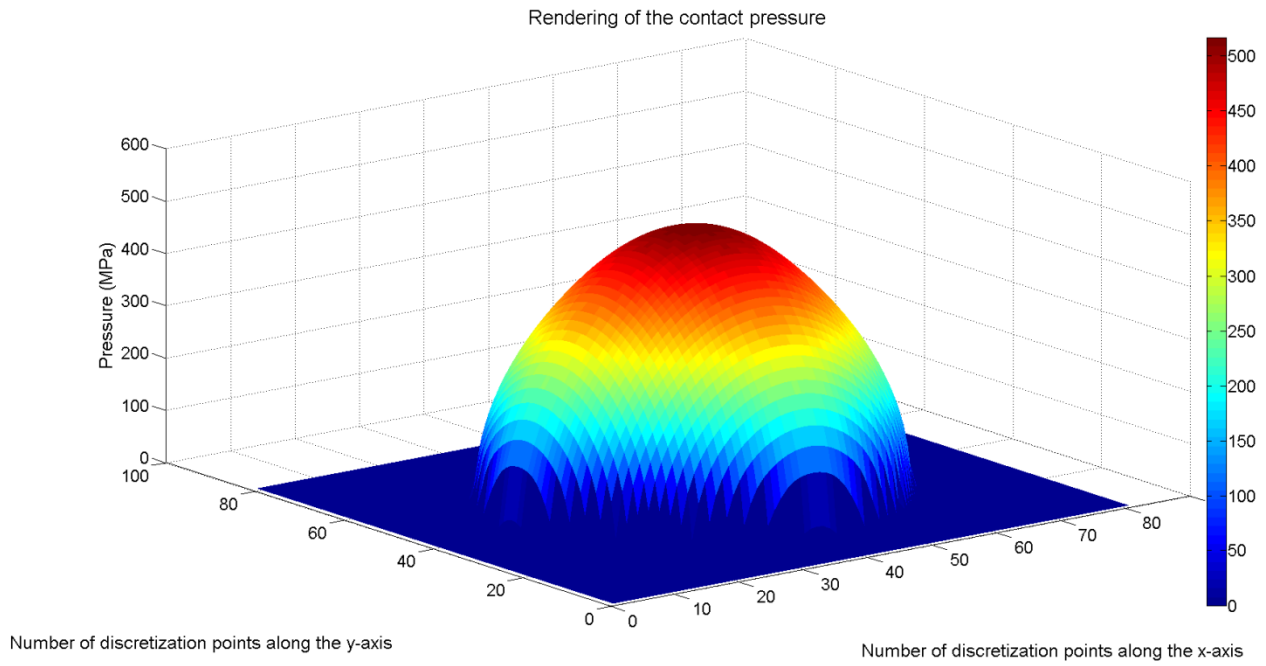


Figura 25: Representació del perfil de la pressió de contacte en 3D en el Càlcul 4

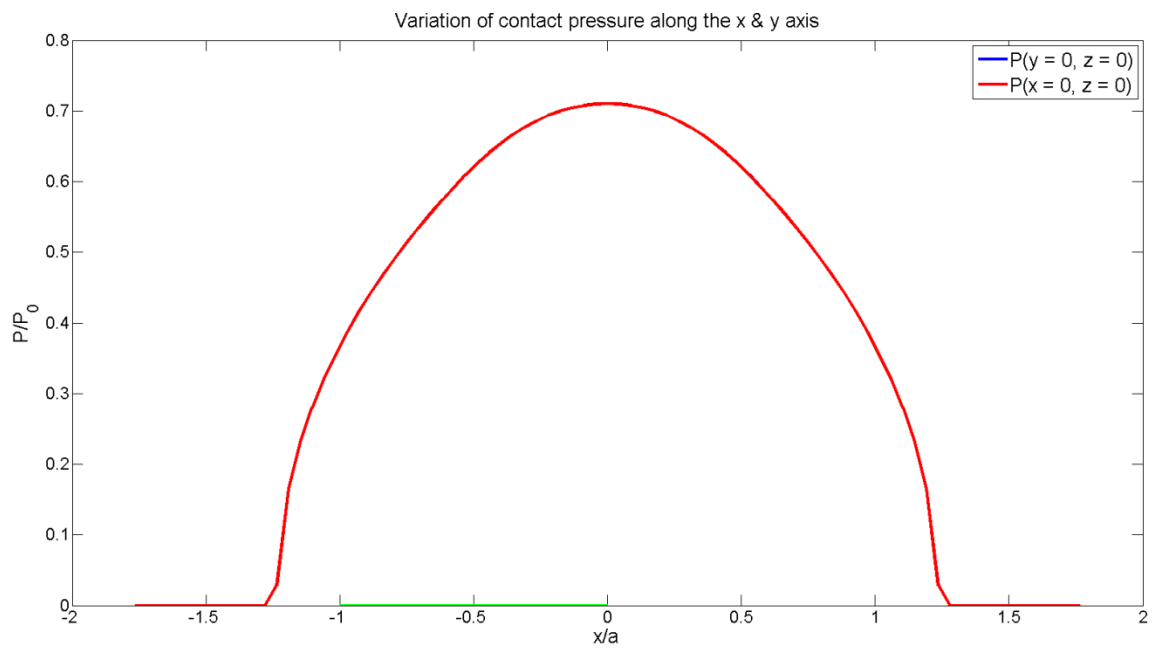


Figura 26: Pressió de contacte del Càlcul 4 (discretització  $h_x = 0,008$  mm)

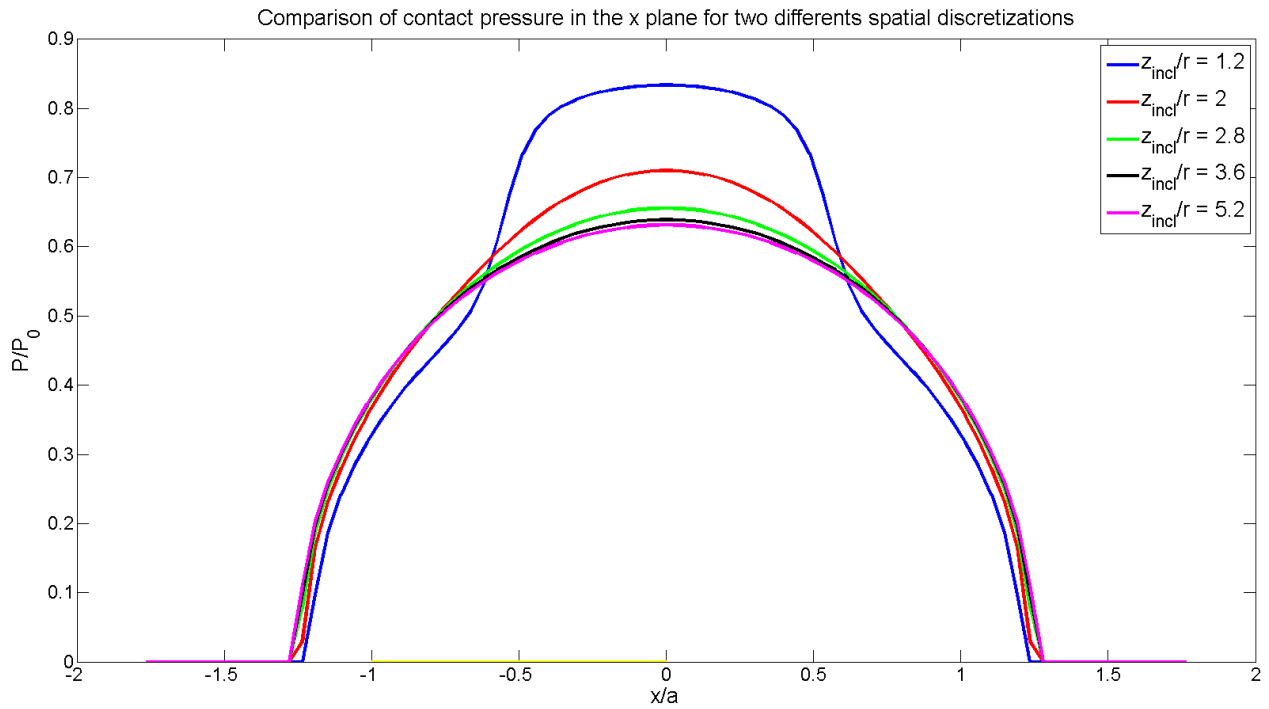


Figura 27: Superposició dels perfils de pressió per a inhomogeneïtats cúbiques situades a diferent profunditat

Pel que fa a les tres últimes figures, ens adonem que la profunditat de la inhomogeneïtat en el sòlid és determinant sobre el nivell de sobrepressió creat a causa del contacte ja que el fet d'haver augmentat en 0,8 mm la profunditat de la inhomogeneïtat respecte de la del cas de càlcul 2, provoca la creació d'un perfil de pressió completament arrodonit i que no ens permet ni tan sols detectar la natura geomètrica de la inclusió subjacent. Podem concloure doncs que en les aplicacions com, per exemple, els àleps de turboreactors fabricats amb materials composts, serà important estar alerta per a no situar les fibres del compost massa pròximes de la zona d'unió al disc portador del compressor per a prevenir així els eventuals defalliments del material a causa de la sobrepressió generada pel fenomen de contacte.

Podem constatar també que aquest resultat és coherent amb la física del problema perquè quan més lluny de la superfície de contacte es trobarà la inhomogeneïtat, menys important serà la seua interacció amb el gradient de tensió causat pel contacte.

Ara superposarem el perfil de pressió hertzià sobre la Figura 26 per a comparar el nostre resultat numèric a l'obtingut amb la teoria d'Hertz:



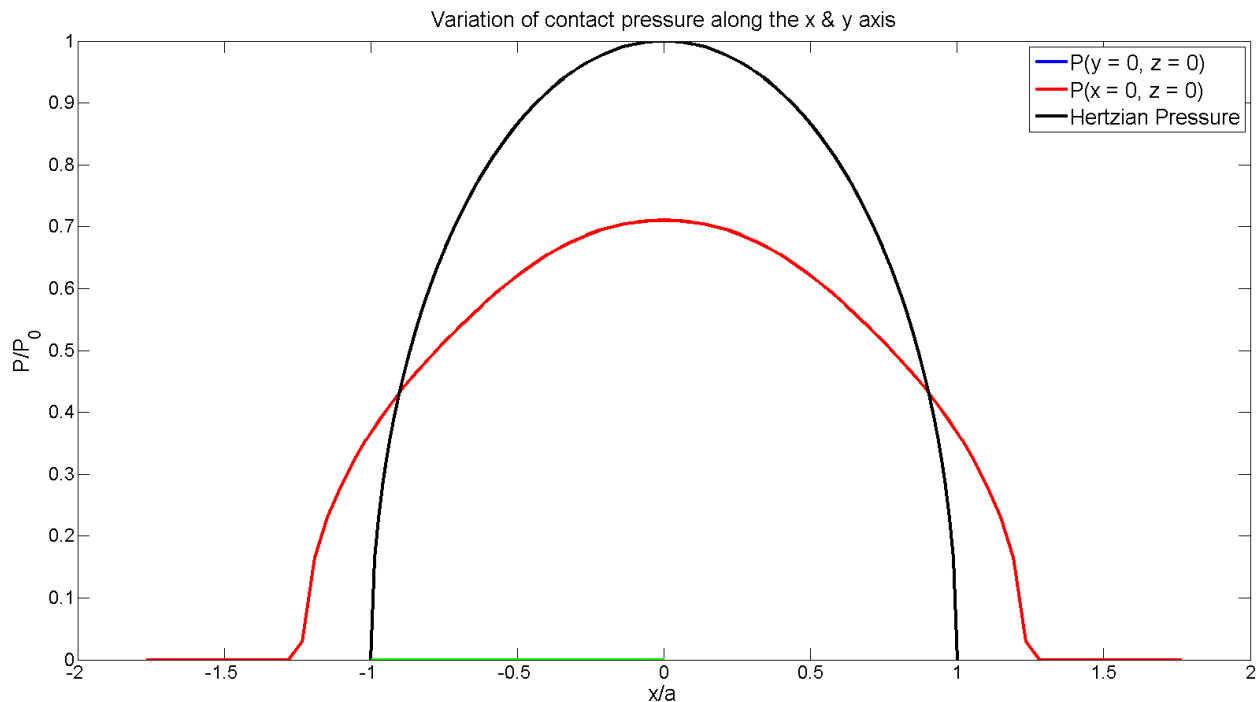


Figura 28: Pressió de contacte del Càlcul 4 (discretització  $h_x = 0,008$  mm) i perfil de pressió hertzià

Normalment, quan les inhomogeneïtats estan allunyades de la superfície de contacte, els fenòmens de sobrepressió desapareixen progressivament fins al moment en què el perfil de pressió se superposa al de la teoria d'Hertz. En aquesta Figura 25, el pic de sobrepressió observat en el cas d'estudi 2 (cas precedent) ja no està present perquè la inhomogeneïtat ha sigut desplaçada  $80 \mu\text{m}$  en profunditat però el perfil de pressió no coincideix encara amb l'obtingut amb la teoria hertziana. Açò es deu al fet que encara que la profunditat de la inhomogeneïtat és més gran que la del segon cas d'estudi, la inhomogeneïtat continua jugant una certa influència sobre la superfície de contacte. En [Ler13], pàgines 79 i 80, s'indica que quan la profunditat de la inhomogeneïtat  $z/r > 3$  (on "r" representa la semigrandària de la inhomogeneïtat), la influència d'aquesta sobre la superfície és insignificant, la qual cosa no és veritat en els resultats que acabem de presentar. Aquesta diferència resideix en el fet que, en el nostre cas d'estudi, hem considerat una inclusió equivalent de grandària conseqüent respecte de la longitud de contacte:  $r/a = 0,55$ ; on "r" representa la semigrandària de la inhomogeneïtat i "a" el radi de contacte hertzià. Encara que la raó  $r/a$  no està donada en les simulacions efectuades per Leroux, el seu director de tesi ens ha confirmat que en les nostres simulacions hem definit una inhomogeneïtat més gran que les definides durant les simulacions de la tesi de Leroux [Ler13]. Com que la nostra inclusió és doncs més massiva que la considerada en les simulacions de [Ler13], la seua zona d'influència és també més gran i llavors, la profunditat a partir de la qual els seus efectes no seran significatius sobre la superfície de contacte és també més important que la predita per la regla  $z/r > 3$ . Cal assenyalar, finalment, que com que el perfil de pressió obtingut a través de les simulacions numèriques està més aplatat que el valor màxim de pressió predit per la teoria d'Hertz, és lògic trobar una longitud de contacte més gran que la de la teoria hertziana, ja que a isovalor de força aplicada, si la pressió causada pel contacte és més feble, açò implica necessàriament que la superfície de contacte és més important.

En la Figura 27, hem superposat diversos perfils de pressió obtinguts en fer variar la profunditat de la inhomogeneïtat i ens adonem que a mesura que la inhomogeneïtat està lluny de la superfície de contacte, el valor màxim del perfil de pressió tendeix aproximadament cap a un valor de pressió de l'ordre de  $0,6 \cdot P_0$ . Com a conseqüència, podem afirmar que encara que a partir de  $z/r = 2,8$  l'efecte de sobrepressió ja no és visible, la influència de la inhomogeneïtat no és nul·la perquè el perfil de pressió no se superposa amb el perfil de la teoria d'Hertz. Podem concloure així que per a trobar aquest perfil de pressió hertzià, s'hauria d'haver incrementat encara més la profunditat de la inhomogeneïtat. Açò obliga doncs a augmentar el domini geomètric de l'estudi, la qual cosa es tradueix en un augment del nombre de punts de càlcul. Amb els microordinadors (ordinadors portàtils / ordinadors de torre) actuals, no podem sobrepassar enormement el límit de 100 punts de càlcul en cada direcció de l'espai. A partir d'aquest límit, serà necessari utilitzar un clúster de càlcul. Per a realitzar simulacions (amb la definició retinguda en aquest tercer cas d'estudi) amb inhomogeneïtats situades a profunditats superiors a  $z/r = 5$ , cal doncs tenir accés a un clúster de càlcul. Com que no teníem accés a cap clúster, els estudis paramètrics no eren l'objectiu principal d'aquest treball i, de totes maneres, coneixíem a priori els resultats que obtindríem, hem decidit aturar en aquest estadi el tercer cas d'estudi.

### 7.1.4) Estudi paramètric. Influència de la grandària de la inhomogeneïtat respecte del radi de contacte

En els tres casos d'estudi anteriors, hem assumit la hipòtesi que les deformacions d'incompatibilitat de la inhomogeneïtat (eigenstrains) són constants a l'interior d'aquesta mateixa inhomogeneïtat, hipòtesi raonable quan les inhomogeneïtats són petites comparades amb la zona de contacte. En aquests casos, atesa la feble grandària de les inhomogeneïtats, el fet d'haver considerat que l'expressió de les eigenstrains roman constant no és un error ja que les variacions de deformació són insignificants. Però des que la grandària de la inhomogeneïtat serà considerable, aquestes variacions de les eigenstrains no podran ser obviades. Per tant, recorrent a continuació a la tècnica de voxelització per a determinar si aquesta aporta més precisió als resultats obtinguts per a un problema de contacte la definició del qual és la següent:

Càlcul 5: Mallatge Refinat. Voxelització	
Propietats Geomètriques	
- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z):	91
- Pas de mallatge:	0,008 mm
- Tipus de contacte:	esfera-pla
Propietats de les Inhomogeneïtats	
- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)	
- Centre de la inhomogeneïtat:	(0 ; 0 ; 0,2) mm
- Grandària de la inhomogeneïtat:	(0,1 ; 0,1 ; 0,1) mm
- Orientació de la inhomogeneïtat:	(0, 0, 0) rad
- Mòdul de Young: E =	500 GPa
- Coeficient de Poisson: $\nu$ =	0,3
- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains:	0
- Nombre d'inclusions voxelitzades:	2197
- Grandària de cada inhomogeneïtat voxelitzada:	(0,004 ; 0,004 ; 0,004) mm
- Tipus d'inclusió:	cúbica
Tipus de Contacte	
- Força Normal Imposada	
- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)	
Càrrega	
- Força normal:	50 N
Materials	
- Mòdul de Young indentador: $E_1$ =	114,6 GPa
- Coef. de Poisson indentador: $\nu_1$ =	0,3
- Mòdul de Young indentat: $E_2$ =	114,6 GPa
- Coef. de Poisson indentat: $\nu_2$ =	0,3
Algoritme de resolució	
Mètode de Wang	
Paràmetres del contacte d'Hertz	
- Radi del contacte hertzià: a =	0,1813 mm
- Pressió d'Hertz màxima: $P_0$ =	726,607 MPa

Taula 4: Resum del parametratge del càlcul 5 del quart cas d'estudi

Ací mostrem una representació de la inhomogeneïtat voxelitzada on els punts verds designen els centres de cadascuna de les petites inclusions elementals (és a dir, els punts de càlcul), la suma dels quals recobreix tot el domini de la gran inhomogeneïtat. Les línies blaves dibuixen el contorn d'aquesta gran inhomogeneïtat.

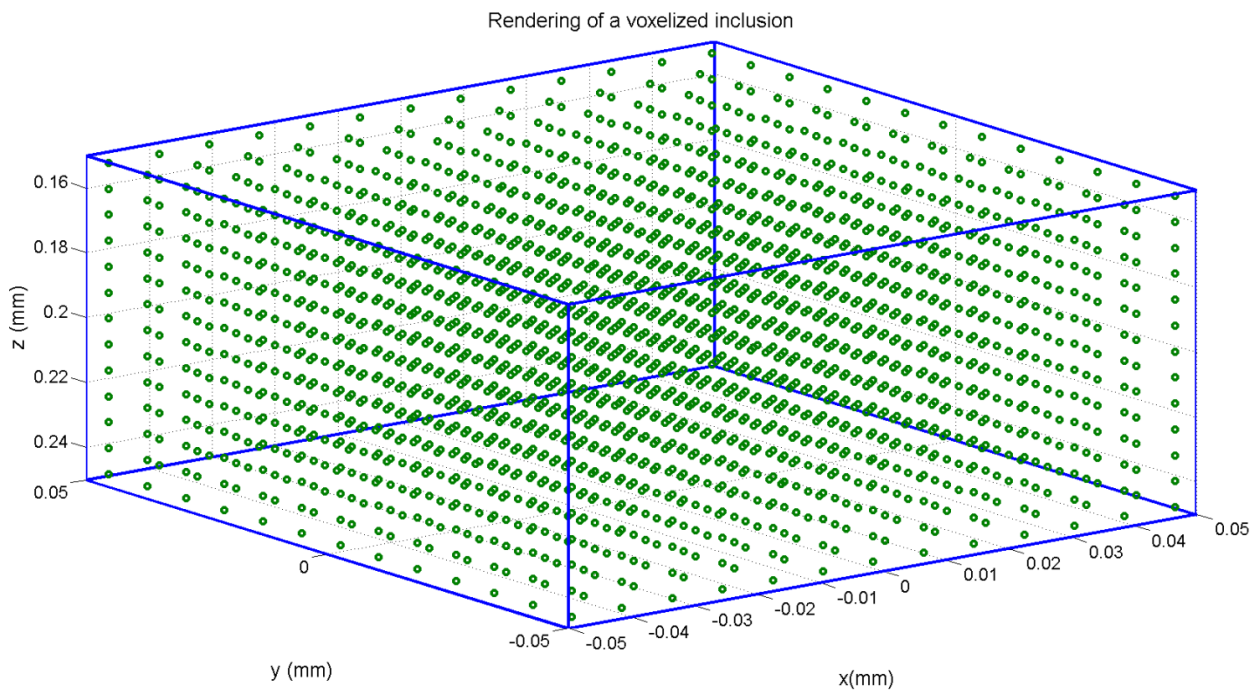


Figura 29: Representació d'una inhomogeneïtat voxelitzada

Després d'haver realitzat el càlcul que permet resoldre el problema de contacte en el qual el material indentat presenta la inhomogeneïtat de la Figura 29, hem trobat el següent perfil de pressió de contacte:

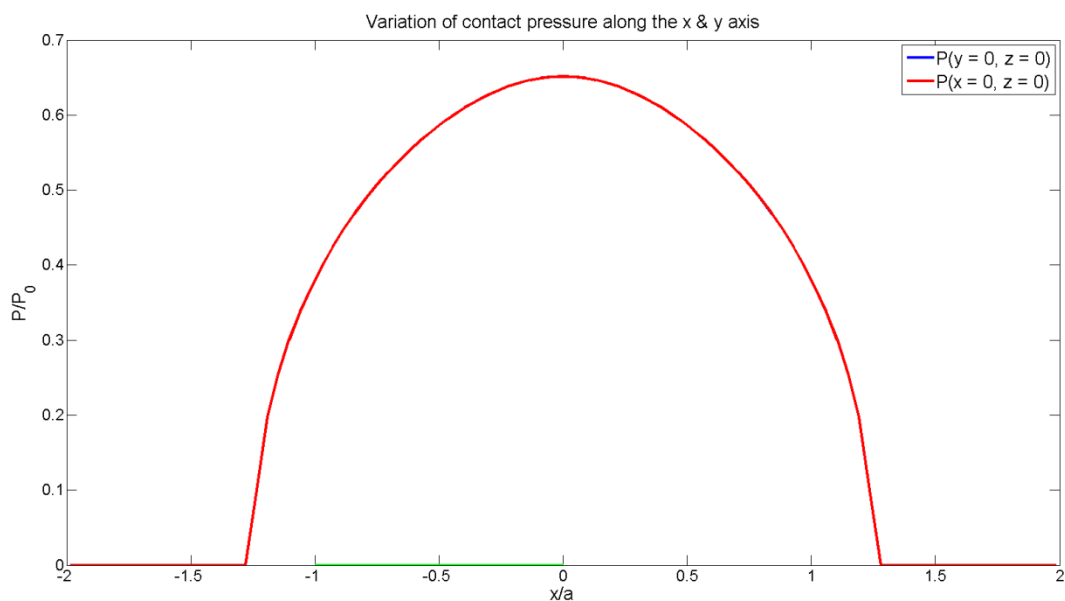


Figura 30: Pressió de contacte del Càlcul 5 (discretització  $h_x = 0,008$  mm)

En aquesta configuració, la relació de grandària entre el radi de contacte “a” i la semilargària “L” de la inhomogeneïtat és:  $\frac{a}{L} = 4,5$ .

Per a comparar aquest resultat amb l’obtingut en el tercer cas d’estudi, hem refet el cas d’estudi 3 però amb una inhomogeneïtat de grandària (0,1; 0,1; 0,1) mm per a comparar el perfil de pressió obtingut per a dues inhomogeneïtats idèntiques. Seguidament, hem superposat els valors de pressió que corresponen a una estimació de les eigenstrains constants a l’interior de l’heterogeneïtat i d’una gran heterogeneïtat voxelitzada, per a poder descriure les fluctuacions de les deformacions inelàstiques dins de la inhomogeneïtat:

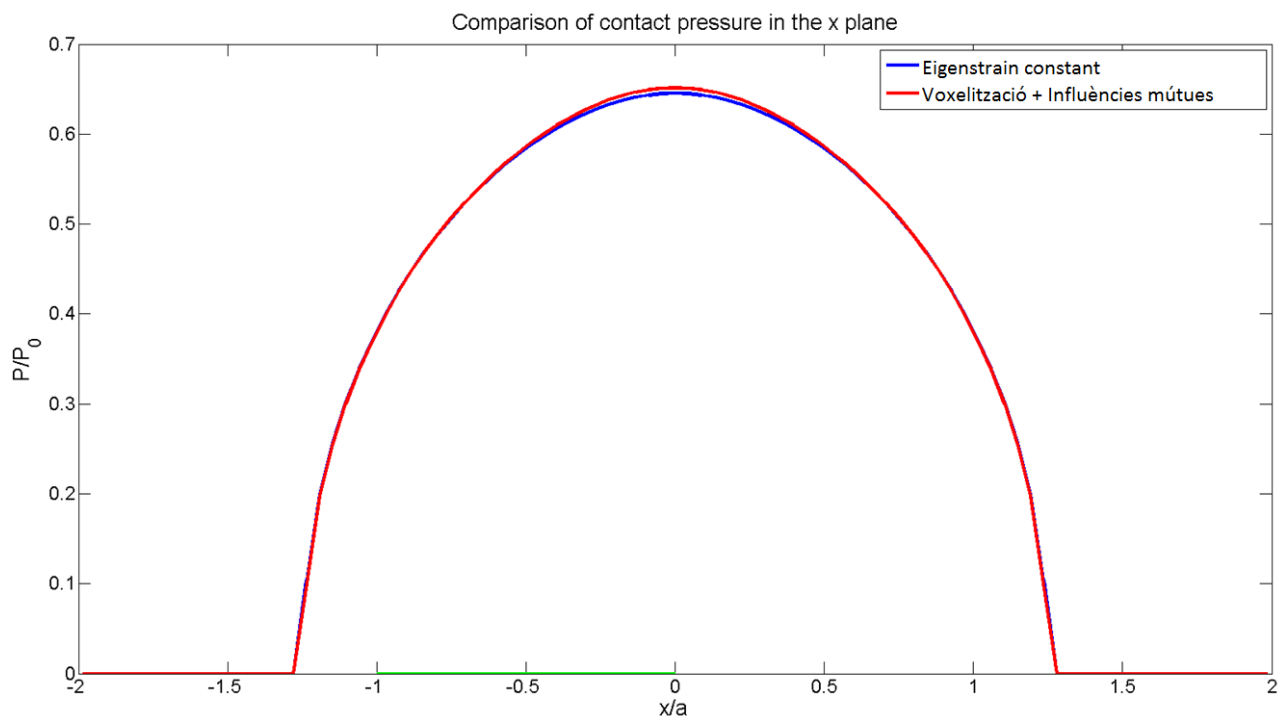


Figura 31: Superposició del perfil de pressió de la simulació amb consideració de les variacions de les eigenstrains i de les influències mútues en una mateixa inhomogeneïtat i del perfil de pressió de la simulació sense considerar la fluctuació de les eigenstrains

Per tant, podem concloure que hem comés un error relatiu màxim de l’ordre de 0,006 (als pics dels perfils de pressió) a causa d’haver considerat que les eigenstrains eren constants en tot l’interior de la inhomogeneïtat. Encara que l’error de precisió entre aquests dos perfils no és molt important, cal assenyalar que si la inhomogeneïtat haguera sigut més gran en comparació al radi de contacte, hauria sigut necessari no considerar les eigenstrains com si foren constants. De totes maneres, en aquestes simulacions, hem voxelitzat la gran inhomogeneïtat però, a més, hem tingut compte de les influències mútues entre les diferents inclusions elementals per a poder descriure les eventuais interaccions que existeixen entre cadascuna d’aquestes inclusions elementals. Per això, no sabem si la diferència entre les gràfiques és conseqüència de la voxelització o de la consideració de les influències mútues. Per a pal·liar aquest problema, hem realitzat una simulació suplementària amb la mateixa definició però sense considerar les influències mútues. El resultat que hem trobat és el següent:

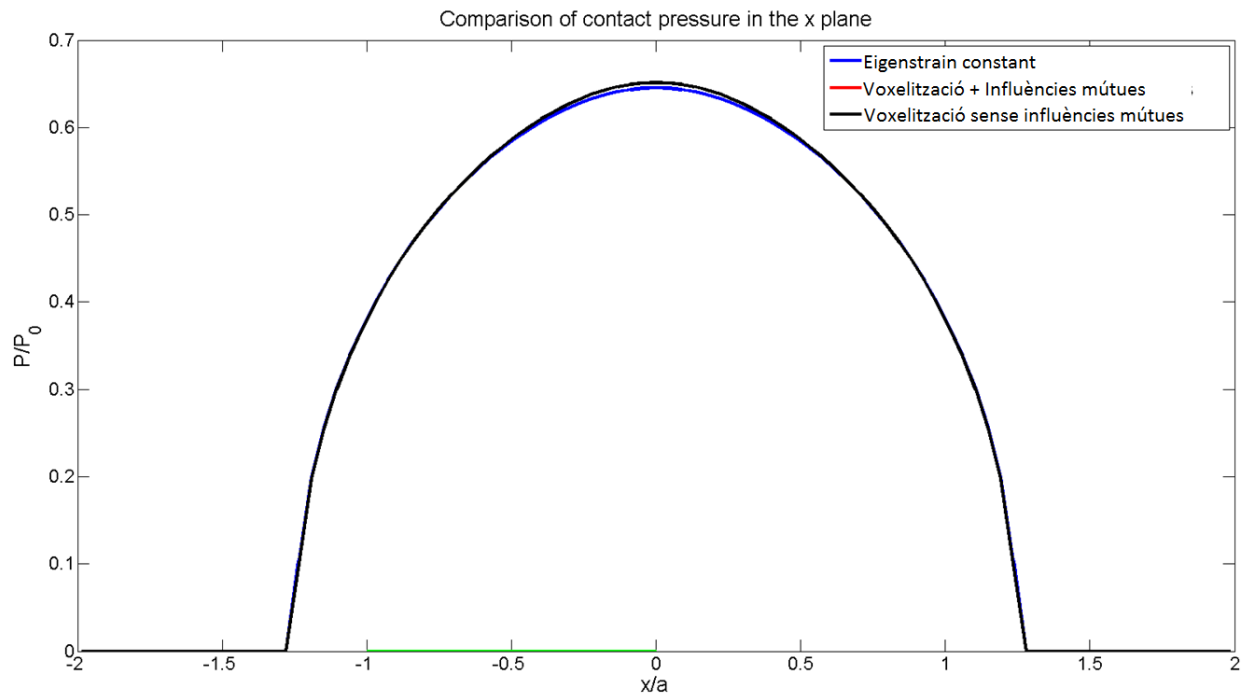


Figura 32: Superposició del perfil de pressió de la simulació considerant les variacions de les eigenstrains i de les influències mútues en una mateixa inhomogeneïtat, del perfil de pressió de la simulació sense considerar la fluctuació de les eigenstrains i del perfil de pressió de la simulació amb voxelització però sense considerar les influències mútues

Per tant, ens adonem que la corba negra, que correspon al cas que té en compte la voxelització però no les influències mútues, està completament superposada a la corba roja que considera la voxelització i les influències mútues. Açò significa que les influències mútues no juguen cap paper sobre les diferències existents entre les diferents simulacions. En altres paraules, les diferències observades entre les corbes es deuen exclusivament a la tècnica de voxelització que permet traduir les fluctuacions d'eigenstrain i que presenta doncs un cert impacte sobre la forma de la distribució de la pressió de contacte.

L'altra possibilitat per a realitzar aquest estudi comparatiu és d'estendre la formulació de les eigenstrains a un polinomi d'ordre 1 o 2. Aquest desenvolupament polinomial està implementat també en el codi de càlcul ISAAC. No obstant això, pel que fa al raonament físic, les conclusions a què es poden arribar són les mateixes que si utilitzàrem la tècnica de voxelització. Aleshores, hem decidit no refer el mateix tipus de simulacions.

### 7.1.5) Conclusió global dels estudis paramètrics

Per a sintetitzar els diferents resultats de simulació obtinguts en els estudis paramètrics, presentem a continuació tres figures que representen camps de tensió de Von Mises:

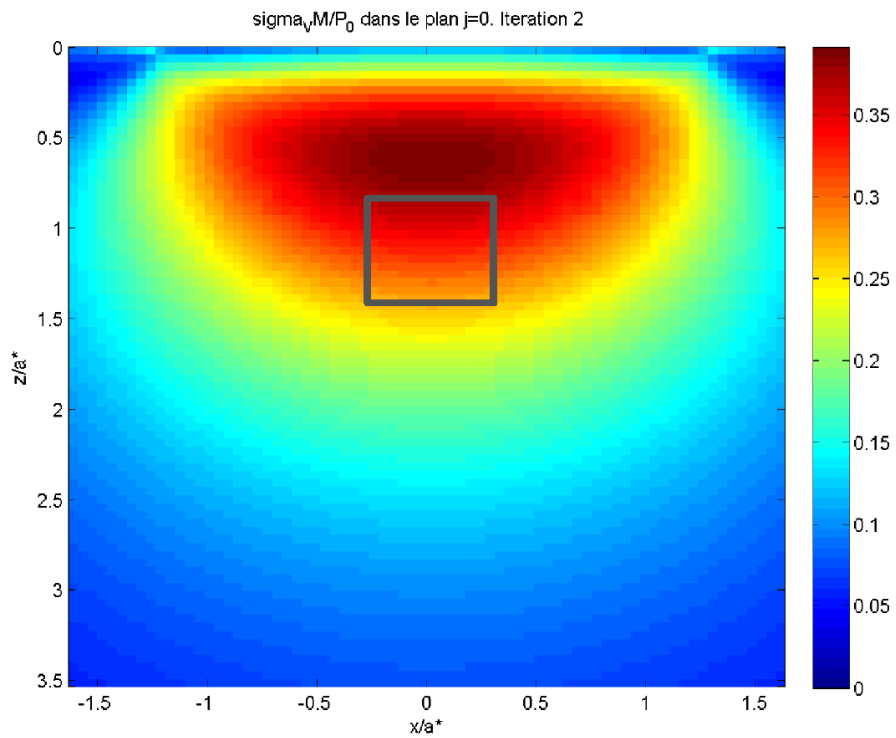


Figura 33: Tensió de Von Mises. Teoria d'Hertz. Inhomogeneïtat superposada

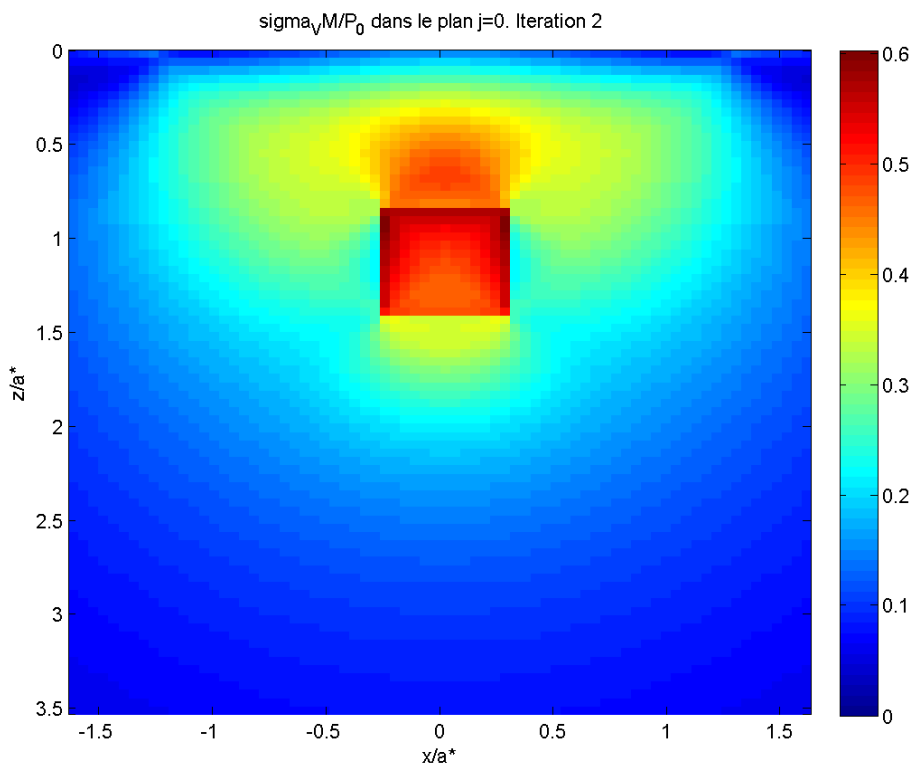


Figura 34: Tensió de Von Mises. Teoria d'Eshelby clàssica: eigenstrain constant

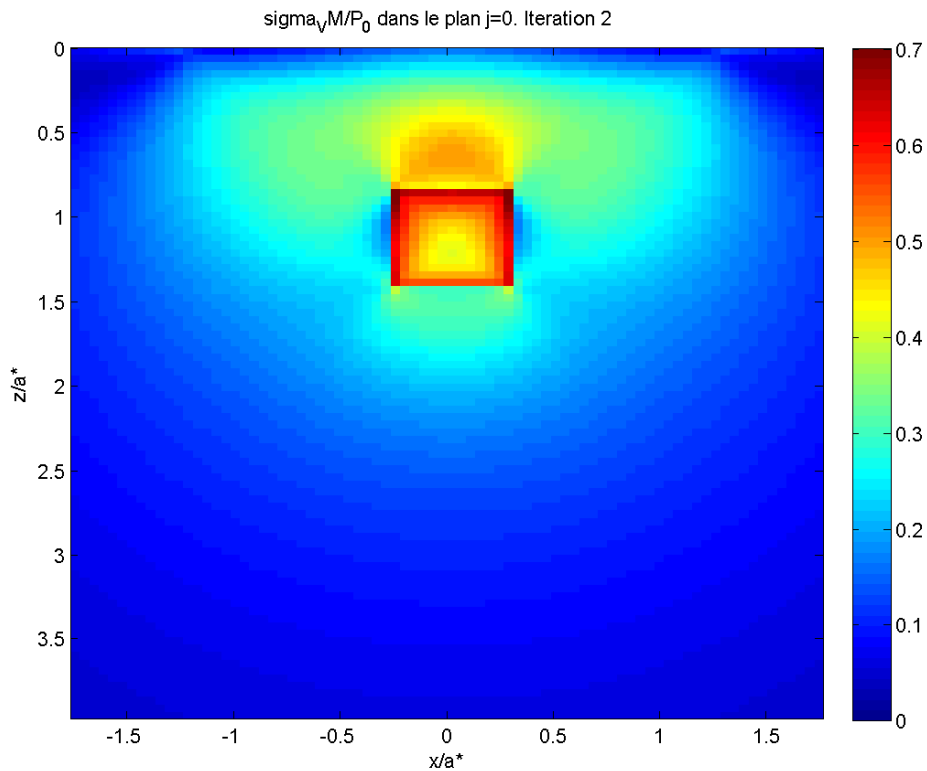


Figura 35: Tensió de Von Mises. Voxelització + Influències mútues

Primerament, podem constatar gràcies a la Figura 34 i Figura 35, la importància de tenir en compte les fluctuacions de deformació a l'interior de les inhomogeneïtats, especialment quan la grandària de les dites inhomogeneïtats és conseqüent en comparació amb la zona de contacte. Encara que aquestes fluctuacions no tenien molta influència sobre el perfil de pressió, com ho hem pogut observar en el quart cas d'estudi, els efectes sobre la distribució de tensió de Von Mises són de tota manera destacables. En la Figura 35, podem observar aquests efectes obtinguts després d'aplicar la voxelització i la consideració de les influències mútues. Comparant aquest camp de tensió a l'obtingut en la Figura 34, on s'ha considerat la teoria d'Eshelby clàssica (eigenstrain constant a l'interior de la inhomogeneïtat), podem adonar-nos de l'interès de descriure les fluctuacions de deformació per a traduir un estat elàstic de la inhomogeneïtat més pròxim de la realitat física. El fet de voxelitzar la inhomogeneïtat ens permet predir, per exemple, quines són les zones d'aquesta que es troben sotmeses a tensions importants i que són doncs susceptibles d'iniciar fissures i provocar així el defalliment d'una peça.

D'altra banda, la Figura 33 en permet comprendre les limitacions de la teoria d'Eshelby clàssica. Aquesta figura representa el camp de tensió de Von Mises obtingut en el cas de la teoria d'Hertz sobre el qual, hem superposat manualment el contorn de la mateixa inhomogeneïtat considerada en la Figura 34 i Figura 35. D'aquesta manera, podem constatar que quan més gran serà la inhomogeneïtat, més susceptible serà de trobar-se en una zona de fort gradient de tensió, la qual cosa posa en qüestió la utilització de la teoria d'Eshelby clàssica per a problemes relacionats amb la mecànica de contactes. Per això, només s'utilitzarà aquesta teoria quan la grandària de la inhomogeneïtat serà feble en comparació amb la zona de contacte o quan estarà sotmesa a sol·licitacions uniformes.

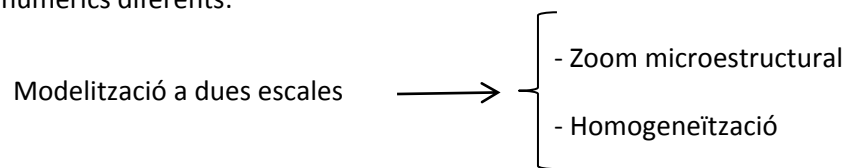


## 7.2) Estudi dels medis heterogenis

L'objectiu d'aquest treball és de caracteritzar l'estat de tensió i deformació al voltant de les inhomogeneïtats en el context de la mecànica de contactes. Per a fer-ho, existeixen dues possibilitats:

1) Refinament del mallatge

2) Tractaments numèrics diferents:



El primer reflex que podem tenir per a intentar descriure acuradament l'estat elàstic d'una inhomogeneïtat és discretitzar-la finament per a disposar de diversos punts de càlcul en aquest domini espacial. Açò seria factible amb tècniques de discretització com el mètode dels elements finits, que permet refinar el mallatge localment en un subdomini que presenta un interès particular. No obstant això, aquest refinament no pot ser realitzat per ISAAC ja que la utilització de la DC-FFT (Discrete Convolution - Fast Fourier Transform) obliga a mantenir un pas de discretització constant.

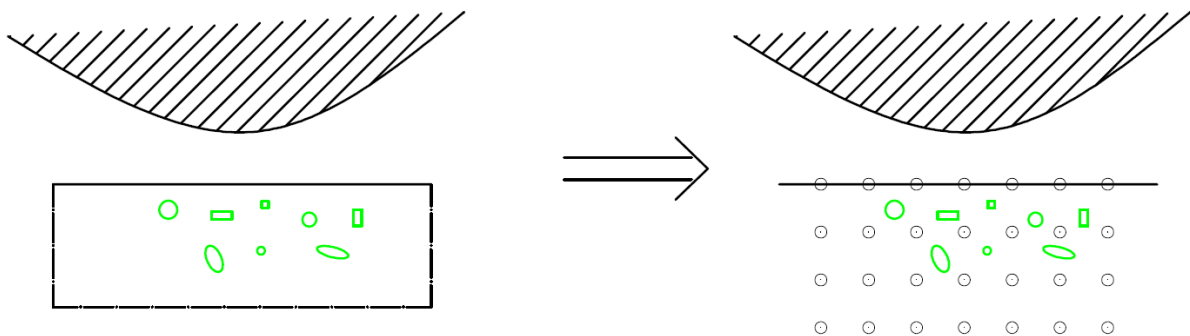


Figura 36: Inhomogeneïtats ignorades a causa d'una discretització massa grollera

A més, perquè el codi pugui tenir en compte diferents inhomogeneïtats presents en la subsuperfície del cos indentat, cal que aquestes es troben centrades sobre els punts de càlcul. Aleshores, és la grandària de la més petita inhomogeneïtat la que definirà el pas de discretització espacial a imposar. La conseqüència és que amb un pas de discretització petit i constant els temps de càlcul serien molt elevats, fet que podria fer perdre tot l'interès dels mètodes semianalítics: proporcionar resultats de bona qualitat (en termes de precisió) amb temps de càlcul més febles que els necessaris per a la realització del mateix càlcul amb el mètode dels elements finits.

Per tant, recorrerem a altres tècniques com les esmentades en l'esquema superior.

Com el seu propi nom ho indica, la tècnica de zoom microestructural està basada en la definició d'un mallatge refinat només sobre una porció del domini d'estudi original (per això aquesta operació rep el nom de zoom). Aquesta tècnica permet obtenir una descripció precisa de la tensió i la deformació en la porció del domini en qüestió però el problema és que, de totes maneres, un mallatge refinat comporta un temps de càlcul considerable. Per contra, la tècnica d'homogeneïtzació necessita la definició d'un Volum Elemental Representatiu (VER) que represente el comportament mitjà del material a l'escala microscòpica o mesoscòpica i que permetrà descriure una espècie de material homogeni equivalent. A causa d'aquestes operacions de mitjana, serà impossible quantificar amb precisió l'estat de deformació i tensió a l'interior del VER però aquesta descripció estadística permetrà determinar aquestes magnituds a l'escala macroscòpica amb un temps de càlcul inferior.

En realitat, les tècniques que utilitzarem a continuació per a estudiar els materials heterogenis combinen certs aspectes de les dues tècniques mencionades prèviament. A l'escala microscòpica, es realitzarà un refinament de la discretització espacial sobre una porció del domini per a descriure precisament el comportament de la inhomogeneïtat (anàleg a la tècnica de zoom estructural) i, a l'escala macroscòpica, els diferents cúmuls d'inhomogeneïtats presents en la subsuperfície són substituïts per comportaments equivalents que intenten traduir la realitat física del problema amb un cost computacional inferior. Aquest últim plantejament no permet doncs conèixer amb exactitud l'estat elàstic de la regió del domini que posseeix un comportament equivalent, anomenada ací metainclusió. Açò és anàleg a la tècnica d'homogeneïtzació perquè, dins del VER, no es pot conèixer amb precisió l'estat elàstic del medi estudiat. Per tant, d'ara endavant anomenarem "**modelització a dues escales**" aquesta tècnica que combina nocions de zoom estructural i d'homogeneïtzació.

En primera instància, ens hem interessat únicament a un material indentat que conté una sola inhomogeneïtat per a simplificar els anàlisis a realitzar. Més tard, no obstant això, s'estudiaran igualment els materials que contenen diverses inhomogeneïtats en la subsuperfície (és a dir, en les immediacions de la superfície).

Cal assenyalar també que, primerament, no hem estudiat problemes de contacte sinó més aviat casos basats en una descripció de tipus medi infinit per a poder discernir les variacions de les magnituds físiques associades a la precisió del mallatge d'aquelles variacions causades pels gradients de tensió en els problemes de contacte, com es pot observar en la següent gràfica:

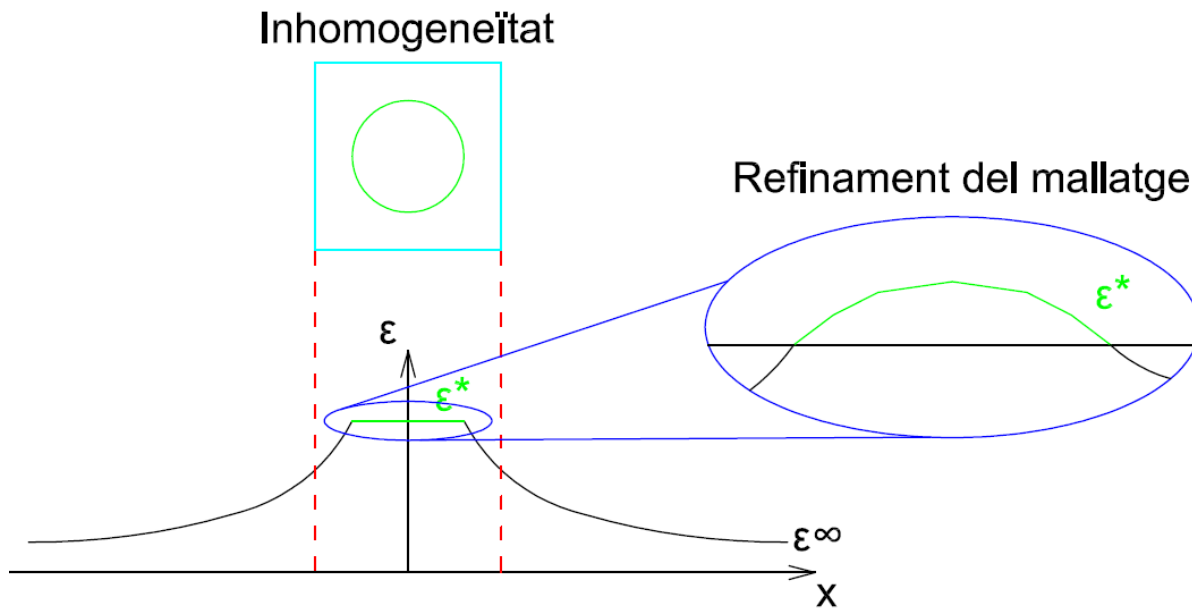


Figura 37: Efectes del refinament del mallatge sobre les eigenstrains.

Dit altrament, si estudiem un sòlid infinit sotmés a una tensió aplicada també a l'infinít (és a dir, una càrrega aplicada lluny de la inhomogeneïtat i que, per tant, és constant per tot arreu en el domini del sòlid infinit) que conté una inhomogeneïtat, l'evolució de la deformació és la mostrada ací dalt sobre la gràfica. La deformació present en la inhomogeneïtat és l'eigenstrain de la teoria d'Eshelby que tradueix les deformacions d'incompatibilitat entre el material matriu i la inhomogeneïtat. Aquesta última està representada en verd i la zona circumdant de material matriu que envolta la inhomogeneïtat en color cian en la imatge superior. Per tant, la deformació a l'interior de la inhomogeneïtat té com valor la de l'eigenstrain  $\epsilon^*$  i, fora d'aquesta inhomogeneïtat, el valor de la deformació decreix progressivament fins a abastar el valor de deformació imposada a l'infinít ( $\epsilon^\infty$ ). El fet de refinar la discretització espacial d'un problema permet passar d'un valor d'eigenstrain  $\epsilon^*$  que inicialment és constant a un valor d'eigenstrain que fluctua<sup>3</sup> (com podem observar-ho sobre la Figura 37) quan el mallatge és petit. Aquest efecte de fluctuació es manifesta també al voltant de les inhomogeneïtats quan existeix un gradient de tensió com a conseqüència d'un fenomen de contacte. Com que tractarem problemes que combinen diferents escales de descripció del comportament de la matèria, és necessari realitzar operacions de refinament i desrefinament successives de les magnituds físiques entre els diferents canvis d'escala. Primerament, ens interessarem a aquest

<sup>3</sup> La teoria d'Eshelby proposa que hem de considerar qualsevol inhomogeneïtat com un problema d'inclusió equivalent i, llavors, afegir la contribució de les deformacions d'incompatibilitat (eigenstrains) a l'estat de deformació de la inhomogeneïtat. En la teoria d'Eshelby, aquestes eigenstrains són constants encara que la discretització estiga refinada. No obstant això, quan les inhomogeneïtats tenen una grandària important o estan sotmeses a gradients de tensió, aquesta aproximació d'eigenstrain constant és falsa perquè existiran evolucions de deformació a l'interior de la inclusió. Per a pal·liar aquesta limitació de la formulació original, les expressions de les eigenstrains han sigut desenvolupades al 1r i 2n ordre polinomial (o voxelitzades) per a poder tenir en compte les fluctuacions de deformació. Per això, encara que en la teoria original el valor de l'eigenstrain és constant, sobre la Figura 37, podem observar fluctuacions de l'eigenstrain causades pel refinament del mallatge

tipus d'operacions per a una configuració d'estudi que presenta una sola inclusió en la subsuperfície i en absència de gradient de tensió. Aleshores, com ho hem precisat durant els estudis paramètrics, no és el contacte el que pilota la densitat de mallatge sinó que és la microestructura del cos indentat el que ho fa. Per a ser capaços de distingir doncs entre les fluctuacions de deformació causades pel refinament del mallatge exigít per la microestructura i les fluctuacions causades per la mecànica de contactes, hem decidit considerar només els efectes de fluctuació causats pel refinament del mallatge en primera instància ja que són aquestes les que dicten el pas de discretització espacial a definir. A més el fet de no tenir en compte inicialment el contacte permet realitzar estudis més simples, la qual cosa facilitarà també la implementació de la modelització multiescala en ISAAC. Posteriorment, tindrem en compte els fenòmens de contacte perquè, finalment, l'objectiu d'aquest treball és de caracteritzar l'estat elàstic al voltant d'una inhomogeneïtat quan un gradient de tensió està present.

Per tant, les directrius generals de treball que seguirem en aquest estudi dels medis heterogenis buscaran establir una modelització multiescala primer per a sòlids que contenen una sola inhomogeneïtat en la subsuperfície i sense fenomen de contacte. Progressivament, quan es podrà jutjar que la modelització serà satisfactòria, introduïrem diverses inhomogeneïtats en el cos indentat i finalment els problemes de contacte.

### 7.2.1) Modificació del codi ISAAC. Implementació del canvi d'escala

La versió estàndard del codi d'investigació ISAAC no permet, actualment, realitzar càlculs combinant diferents escales de descripció de la matèria ni càlculs utilitzant el formalisme dels medis infinits (ja que es tracta d'un codi dedicat als contactes). Per tant, caldrà aportar certes modificacions al codi de càlcul per a poder implementar els canvis d'escala. Per a fer-ho, ens hem inspirat dels treballs realitzats prèviament per Simon Le Moal [LeM14] durant el seu Treball Fi de Màster que tractava sobre la modelització de fissures en sòlids semiinfinits amb mètodes semianalítics. En el seu treball, va implementar el codi necessari per a poder determinar l'estat de tensió i deformació al voltant d'una inhomogeneïtat en els medis infinits modificant el mètode de Chiu que ja estava predefinit en el codi. Com a recordatori, aquest mètode de Chiu està basat en la descomposició del problema en tres subproblemes a través del principi de superposició i la utilització de les formulacions infinites dels medis. D'aquesta manera, l'esmentat mètode proposa el càlcul de l'eigenstrain d'una espècie d'inclusió espill idèntica a l'eigenstrain de la inclusió en la subsuperfície del material indentat per a crear així el semiespai de treball per a sostraure, a continuació, el camp de pressió sobre la superfície lliure. La modificació que Simon Le Moal va aportar al codi va consistir en igualar a zero l'eigenstrain de la inclusió espill per a evitar la creació de la superfície lliure i, llavors, poder treballar en un medi infinit.

Hem utilitzat la versió de codi de Simon Le Moal per a implementar els canvis d'escala.

Actualment, ISAAC treballa només amb una descripció a l'escala macroscòpica. Aleshores, per a poder realitzar el canvi d'escala hem fet dues còpies del codi de Simon Le Moal, una que, d'ara endavant, anomenarem "Codi Macroscòpic" i una altra "Codi Microscòpic".

El principi de funcionament del codi és l'esquematzat en la següent figura:

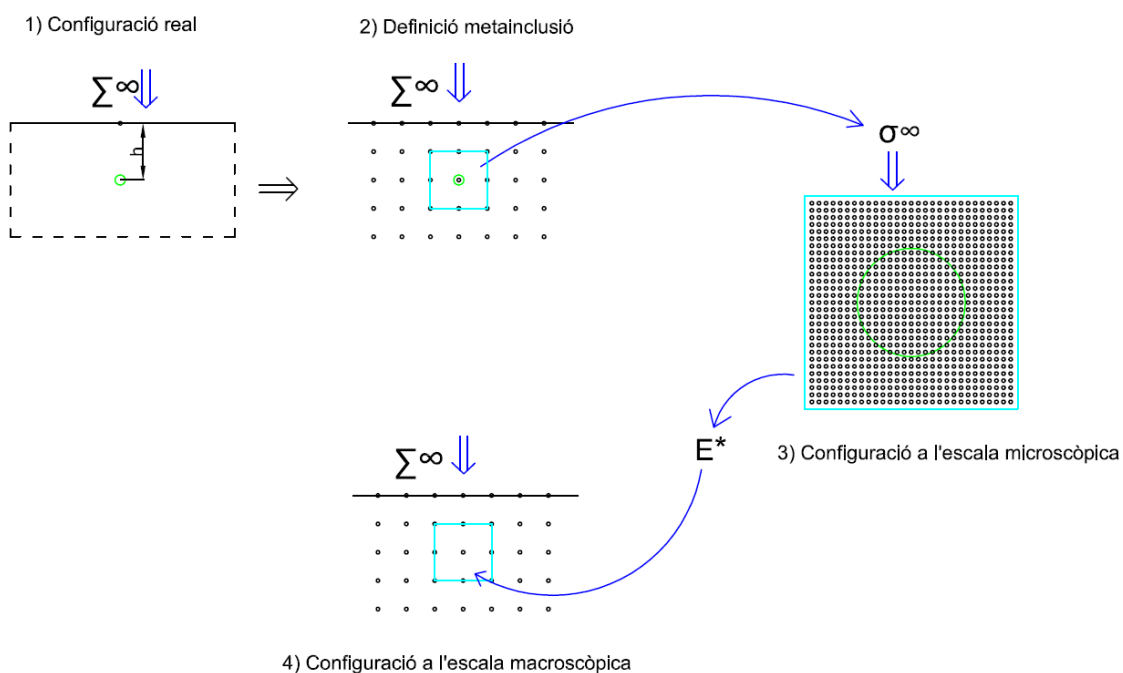


Figura 38: Representació esquemàtica del principi de funcionament del codi ISAAC per a càlculs multiscales amb la tècnica de zoom microestructural

### Etapa 1) Configuració real

En primer lloc, es defineix la configuració real de l'estudi: un espai semiinfinit que conté una inhomogeneïtat i sobre el qual s'aplica la sol·licitació exercida. A l'escala macroscòpica, la tensió és representada per la variable  $\Sigma$ .

Com a recordatori, no es tenen en compte els fenòmens de contacte en aquests primers càlculs.

### Etapa 2) Definició de la metainclusió

En aquesta etapa es defineix a l'escala macroscòpica el pas de discretització espacial i un volum de treball al voltant de la inhomogeneïtat, que rebrà a partir d'ara el nom de metainclusió. Les seues dimensions han sigut escollides com les d'un pas de discretització al voltant de la inhomogeneïtat en qüestió.

### Etapa 3) Configuració a l'etapa microscòpica

En aquesta etapa, només es considera el volum de matèria comprés en la metainclusió. En aquest domini, es procedirà a realitzar una discretització espacial molt fina amb l'objectiu de poder descriure de manera acurada l'estat de tensions i deformacions. Com sortida d'aquesta etapa de càlcul, es desitja obtenir l'eigenstrain a l'escala macroscòpica que siga capaç de representar amb precisió la microestructura present a l'interior de la metainclusió. D'aquesta manera, es pretén determinar doncs una mena de comportament equivalent per a injectar, posteriorment, aquesta magnitud en el punt central de la metainclusió a l'escala macroscòpica (etapa 4).

Cal assenyalar que en aquests estudis, l'eigenstrain tindrà un valor constant perquè hem decidit no desenvolupar l'expressió de les eigenstrains a polinomis d'ordre 1 o 2.

### Etapa 4) Configuració a l'etapa macroscòpica

En aquest últim pas de l'algoritme, s'injecta el valor d'eigenstrain calculat en l'etapa anterior en el punt central de la metainclusió a l'escala macroscòpica per tal de tenir en compte tota l'anisotropia present en el volum de la metainclusió i poder resoldre el problema a l'escala macroscòpica sense perdre detall de l'anisotropia (gràcies al zoom local de l'etapa precedent) però aconseguint reduir el cost computacional.

Caldrà comprovar si el nivell de tensió obtingut és el mateix sobre les dues descripcions (microscòpica i macroscòpica).

Una vegada que el funcionament global del nostre algoritme de càlcul ha sigut explicat, en la continuació d'aquesta memòria, comentarem ràpidament els diferents plantejaments que s'han considerat en ordre cronològic per a abordar el problema multiescala però que finalment han sigut abandonats. Igualment, exposarem la modelització retinguda finalment així com els algoritmes dels mòduls de càlcul definits a l'escala microscòpica i macroscòpica.

## 7.2.2) Progressió en la modelització multiescala

### 7.2.2.1) Desenvolupament del zoom microestructural

Una discretització espacial que presenta dos mallatges diferents en regions espacials complementàries (és a dir mallatges diferents imbricats l'un dins de l'altre) és la situació a la qual ens interessem a continuació per al desenvolupament del zoom microestructural. Cal assenyalar també que molts desenvolupaments sobre zooms microestructurals han sigut realitzats per al mètode dels elements finits però no per als mètodes semianalítics. Presentarem succintament aquesta tècnica de zoom i tractarem sobre la seua adaptabilitat als mètodes semianalítics.

L'objectiu d'aquesta tècnica de zoom es basa en la definició d'un operador algebraic de transferència per a projectar geomètricament un camp físic sobre un mallatge. Quan el camp a transferir està basat sobre els nodes del mallatge, la interpolació del camp a través de les funcions de forma dels elements finits és possible. No obstant això, quan la informació és emmagatzemada als punts d'integració (tensió, deformació i variables internes per a anàlisis estructurals no lineals), la situació no resulta tan evident. En el cas estudiat, la transferència de les magnituds físiques hauria de fer-se primerament partint d'un mallatge groller cap a un mallatge refinat i en una segona etapa, aquest recorregut hauria de realitzar-se a l'inrevés. El detall de la formulació dels operadors de transferència es pot trobar en [Dur06].

L'elecció de l'operador de transferència no és arbitrària sinó que ha de ser triat de manera que l'energia entre els dos mallatges siga conservada i el "patch test" verificat. El patch test fa al·lusió a la transmissió apropiada d'un camp perquè aquest pugui ser representat amb precisió sobre els dos mallatges.

Però, el fet d'utilitzar mètodes semianalítics amb transformades de Fourier discretes per al càlcul de les funcions de Green, no ens permet emprar el mateix formalisme matemàtic proposat en [Dur06]. Per tant, no podem definir els operadors de projecció que permeten transferir els camps entre els diferents mallatges.

Com a conseqüència, abandonarem aquest plantejament de zoom estructural ja que finalment no és extensible als mètodes semianalítics.

### 7.2.2.2) Utilització de la deformació total microscòpica mitjana

En la primera modelització que hem considerat, la magnitud obtinguda a l'escala microscòpica i que ha sigut transferida seguidament al càlcul macroscòpic era la deformació total mitjana sobre el domini de la metainclusió. No obstant això, ens hem adonat que aquests plantejaments no eren correctes ja que estàvem imposant un valor de tensió a respectar a l'interior de la inhomogeneïtat sense tenir en compte l'estat energètic del sistema estudiat. Com a recordatori, el nostre sistema d'estudi està compost a l'escala microscòpica per una metainclusió (o regió de treball) que conté la inhomogeneïtat i una certa quantitat de material matriu discretitzats molt finament i, a l'escala macroscòpica, el sistema està compost per la metainclusió macroscòpica on s'injecta la magnitud mitjana a l'escala microscòpica.

Posteriorment, hem optat per injectar l'eigenstrain mitjana sobre la metainclusió a l'escala microscòpica en el codi macroscòpic com en la tècnica precedent, però aquesta no respecta l'equilibri energètic. Per això, finalment, les tècniques que consisteixen en transferir tant la deformació total microscòpica mitjana com l'eigenstrain microscòpica mitjana han sigut rebutjades.

### 7.2.3) Modelització retinguda per al canvi d'escala

La modelització retinguda per a determinar, a dues escales de comportament diferents, l'estat elàstic de les inhomogeneïtats presents en un medi semiinfinit sotmés a fenòmens de contacte, es basa en l'equilibri energètic entre la descripció microscòpica i macroscòpica.

L'algoritme que hem establert busca obtenir una mateixa energia sobre el domini de la metainclusió tant en la descripció macroscòpica com en la descripció microscòpica, ja que encara que descrit a escales diferents, un mateix volum físic ha de posseir la mateixa energia. L'algoritme implementat està presentat en la Taula 5.

Ara detallarem els diferents punts de l'algoritme:

La modelització presentada en l'algoritme de la Taula 5 està basada en una hipòtesi prou restrictiva: assumim que la direcció de l'eigenstrain macroscòpic és igual a la de la mitjana de les deformacions totals a l'escala local. La raó de ser d'aquesta elecció és que per a fer coincidir l'energia continguda en la metainclusió a l'escala microscòpica i macroscòpica, hem de calcular el bon eigenstrain a l'escala macroscòpica que després de ser injectat en el codi macroscòpic ha de permetre'ns satisfer l'equilibri energètic. L'eigenstrain és un tensor d'ordre 2 simètric, és a dir, amb 6 coeficients diferents. Per tant, l'actualització de l'eigenstrain per a arribar a una configuració d'equilibri energètic resulta a priori complicat si cal modificar els sis components i seguidament ser capaços d'interpretar les variacions induïdes per aquests canvis. Per això, en un primer plantejament, suposem que el tensor de les eigenstrains pot ser descompost de manera multiplicativa com segueix:

$$\underline{\underline{E}}_{\text{macro}}^* = \alpha \cdot \underline{\underline{d}} \quad (50)$$

on  $\underline{\underline{E}}_{\text{macro}}^*$  representa l'eigenstrain a l'escala macroscòpica,  $\underline{\underline{d}}$  és el tensor de direcció de norma unitària que tradueix la hipòtesi forta que la direcció de l'eigenstrain macroscòpica és igual a la de la mitjana de les deformacions totals a l'escala local i  $\alpha$  l'escalar a ajustar per a arribar a l'equilibri energètic entre les configuracions microscòpica i macroscòpica.

Gràcies al post-tractament dels càlculs podrem concloure sobre la conveniència d'aquesta hipòtesi de descomposició multiplicativa.



### Algoritme de resolució

#### Predicció de la direcció de deformació

$$1) \quad \left\langle \underline{\underline{\varepsilon}}_{\text{micro}}^{\text{tot}} \right\rangle = \frac{1}{V} \iiint_{\Omega} \underline{\underline{\varepsilon}}_i^{\text{tot}} dV = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^n \underline{\underline{\varepsilon}}_i^{\text{tot}} \cdot v = \frac{1}{\sum_{i=1}^n v} \sum_{i=1}^n \underline{\underline{\varepsilon}}_i^{\text{tot}} \cdot v = \quad (51)$$

$$= \frac{1}{n \cdot v} \cdot v \cdot \sum_{i=1}^n \underline{\underline{\varepsilon}}_i^{\text{tot}} = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \underline{\underline{\varepsilon}}_i^{\text{tot}} \rightarrow \left\langle \underline{\underline{\varepsilon}}_{\text{micro}}^{\text{tot}} \right\rangle = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \underline{\underline{\varepsilon}}_i^{\text{tot}}$$

$$2) \quad \underline{\underline{E}}^0 = \left\langle \underline{\underline{\varepsilon}}_{\text{micro}}^{\text{tot}} \right\rangle \quad (52)$$

$$3) \quad \left\| \underline{\underline{E}}^0 \right\| = \sqrt{\underline{\underline{E}}^0 : \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{E}}^0} \quad (53)$$

$$4) \quad \underline{\underline{d}} = \frac{1}{\left\| \underline{\underline{E}}^0 \right\|} \underline{\underline{E}}^0 \quad (54)$$

#### Càlcul de l'energia a l'escala microscòpica

$$5) \quad W_{\text{ml}}^{\text{micro}} = \int_{\Omega} \underline{\underline{\varepsilon}}_{\text{micro}}^{\text{tot}} : \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}_{\text{micro}}^{\text{tot}} dV \quad \text{on} \quad \underline{\underline{\varepsilon}}_{\text{micro}}^{\text{tot}} = \underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\sigma}}_{\text{micro}}^{\text{tot}} \quad (55)$$

#### Càlcul analític de $\alpha$ :

$$6) \quad \alpha = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4 \cdot a \cdot c}}{2 \cdot a} \quad (56)$$

on a, b i c són escalars calculats en funció de les magnituds que intervenen en el balanç energètic

#### Càlcul de l'energia a l'escala macroscòpica

$$7) \quad W_{\text{ml}}^{\text{macro}} = \int_{\Omega} \underline{\underline{E}}_{\text{macro}}^{\text{tot}} : \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{E}}_{\text{macro}}^{\text{tot}} dV \quad (57)$$

$$\begin{aligned} \text{on} \quad \underline{\underline{E}}_{\text{macro}}^{\text{tot}} &= \underline{\underline{E}}_{\text{macro}}^{\infty} + \underline{\underline{E}}_{\text{macro}}^{\text{acomodació}} = \underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\Sigma}}_{\text{macro}}^{\infty} + \underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\Sigma}}_{\text{macro}}^{\text{acomodació}} = \\ &= \underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{\Sigma}}_{\text{macro}}^{\infty} + \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{E}}_{\text{macro}}^* \right) \quad \text{on} \quad \underline{\underline{E}}_{\text{macro}}^* = \alpha \cdot \underline{\underline{d}} \end{aligned}$$

#### Verificació de l'equilibri energètic

$$8) \quad r = \frac{\left| W_{\text{ml}}^{\text{micro}} - W_{\text{ml}}^{\text{macro}} \right|}{W_{\text{ml}}^{\text{micro}}} \quad (58)$$

Taula 5: Algoritme de modelització multiscala basat en l'equilibri energètic a l'escala microscòpica i macroscòpica

### Predicció de la direcció de deformació

El punt 1) defineix la mitjana de la deformació total  $\underline{\underline{\varepsilon}}_{\text{micro}}^{\text{tot}}$  a l'escala microscòpica. Aquesta mitjana  $\langle \underline{\underline{\varepsilon}}_{\text{micro}}^{\text{tot}} \rangle$  serà anomenada  $\underline{\underline{E}}^0$  (punt 2) a partir d'ara i serà utilitzada per a definir el tensor de direcció  $\underline{\underline{d}}$ . En el punt 3), definim la norma energètica del tensor  $\underline{\underline{E}}^0$ , és a dir, del tensor de deformació total mitjana a l'escala microscòpica. La norma d'un tensor qualsevol  $\underline{\underline{T}}$  de segon ordre, també coneguda com norma de Frobenius [Cha12], està definida com:

$$\|\underline{\underline{T}}\| = \sqrt{\underline{\underline{T}}:\underline{\underline{T}}} \quad (59)$$

No obstant això, com que ens basem sobre criteris energètics per a la definició del nostre algoritme a dues escales, preferim utilitzar la norma energètica:

$$\|\underline{\underline{T}}\| = \sqrt{\underline{\underline{T}}:\underline{\underline{C}}:\underline{\underline{T}}} \quad (60)$$

D'aquesta manera, es pot determinar el tensor  $\underline{\underline{d}}$  en l'etapa 4).

### Càlcul de l'energia a l'escala microscòpica

En l'etapa 5), calculem l'energia continguda en la metainclusió a l'escala microscòpica gràcies al tensor de deformació total a l'escala microscòpica  $\underline{\underline{\varepsilon}}_{\text{micro}}^{\text{tot}}$  i al tensor de comportament elàstic  $\underline{\underline{C}}$  del material matriu. Encara que coexistisquen dues regions espacials en la zona de treball, la metainclusió, a priori amb propietats mecàniques diferents, el fet d'utilitzar la teoria d'Eshelby ens evita haver de canviar entre els tensors de comportament del material matriu i el de la heterogeneïtat i, per tant, només cal considerar les propietats mecàniques de la matriu en la metainclusió però tenint en compte les interaccions entre la matriu i la inclusió gràcies al tensor de les eigenstrains. La tensió  $\underline{\underline{\sigma}}_{\text{micro}}^{\text{tot}}$  és obtinguda directament pel codi ISAAC, una vegada que s'ha resolt el problema de contacte. Aquest valor d'energia a l'escala microscòpica serà el nostre valor de referència perquè està determinada amb un gran nombre de punts de càlcul i serà doncs el valor a abastar per la variable  $W_{\text{ml}}^{\text{macro}}$  (energia a l'escala macroscòpica) per a satisfer l'equilibri energètic.

### Càlcul analític de $\alpha$

El càlcul del coeficient  $\alpha$ , introduït en la descomposició multiplicativa del tensor d'eigenstrain  $\underline{\underline{E}}_{\text{macro}}^*$  a l'escala macroscòpica, és realitzat analíticament en l'etapa 6). Seguidament, detallarem les expressions dels coeficients a, b i c obtinguts en desenvolupar l'equilibri energètic entre la configuració macroscòpica i microscòpica.

Observació: les magnituds que fan al·lusió a la configuració macroscòpica estan escrites en majúscules mentre que les escrites sobre la configuració microscòpica s'expressen en minúscules. Així, a l'escala microscòpica, es representen la tensió i la deformació amb les variables  $\sigma$  i  $\varepsilon$  respectivament, mentre que a l'escala macroscòpica la tensió se simbolitza amb  $\Sigma$  i la deformació amb  $E$ .

A l'equilibri:

$$W_{ml}^{\text{macro}} = W_{ml}^{\text{micro}} \quad (61)$$

Càlcul de l'energia a l'escala macroscòpica:

$$W_{ml}^{\text{macro}} = \int_{\Omega} E_{\text{macro}}^{\text{tot}} : \underline{\underline{C}} : E_{\text{macro}}^{\text{tot}} dV \quad \text{où} \quad E_{\text{macro}}^{\text{tot}} = \underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{\Sigma}}_{\text{macro}}^{\infty} + \underline{\underline{D}} : E_{\text{macro}}^* \right) \quad (62)$$

Reescrivint l'expressió de l'energia, obtenim:

$$\frac{W_{ml}^{\text{macro}}}{V_{\Omega}} = \left[ \underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{\Sigma}}_{\text{macro}}^{\infty} + \underline{\underline{D}} : E_{\text{macro}}^* \right) \right] : \underline{\underline{C}} : \left[ \underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{\Sigma}}_{\text{macro}}^{\infty} + \underline{\underline{D}} : E_{\text{macro}}^* \right) \right] \quad (63)$$

Substituint (50) en (63) obtenim:

$$\frac{W_{ml}^{\text{macro}}}{V_{\Omega}} = \left[ \underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{\Sigma}}_{\text{macro}}^{\infty} + \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \cdot \alpha \right) \right] : \underline{\underline{C}} : \left[ \underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{\Sigma}}_{\text{macro}}^{\infty} + \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \cdot \alpha \right) \right] \quad (64)$$

Per tant, tenim ací una equació de segon grau amb la incògnita  $\alpha$  que ens permet obtenir analíticament els valors d'aquest paràmetre que satisfan l'equilibri energètic. Desenvolupant aquesta expressió, definirem els coeficients del polinomi de segon grau en alfa:

$$\frac{W_{ml}^{\text{macro}}}{V_{\Omega}} = \left[ \underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\Sigma}}_{\text{macro}}^{\infty} + \underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \cdot \alpha \right) \right] : \underline{\underline{C}} : \left[ \underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\Sigma}}_{\text{macro}}^{\infty} + \underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \cdot \alpha \right) \right] \quad (65)$$

$$\frac{W_{ml}^{\text{macro}}}{V_{\Omega}} = \left[ \underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\Sigma}}_{\text{macro}}^{\infty} : \underline{\underline{C}} + \underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \cdot \alpha \right) : \underline{\underline{C}} \right] : \left[ \underline{\underline{C}}^{-1} : \underline{\underline{\Sigma}}_{\text{macro}}^{\infty} + \underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \cdot \alpha \right) \right] \quad (66)$$

$$\frac{W_{ml}^{macro}}{V_{\Omega}} = \underline{\underline{C}}^{-1} : \Sigma_{macro}^{\infty} : \overbrace{\underline{\underline{C}} : \underline{\underline{C}}^{-1}}^I : \Sigma_{macro}^{\infty} + \underline{\underline{C}}^{-1} : \Sigma_{macro}^{\infty} : \overbrace{\underline{\underline{C}} : \underline{\underline{C}}^{-1}}^I : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \cdot \alpha \right) + \quad (67)$$

$$+ \underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \cdot \alpha \right) : \overbrace{\underline{\underline{C}} : \underline{\underline{C}}^{-1}}^I : \Sigma_{macro}^{\infty} + \underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \cdot \alpha \right) : \overbrace{\underline{\underline{C}} : \underline{\underline{C}}^{-1}}^I : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \cdot \alpha \right) \quad (68)$$

$$\frac{W_{ml}^{macro}}{V_{\Omega}} = \underline{\underline{C}}^{-1} : \Sigma_{macro}^{\infty} : \Sigma_{macro}^{\infty} + \underline{\underline{C}}^{-1} : \Sigma_{macro}^{\infty} : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \cdot \alpha \right) + \quad (68)$$

$$+ \underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \cdot \alpha \right) : \Sigma_{macro}^{\infty} + \underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \cdot \alpha \right) : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \cdot \alpha \right)$$

Agrupant els termes:

$$0 = \overbrace{\underline{\underline{C}}^{-1} : \Sigma_{macro}^{\infty} : \Sigma_{macro}^{\infty}}^c - \frac{W_{ml}^{macro}}{V_{\Omega}} + \left[ \overbrace{\underline{\underline{C}}^{-1} : \Sigma_{macro}^{\infty} : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \right)}^b + \overbrace{\underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \right) : \Sigma_{macro}^{\infty}}^b \right] \cdot \alpha + \quad (69)$$

$$+ \overbrace{\underline{\underline{C}}^{-1} : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \right) : \left( \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{d}} \right)}^a \cdot \alpha^2$$

Per tant, l'equació de segon ordre precedent es resol aplicant la fórmula clàssica presentada en l'expressió (56).

### **Verificació de l'equilibri energètic**

El punt 8) calcula el residu energètic per a comprovar que s'ha arribat a l'equilibri. Com que aquest paràmetre  $\alpha$  està determinat analíticament, no hi ha necessitat de definir un algoritme iteratiu per a ajustar el valor del paràmetre. L'equilibri energètic és satisfet per definició.

#### ***7.2.3.1) Validació del funcionament de l'algoritme***

Per a determinar si el nostre algoritme ha sigut implementat correctament, hem decidit definir una configuració de treball simplificada per a comprovar si el càlcul de l'energia microscòpica es realitza correctament. Aleshores, el càlcul pot ser fet a mà i el resultat comparat a l'obtingut mitjançant les simulacions amb el codi ISAAC. La definició del càlcul és la següent:

Verificació de l'algoritme
<b>Propietats Geomètriques</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): 25</li> <li>- Nombre de punts en la metainclusió segons la direcció x (els mateixos segons y i z): 21</li> <li>- Pas de mallatge: 0,004 mm</li> <li>- Tipus de contacte: esfera (r = 20 mm) - pla</li> </ul>
<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)</li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: (0 ; 0 ; 0,04) mm</li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: (0,05 ; 0,05 ; 0,05) mm</li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) rad</li> <li>- Mòdul de Young: E = 114,6 GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li>- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0</li> <li>- Tipus d'inclusió: cúbica</li> </ul>
<b>Tipus de Contacte</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força Normal Imposada</li> <li>- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)</li> <li>- InfiniteSolid: 0 0 1 0 0 0 → <math>\sigma_{33} = 1 \text{ MPa}</math></li> </ul>
<b>Càrrega</b>
- Força normal: 0,001 N
<b>Materials</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mòdul de Young indentador: <math>E_1 = 114,6 \text{ GPa}</math></li> <li>- Coef. de Poisson indentador: <math>\nu_1 = 0,3</math></li> <li>- Mòdul de Young indentat: <math>E_2 = 114,6 \text{ GPa}</math></li> <li>- Coef. de Poisson indentat: <math>\nu_2 = 0,3</math></li> </ul>
<b>Algoritme de resolució</b>
Mètode de Chiu

Taula 6: Definició del càlcul de verificació de l'algoritme

Aplicarem doncs una sol·licitació de tracció uniaxial segons la direcció z sobre una metainclusió (espai de treball) que no conté cap inhomogeneïtat. De fet, considerarem que treballem amb un material homogeni ja que açò facilita el càlcul analític però serveix per a verificar el bon funcionament de l'algoritme. Per qüestions de funcionament del codi, per al càlcul, estem obligats a definir de totes maneres el domini geomètric de la inhomogeneïtat però imposarem els mateixos coeficients de comportament al material matriu i a la inhomogeneïtat per a definir el material indentat com si fóra homogeni.

Ens interessarem al càlcul de l'energia continguda en l'espai de treball a l'escala microscòpica.

**Càlcul analític:**

L'energia es defineix com:

$$W_{ml}^{micro} = \int_{\Omega} \underline{\sigma}_{micro}^{tot} : \underline{C}^{-1} : \underline{\sigma}_{micro}^{tot} dV \quad (70)$$

on  $\underline{\sigma}_{micro}^{tot}$  representa el tensor de Cauchy de tensions totals a l'escala microscòpica i  $\underline{C}$  el tensor de comportament

Com que el material de dins de la metainclusió és homogeni, no hi ha cap tensió d'acomodació (és a dir, no hi ha cap tensió produïda per la presència d'inhomogeneïtats):

$$\underline{\sigma}_{micro}^{tot} = \underline{\sigma}_{micro}^{\infty} + \underline{\sigma}_{micro}^{acomodació} = \underline{\sigma}_{micro}^{\infty} \quad (71)$$

Aleshores,

$$\underline{\sigma}_{micro}^{tot} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{MPa} \quad (72)$$

La inversa de la matriu de comportament val:

$$\underline{C}^{-1} = \begin{pmatrix} 8,726 & -2,618 & -2,618 & 0 & 0 & 0 \\ -2,618 & 8,726 & -2,618 & 0 & 0 & 0 \\ -2,618 & -2,618 & 8,726 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 11,34 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 11,34 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 11,34 \end{pmatrix} \cdot 10^{-6} \text{MPa}^{-1} \quad (73)$$

Com que aquestes magnituds són constants i no depenen del volum, la integral de l'expressió (70) pot ser avaluada com un simple producte on  $V_{ml}^{total}$  representa el volum de la metainclusió, que val:

$$V_{ml}^{total} = (n_{x_{micro}} - 1) \cdot h_{x_{micro}} \cdot (n_{y_{micro}} - 1) \cdot h_{y_{micro}} \cdot (n_{z_{micro}} - 1) \cdot h_{z_{micro}} \quad (74)$$

on  $n_{x_{micro}}$ ,  $n_{y_{micro}}$  i  $n_{z_{micro}}$  representen respectivament el nombre de punts que defineixen la metainclusió segons la direcció x, y i z amb  $h_{x_{micro}}$ ,  $h_{y_{micro}}$  i  $h_{z_{micro}}$  els seus passos de discretització respectius segons aquestes direccions.

Sabent que  $n_{x_{micro}} = 21$  i  $h_{x_{micro}} = 0,004 \text{ mm}$ , realitzem les diferents aplicacions numèriques i trobem:

$$V_{\text{ml analític}}^{\text{total}} = 5,12 \cdot 10^{-4} \text{ mm}^3$$

$$W_{\text{ml analític}}^{\text{micro}} = 4,4677 \cdot 10^{-9} \text{ mJ}$$

### **Càlcul numèric:**

Després d'haver implementat l'algoritme de modelització a dues escales presentat prèviament en el codi ISAAC i després d'haver realitzat les simulacions, trobem:

$$V_{\text{ml numèric}}^{\text{total}} = 5,24 \cdot 10^{-4} \text{ mm}^3$$

$$W_{\text{ml numèric}}^{\text{micro}} = 4,5687 \cdot 10^{-9} \text{ mJ}$$

Per tant, podem concloure que el funcionament de l'algoritme de modelització a dues escales és correcte.

### ***7.2.3.2) Casos d'estudi***

A continuació, s'analitzaran diversos casos d'estudi per a comprovar si el nostre algoritme de modelització a dues escales és eficaç. Estudiarem l'impacte de la fracció volumètrica d'inhomogeneïtat sobre la tensió de Von Mises, la influència de diferents tipus de sol·licitacions uniaxials o combinades amb sol·licitacions de cisallament o també la presència de diverses inhomogeneïtats en la metainclusió. L'objectiu d'aquests estudis és poder validar eventualment l'algoritme de modelització a dues escales.

### Estudi 1) Influència de la fracció volumètrica d'inhomogeneïtat

En aquest primer estudi sobre la modelització a dues escales, hem fet variar la grandària de la inhomogeneïtat continguda en la metainclusió de manera que es pugui determinar si la fracció volumètrica d'inhomogeneïtat present en aquesta zona de treball exerceix una certa influència sobre la manera en què l'equilibri energètic és assolit. Com que ens interessem a quantificar l'estat elàstic del semiespai, raonarem si l'equilibri ha sigut abastat en termes de tensió de Von Mises.

Així doncs, hem realitzat dues simulacions diferents, cadascuna de les quals comporta un càlcul amb el codi microscòpic inicialment i seguidament un altre amb el codi macroscòpic. La primera simulació (Cas 1) porta sobre una fracció volumètrica d'inhomogeneïtat més feble mentre que la segona (Cas 2) en presenta una més important. Les definicions són les següents:

Cas 1: Microscòpica	Cas 1: Macroscòpica
<b>Propietats Geomètriques</b>	<b>Propietats Geomètriques</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b></li> <li>- Nombre de punts en la metainclusió segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>21</b></li> <li>- Pas de mallatge: <b>0,004 mm</b></li> <li>- Tipus de contacte: esfera (radi = 20 mm) - pla</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b></li> <li>- Pas de mallatge: <b>0,04 mm</b></li> <li>- Tipus de contacte: esfera (radi = 20 mm) - pla</li> </ul>
<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>	<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)</li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,04) mm</b></li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,05 ; 0,05 ; 0,05) mm</b></li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) °</li> <li>- Mòdul de Young: E = 500 GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li>- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0</li> <li>- Tipus d'inclusió: <b>cúbica</b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)</li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,2) mm</b></li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,078 ; 0,078 ; 0,078) mm</b></li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) °</li> <li>- Mòdul de Young: E = 500 GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li>- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0</li> <li>- Tipus d'inclusió: <b>cúbica</b></li> </ul>
<b>Tipus de Contacte</b>	<b>Tipus de Contacte</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força Normal Imposada</li> <li>- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)</li> <li>- InfiniteSolid: 0 0 1 0 0 0 → <b><math>\sigma_{33} = 1 \text{ MPa}</math></b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força Normal Imposada</li> <li>- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)</li> <li>- InfiniteSolid: 0 0 1 0 0 0 → <b><math>\sigma_{33} = 1 \text{ MPa}</math></b></li> </ul>
<b>Càrrega</b>	<b>Càrrega</b>
- Força normal: 0,001 N	- Força normal: 50 N
<b>Materials</b>	<b>Materials</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mòdul de Young indentador: <math>E_1 = 114,6 \text{ GPa}</math></li> <li>- Coef. de Poisson indentador: <math>\nu_1 = 0,3</math></li> <li>- Mòdul de Young indentat: <math>E_2 = 114,6 \text{ GPa}</math></li> <li>- Coef. de Poisson indentat: <math>\nu_2 = 0,3</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mòdul de Young indentador: <math>E_1 = 114,6 \text{ GPa}</math></li> <li>- Coef. de Poisson indentador: <math>\nu_1 = 0,3</math></li> <li>- Mòdul de Young indentat: <math>E_2 = 114,6 \text{ GPa}</math></li> <li>- Coef. de Poisson indentat: <math>\nu_2 = 0,3</math></li> </ul>
<b>Algoritme de resolució</b>	<b>Algoritme de resolució</b>
Mètode de Chiu ComputeOnLargeZone	Mètode de Chiu ComputeOnLargeZone

Taula 7: Definició d'un càlcul a dues escales amb una inhomogeneïtat de feble grandària en comparació amb la metainclusió



Cas 2: Microscòpic	Cas 2: Macroscòpic
<b>Propietats Geomètriques</b>	<b>Propietats Geomètriques</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b></li> <li>- Nombre de punts en la metainclusió segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>21</b></li> <li>- Pas de mallatge: <b>0,004 mm</b></li> <li>- Tipus de contacte: esfera (radi = 20 mm) - pla</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b></li> <li>- Pas de mallatge: <b>0,04 mm</b></li> <li>- Tipus de contacte: esfera (radi = 20 mm) - pla</li> </ul>
<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>	<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)</li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,04) mm</b></li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,076 ; 0,076 ; 0,076) mm</b></li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) °</li> <li>- Mòdul de Young: E = 500 GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li>- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0</li> <li>- Tipus d'inclusió: <b>cúbica</b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)</li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,2) mm</b></li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,078 ; 0,078 ; 0,078) mm</b></li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) °</li> <li>- Mòdul de Young: E = 500 GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li>- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0</li> <li>- Tipus d'inclusió: <b>cúbica</b></li> </ul>
<b>Tipus de Contacte</b>	<b>Tipus de Contacte</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força Normal Imposada</li> <li>- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)</li> <li>- InfiniteSolid: 0 0 1 0 0 0 → <b><math>\sigma_{33} = 1 \text{ MPa}</math></b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força Normal Imposada</li> <li>- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)</li> <li>- InfiniteSolid: 0 0 1 0 0 0 → <b><math>\sigma_{33} = 1 \text{ MPa}</math></b></li> </ul>
<b>Càrrega</b>	<b>Càrrega</b>
- Força normal: 0,001 N	- Força normal: 50 N
<b>Materials</b>	<b>Materials</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mòdul de Young indentador: <math>E_1 = 114,6 \text{ GPa}</math></li> <li>- Coef. de Poisson indentador: <math>\nu_1 = 0,3</math></li> <li>- Mòdul de Young indentat: <math>E_2 = 114,6 \text{ GPa}</math></li> <li>- Coef. de Poisson indentat: <math>\nu_2 = 0,3</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mòdul de Young indentador: <math>E_1 = 114,6 \text{ GPa}</math></li> <li>- Coef. de Poisson indentador: <math>\nu_1 = 0,3</math></li> <li>- Mòdul de Young indentat: <math>E_2 = 114,6 \text{ GPa}</math></li> <li>- Coef. de Poisson indentat: <math>\nu_2 = 0,3</math></li> </ul>
<b>Algoritme de resolució</b>	<b>Algoritme de resolució</b>
Mètode de Chiu ComputeOnLargeZone	Mètode de Chiu ComputeOnLargeZone

Taula 8: Definició d'un càlcul a dues escales amb una inhomogeneïtat de grandària considerable en comparació amb la metainclusió

Com ja ho havíem anticipat ens hem interessat a l'evolució de la tensió de Von Mises. Primerament, mostrarem aquesta evolució segons algunes direccions particulars, perquè aquesta mena de post-tractaments ens permeten obtenir conclusions més bé quantitatives sobre l'algoritme de modelització a dues escales mentre que les representacions bidimensionals d'aquesta tensió ens donen només una visió més qualitativa del cas d'estudi en qüestió. Les tensions de Von Mises segons les direccions particulars (eix x, eix y, 1r bisector o 2n bisector) es tracen únicament per a punts de càlcul continguts en el pla  $y = 0$  de la discretització i més precisament per a aquells situats a la profunditat del centre de la inhomogeneïtat. En la major part de casos d'estudi que presentarem a continuació, la tensió de Von Mises serà traçada únicament segons x ja que en les altres direccions particulars, els resultats són anàlegs.

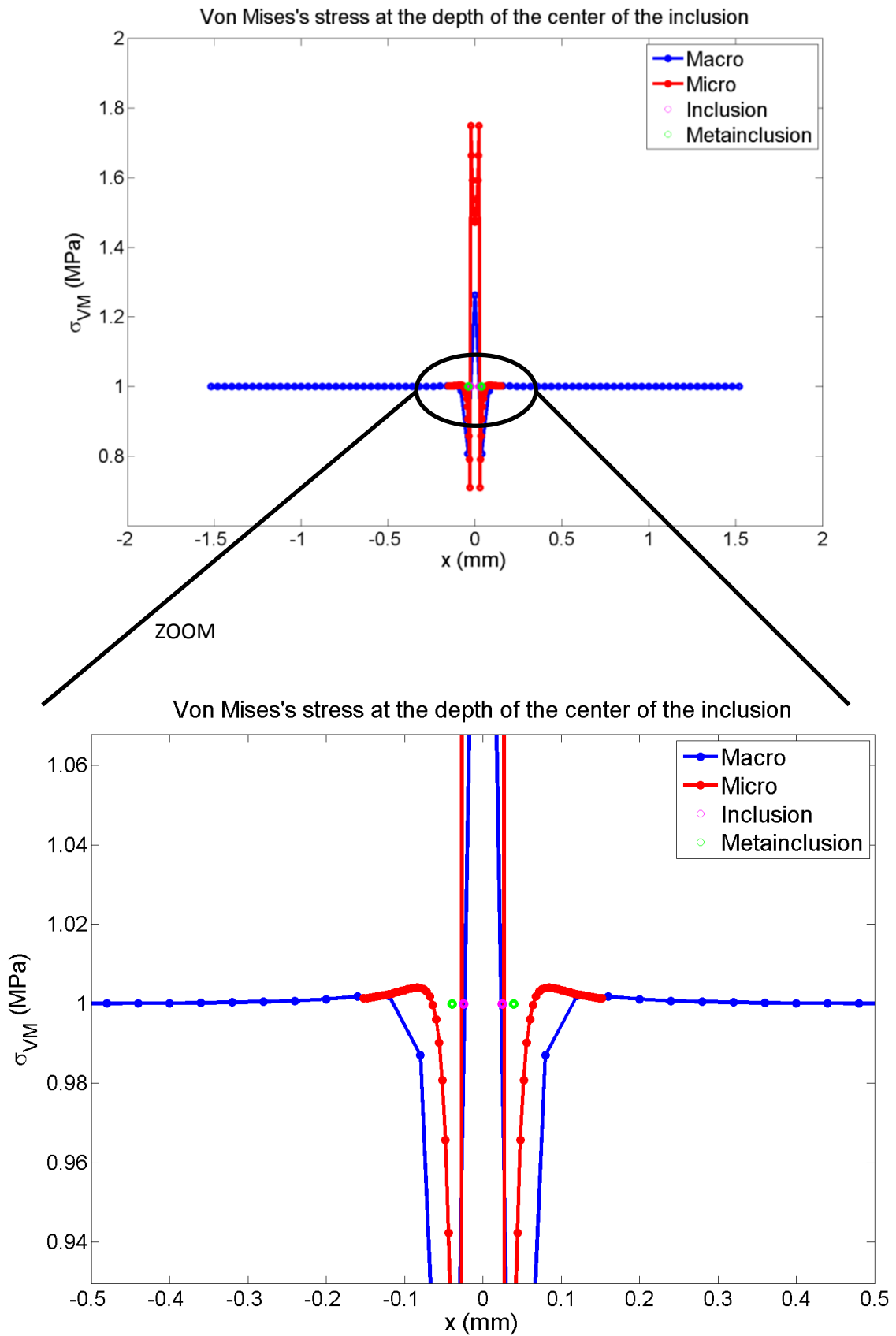


Figura 39: Evolució de la tensió de Von Mises segons l'eix x en el pla  $y = 0$  per a una profunditat z igual a la del centre de la inhomogeneïtat (cas 1).

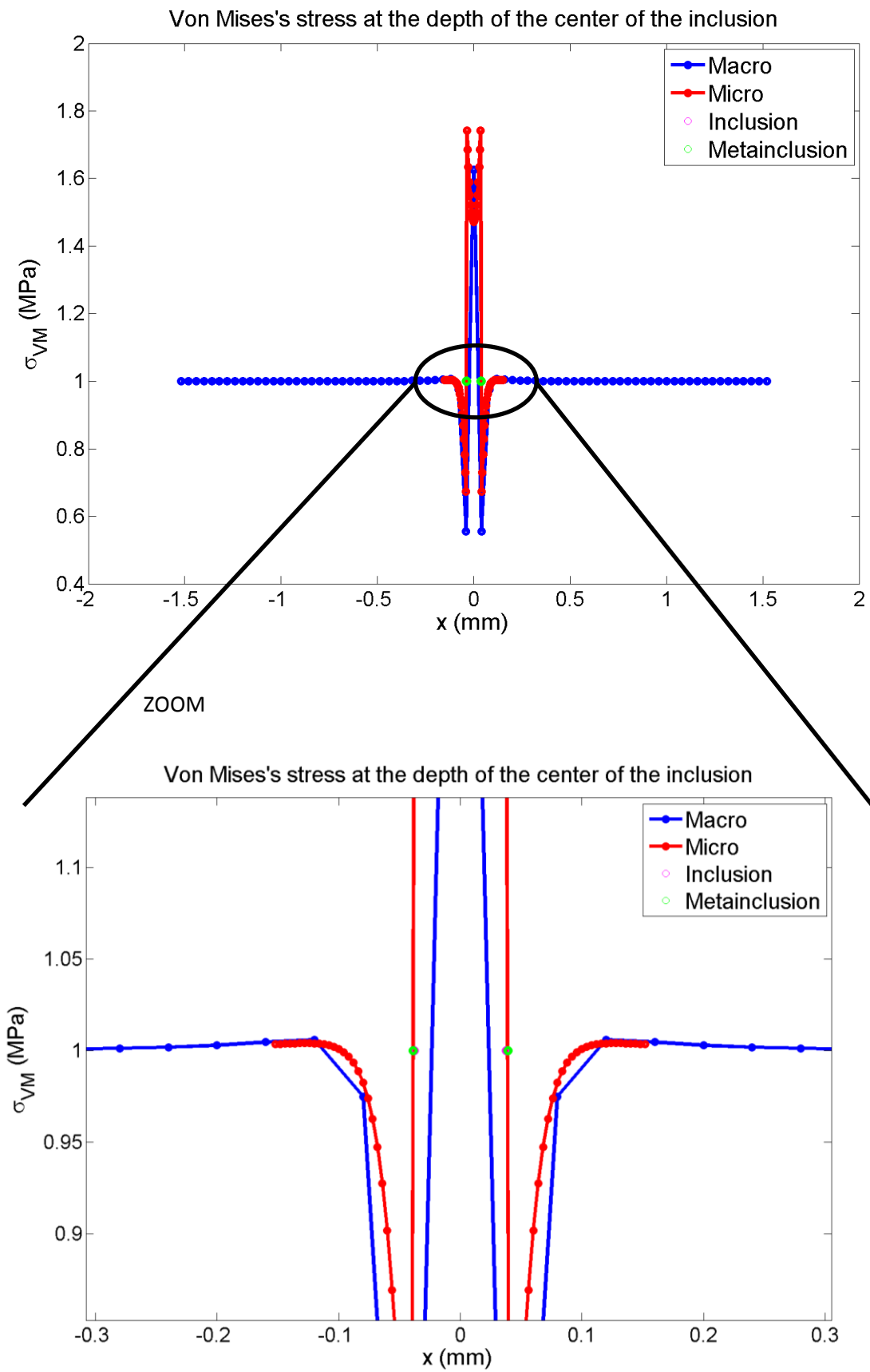


Figura 40: Evolució de la tensió de Von Mises segons l'eix  $x$  i en pla  $y = 0$  per a una profunditat  $z$  igual a la del centre de la inhomogeneïtat (cas 2).

En les dues figures precedents, els punts mostrats en morat representen les vores de la verdadera inhomogeneïtat física mentre que els punts verds simbolitzen els extrems de la metainclusió la forma geomètrica de la qual ha sigut escollida cúbica, com en totes les simulacions a dues escales realitzades en aquest treball. Atés que la inhomogeneïtat és més menuda que la metainclusió en la Figura 39 (cas 1), els punts morats es troben a l'interior dels punts verds mentre que en la Figura 40 (cas 2), els punts que delimiten les vores de la verdadera inclusió i la metainclusió es troben quasi superposats. La fracció volumètrica d'inhomogeneïtat present en la metainclusió val respectivament per als casos d'estudi 1 i 2  $f_v = 26,3\%$  i  $f_v = 92,5\%$ . Però, podem distingir clarament la zona de transició entre la inhomogeneïtat i el material matriu gràcies al traçat de la tensió de Von Mises. De fet, aquesta presenta una discontinuïtat a la interfície entre els dos dominis materials, la qual cosa ens permet verificar que la definició del càlcul ha sigut realitzada correctament.

Per mitjà de la Figura 39 i Figura 40, podem afirmar, que en termes d'aparença, la modelització a dues escales que ha sigut implementada en el codi és correcta ja que la tensió macroscòpica de Von Mises intenta superposar-se a la forma de la corba de tensió microscòpica de Von Mises. De fet, considerem que el nostre algoritme de modelització a dues escales és eficaç si l'eigenstrain macroscòpic injectat en el codi macroscòpic és capaç de donar lloc a una representació que s'aproxime el més possible a la de la tensió de Von Mises a l'escala microscòpica. D'aquesta manera, podem tenir en compte l'anisotropia geomètrica present en el domini de la metainclusió a l'escala microscòpica amb un feble cost computacional.

Observant les figures precedents, podem adonar-nos que el material matriu juga un paper important en la distribució de la tensió de Von Mises a l'escala macroscòpica. En el cas 2 (Figura 40), quan la inhomogeneïtat ocupa pràcticament tot el volum de la metainclusió ( $f_v = 92,5\%$ ), el pic de tensió presenta un valor pròxim a 1,7 MPa mentre que en el cas 1 (Figura 39) on la fracció volumètrica d'inhomogeneïtat sobre el volum de la metainclusió val  $f_v = 26,3\%$ , el pic de tensió es troba als voltants de 1,3 MPa. Per tant, la tensió de Von Mises no és la mateixa segons la descripció utilitzada. És normal, que a l'interior de la metainclusió, no trobem els mateixos valors de tensió de Von Mises en les descripcions macroscòpiques i microscòpiques (Figura 39 i Figura 40) ja que aquesta magnitud està determinada a partir de la deformació i aquesta no es calcula de la mateixa manera en la configuració macroscòpica i microscòpica (veure Taula 5). No obstant això, fora del domini de la metainclusió les dues corbes haurien de seguir la mateixa evolució. En aquest primer estudi, açò és veritat especialment per als valors de tensió de Von Mises que corresponen als punts de l'espai allunyats de les immediacions de la inhomogeneïtat, com es pot observar també sobre la Figura 39 i Figura 40.

Podem observar també l'evolució de l'error entre la tensió de Von Mises calculada en la configuració microscòpica i macroscòpica en els casos 1 i 2 gràcies a la Figura 41 i la Figura 42.

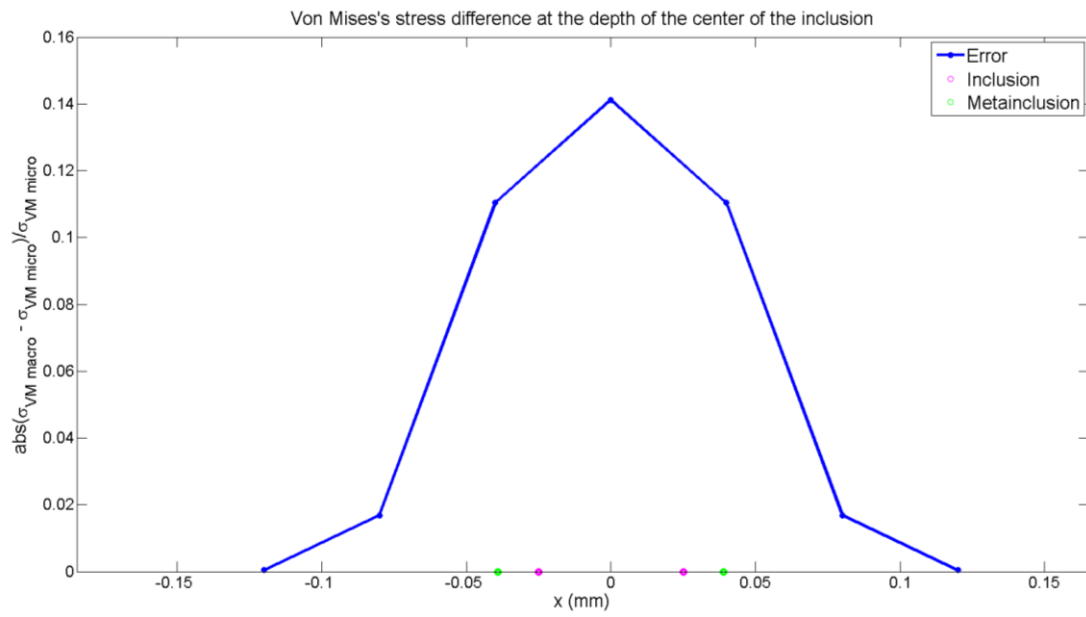


Figura 41: Error entre la tensió de Von Mises a l'escala macroscòpica i microscòpica (cas 1) sobre els punts de càlcul a l'escala macroscòpica.

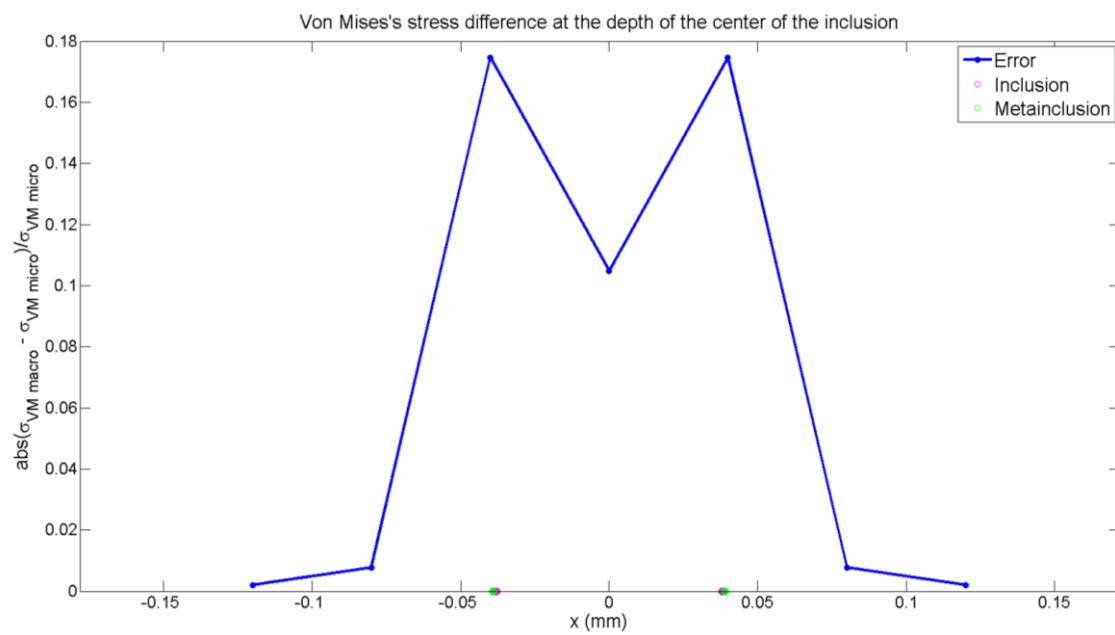


Figura 42: Error entre la tensió de Von Mises a l'escala macroscòpica i microscòpica (cas 2) sobre els punts de càlcul a l'escala macroscòpica.

Per tant, podem concloure que encara que les diferències en termes de tensió de Von Mises semblen elevades quan ens interessem a la regió que queda a l'interior de la metainclusió, açò és lògic ja que la tensió no està calculada de la mateixa manera en la configuració macroscòpica i microscòpica. No obstant això, quan observem els punts de càlcul situats fora del domini de la metainclusió, podem destacar que l'error relatiu entre la tensió de Von Mises a l'escala microscòpica i macroscòpica oscil·la al voltant de 2%. De totes formes cal estar alerta, perquè encara que l'error relatiu de la tensió de Von Mises és feble, podem intuir que si tracem l'error relatiu de la tensió d'acomodació, les diferències entre la descripció macroscòpica i microscòpica serien més grans. Per a dir açò ens basem en l'observació de la Figura 39 i Figura 40. En la primera, en els primers punts de càlcul que es troben fora de la metainclusió, la diferència entre la tensió de Von Mises macroscòpica i microscòpica és més important que la que podem observar sobre la segona figura a causa de la quantitat de material matriu present en la metainclusió. Com que al voltant de la inhomogeneïtat la contribució de la tensió d'acomodació és més important, l'error relatiu de la tensió d'acomodació seria també més conseqüent. Una vegada feta aquesta observació, cal assenyalar que de totes maneres aquesta no posa en qüestió la precisió del resultat ja que és la tensió de Von Mises la que és utilitzada sovint per al dimensionament de materials metàl·lics.

## Estudi 2) Influència de les sol·licitacions aplicades

Ara ens interessem en quantificar l'impacte de la natura i amplitud de les sol·licitacions sobre l'algoritme, tenint com a objectiu, com abans, validar el nostre algoritme de modelització a dues escales.

Per a fer-ho, primerament hem definit sol·licitacions de tracció en diverses direccions, combinades també amb cisallaments del mateix ordre de magnitud que les sol·licitacions dels casos d'estudi precedents (cas 3). Seguidament, també hem estudiat la influència de sol·licitacions més grans en amplitud (cas 4).

Les definicions són les següents:

Cas 3: Microscòpic	Cas 3: Macroscòpic
<b>Propietats Geomètriques</b>	<b>Propietats Geomètriques</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b></li> <li>- Nombre de punts en la metainclusió segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>21</b></li> <li>- Pas de mallatge: <b>0,004 mm</b></li> <li>- Tipus de contacte: esfera (radi = 20 mm) - pla</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b></li> <li>- Pas de mallatge: <b>0,04 mm</b></li> <li>- Tipus de contacte: esfera (radi = 20 mm) - pla</li> </ul>
<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>	<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)</li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,04)</b> mm</li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,076 ; 0,076 ; 0,076)</b> mm</li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) rad</li> <li>- Mòdul de Young: E = 500 GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li>- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0</li> <li>- Tipus d'inclusió: <b>cúbica</b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)</li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,2)</b> mm</li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,078 ; 0,078 ; 0,078)</b> mm</li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) rad</li> <li>- Mòdul de Young: E = 500 GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li>- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0</li> <li>- Tipus d'inclusió: <b>cúbica</b></li> </ul>
<b>Tipus de Contacte</b>	<b>Tipus de Contacte</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força Normal Imposada</li> <li>- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)</li> <li>- InfiniteSolid : 1 0 1 0 0 1 →</li> <li><b><math>\sigma_{11} = \sigma_{33} = \sigma_{13} = 1</math> MPa</b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força Normal Imposada</li> <li>- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)</li> <li>- InfiniteSolid : 1 0 1 0 0 1 →</li> <li><b><math>\sigma_{11} = \sigma_{33} = \sigma_{13} = 1</math> MPa</b></li> </ul>
<b>Chargement</b>	<b>Chargement</b>
- Força normal: 0,001 N	- Força normal: 50 N
<b>Materials</b>	<b>Materials</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mòdul de Young indentador: <math>E_1 = 114,6</math> GPa</li> <li>- Coef. de Poisson indentador: <math>\nu_1 = 0,3</math></li> <li>- Mòdul de Young indentat: <math>E_2 = 114,6</math> GPa</li> <li>- Coef. de Poisson indentat: <math>\nu_2 = 0,3</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mòdul de Young indentador: <math>E_1 = 114,6</math> GPa</li> <li>- Coef. de Poisson indentador: <math>\nu_1 = 0,3</math></li> <li>- Mòdul de Young indentat: <math>E_2 = 114,6</math> GPa</li> <li>- Coef. de Poisson indentat: <math>\nu_2 = 0,3</math></li> </ul>
<b>Algoritme de resolució</b>	<b>Algoritme de resolució</b>
Mètode de Chiu ComputeOnLargeZone	Mètode de Chiu ComputeOnLargeZone

Taula 9: Definició d'un càlcul a dues escales amb una inhomogeneïtat sotmesa a tracció i cisallament.

Cas 4: Microscòpic	Cas 4: Macroscòpic
<b>Propietats Geomètriques</b>	<b>Propietats Geomètriques</b>
- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b> - Nombre de punts en la metainclusió segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>21</b> - Pas de mallatge: <b>0,004 mm</b> - Tipus de contacte: esfera (radi = 20 mm) - pla	- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b> - Pas de mallatge: <b>0,04 mm</b> - Tipus de contacte: esfera (radi = 20 mm) - pla
<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>	<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>
- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z) - Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,04)</b> mm - Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,05 ; 0,05 ; 0,05)</b> mm - Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) rad - Mòdul de Young: E = 500 GPa - Coeficient de Poisson: $\nu = 0,3$ - Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0 - Tipus d'inclusió: <b>cúbica</b>	- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z) - Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,2)</b> mm - Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,078 ; 0,078 ; 0,078)</b> mm - Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) rad - Mòdul de Young: E = 500 GPa - Coeficient de Poisson: $\nu = 0,3$ - Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0 - Tipus d'inclusió: <b>cúbica</b>
<b>Tipus de Contacte</b>	<b>Tipus de Contacte</b>
- Força Normal Imposada - Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments) - InfiniteSolid: 30 0 50 0 0 0 → <b><math>\sigma_{11} = 30</math> MPa; <math>\sigma_{33} = 50</math> MPa</b>	- Força Normal Imposada - Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments) - InfiniteSolid: 30 0 50 0 0 0 → <b><math>\sigma_{11} = 30</math> MPa; <math>\sigma_{33} = 50</math> MPa</b>
<b>Càrrega</b>	<b>Càrrega</b>
- Força normal: 0,001 N	- Força normal: 50 N
<b>Materials</b>	<b>Materials</b>
- Mòdul de Young indentador: $E_1 = 114,6$ GPa - Coef. de Poisson indentador: $\nu_1 = 0,3$ - Mòdul de Young indentat: $E_2 = 114,6$ GPa - Coef. de Poisson indentat: $\nu_2 = 0,3$	- Mòdul de Young indentador: $E_1 = 114,6$ GPa - Coef. de Poisson indentador: $\nu_1 = 0,3$ - Mòdul de Young indentat: $E_2 = 114,6$ GPa - Coef. de Poisson indentat: $\nu_2 = 0,3$
<b>Algoritme de resolució</b>	<b>Algoritme de resolució</b>
Mètode de Chiu ComputeOnLargeZone	Mètode de Chiu ComputeOnLargeZone

Taula 10: Definició d'un càlcul a dues escales amb una inhomogeneïtat sotmesa a tracció de gran amplitud.

Ens interessem també a les tensions de Von Mises en aquest cas d'estudi. Aquestes han sigut post-tractades segons certes direccions particulars (eix x, eix y, 1r bisector o 2n bisector) únicament per a punts de càlcul continguts en el pla  $y = 0$  de la discretització i més precisament per a punts de càlcul situats a la profunditat del centre de la inhomogeneïtat. No obstant això, com que els resultats són anàlegs en aquestes direccions particulars, només mostrarem les evolucions de la tensió de Von Mises segons l'eix x.

Els resultats obtinguts durant el post-tractament dels càlculs són els següents:



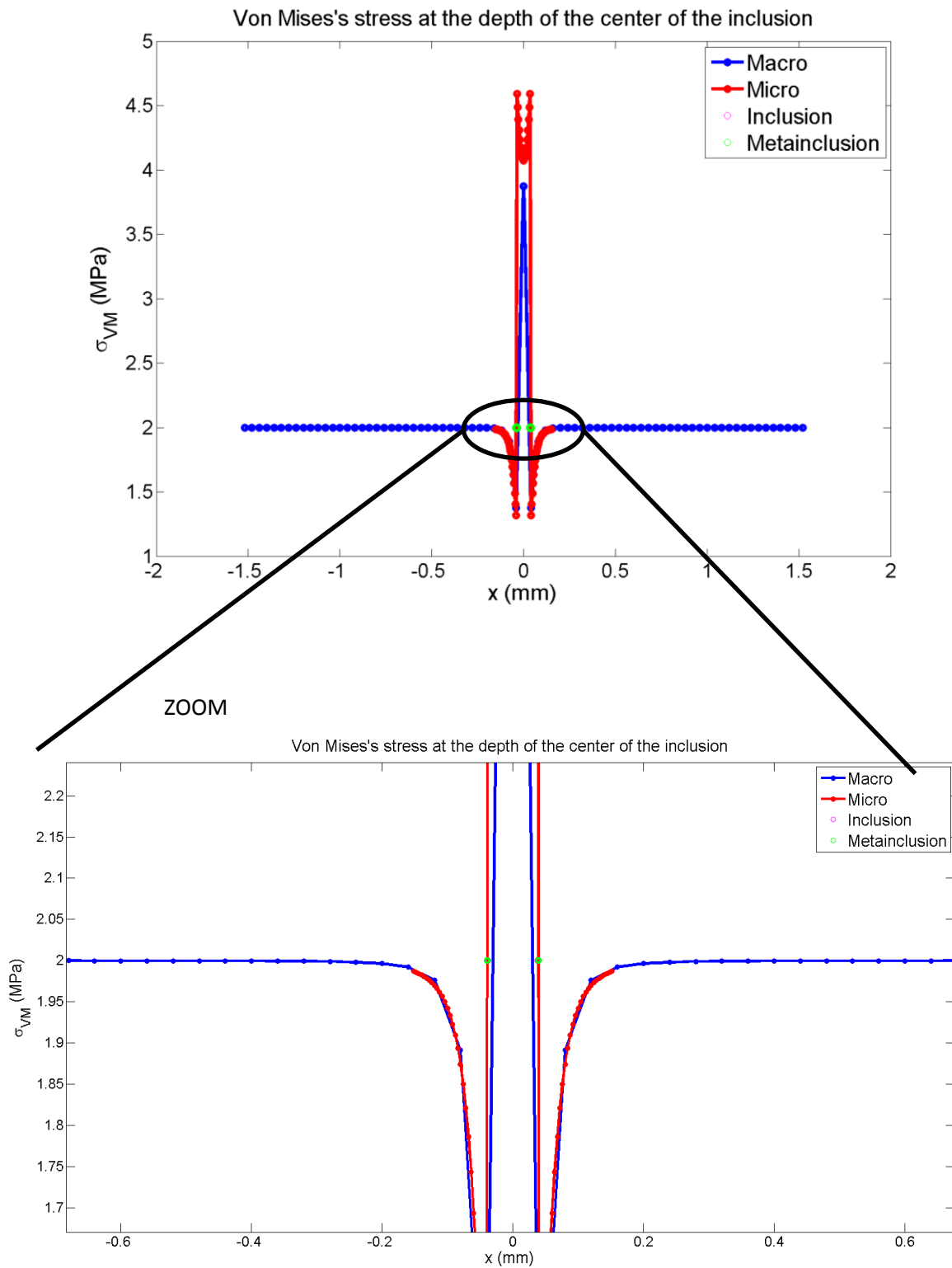


Figura 43: Evolució de la tensió de Von Mises segons l'eix  $x$  en el pla  $y = 0$  per a una profunditat  $z$  igual a la del centre de la inhomogeneïtat (cas 3).

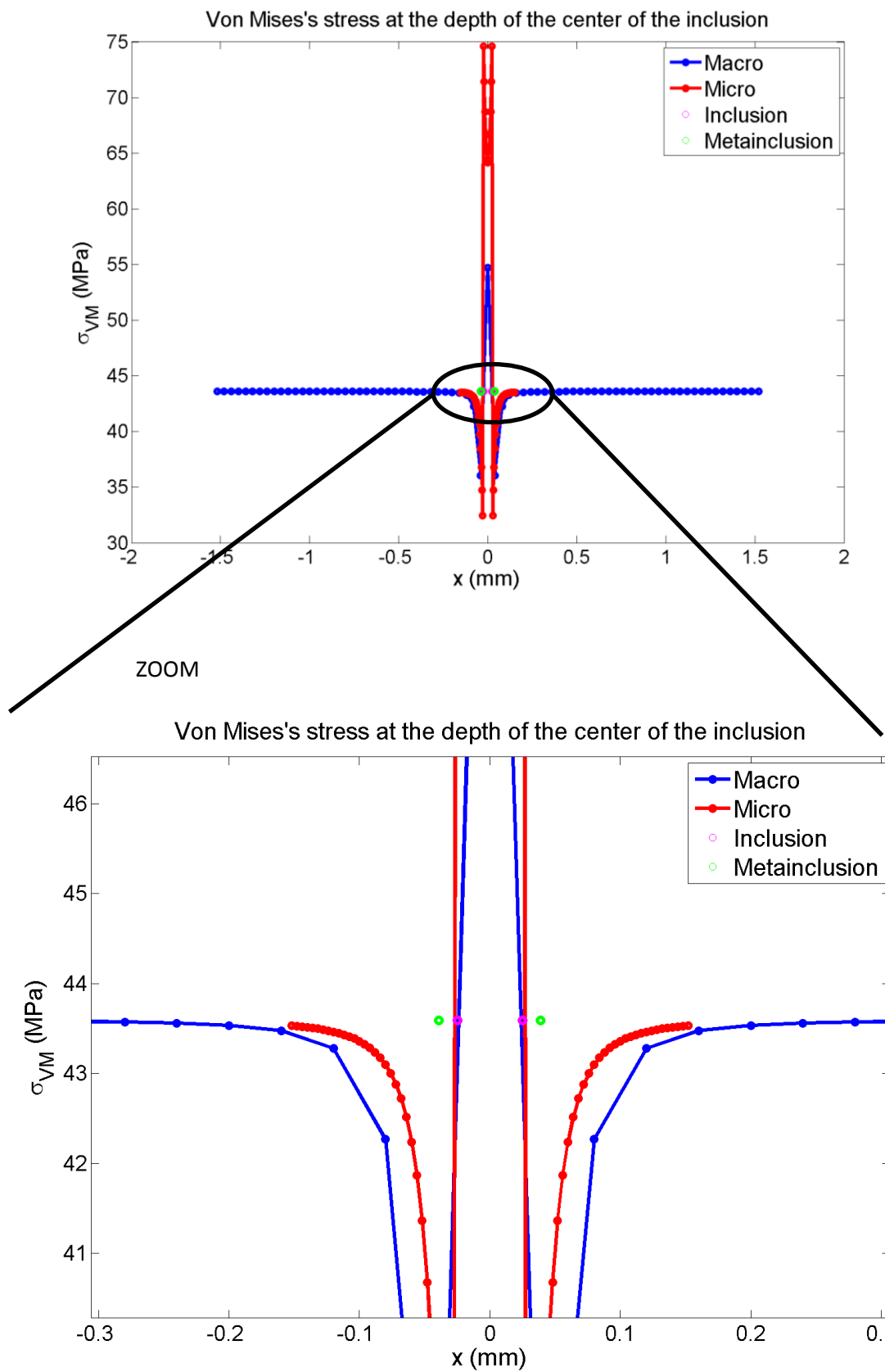


Figura 44: Evolució de la tensió de Von Mises segons l'eix  $x$  en el pla  $y = 0$  per a una profunditat  $z$  igual a la del centre de la inhomogeneïtat (cas 4).

Com en el cas d'estudi precedent, la fracció volumètrica d'inhomogeneïtat present en la metainclusió juga un paper capital sobre les diferències existents entre les corbes de tensió de Von Mises a l'escala microscòpica i macroscòpica. En el cas 3, la fracció volumètrica val  $f_v = 92,5\%$  mentre que en el cas 4,  $f_v = 26,3\%$ .

En la Figura 43, podem observar que les diferències entre la corba microscòpica i macroscòpica són febles, la qual cosa significa que en injectar una eigenstrain equivalent i energèticament equilibrada en el codi macroscòpic, obtenim una descripció de la realitat pròxima de l'obtinguda discretitzant finament el semiespai d'estudi. Tanmateix, en la Figura 44, podem remarcar que les diferències entre els dos perfils de tensió són més notòries. De totes maneres, la tensió macroscòpica continua seguint la mateixa tendència que la corba obtinguda amb el codi microscòpic, cosa que vol dir que l'algoritme és, a pesar de tot, eficaç.

Podem concloure llavors que encara que imposem tensions d'amplitud més elevada que les definides en el primer estudi o fins i tot de natura mecànica diferent (cisallaments), les diferències entre les dues corbes de tensió de Von Mises a l'escala macroscòpica i microscòpica són produïdes principalment per la fracció volumètrica d'inhomogeneïtat, com ho hem observat també en l'estudi precedent. A partir dels resultats obtinguts en aquest segon estudi, afirmem que l'algoritme plantejat resulta eficaç per a una modelització a dues escales. No obstant això, l'impacte de la matriu que envolta la inclusió equivalent encara no ha sigut estimat d'una manera precisa per a poder concloure si la seua presència en la metainclusió ha de ser evitada o si, per contra, podem considerar que les diferències induïdes pel material matriu són insignificants, com era el cas, per exemple, en l'estudi precedent. Finalment, en aquest cas d'estudi, l'efecte de les diferents sol·licitacions mecàniques no és gaire visible (a part del valor de la tensió a l'infinit).

### Estudi 3) Influència de la duresa relativa entre la inhomogeneïtat i la matriu

En aquest cas, estudiarem la influència de la duresa relativa entre el material de la inhomogeneïtat i el de la matriu que es troba al voltant sobre la tensió de Von Mises. Per a fer-ho, hem definit una inhomogeneïtat que posseeix un mòdul de Young més important que el definit en els estudis precedents i que està sotmesa també a la mateixa càrrega que el cas 4.

Presentarem la definició retinguda per a aquest cas d'estudi a continuació:

Cas 5: Microscòpic	Cas 5: Macroscòpic
<b>Propietats Geomètriques</b>	<b>Propietats Geomètriques</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b></li> <li>- Nombre de punts en la metainclusió segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>21</b></li> <li>- Pas de mallatge: <b>0,004 mm</b></li> <li>- Tipus de contacte: esfera (radi = 20 mm) - pla</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b></li> <li>- Pas de mallatge: <b>0,04 mm</b></li> <li>- Tipus de contacte: esfera (radi = 20 mm) - pla</li> </ul>
<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>	<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)</li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,04)</b> mm</li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,05 ; 0,05 ; 0,05)</b> mm</li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) rad</li> <li>- Mòdul de Young: <b>E = 700 GPa</b></li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li>- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0</li> <li>- Tipus d'inclusió: <b>cúbica</b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)</li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,2)</b> mm</li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,078 ; 0,078 ; 0,078)</b> mm</li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) rad</li> <li>- Mòdul de Young: <b>E = 700 GPa</b></li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li>- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0</li> <li>- Tipus d'inclusió: <b>cúbica</b></li> </ul>
<b>Tipus de Contacte</b>	<b>Tipus de Contacte</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força Normal Imposada</li> <li>- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)</li> <li>- InfiniteSolid : 30 0 50 0 0 0 →</li> <li><b><math>\sigma_{11} = 30 \text{ MPa}</math>; <math>\sigma_{33} = 50 \text{ MPa}</math></b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força Normal Imposada</li> <li>- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)</li> <li>- InfiniteSolid : 30 0 50 0 0 0 →</li> <li><b><math>\sigma_{11} = 30 \text{ MPa}</math>; <math>\sigma_{33} = 50 \text{ MPa}</math></b></li> </ul>
<b>Càrrega</b>	<b>Càrrega</b>
- Força normal: 0,001 N	- Força normal: 50 N
<b>Materials</b>	<b>Materials</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mòdul de Young indentador: <math>E_1 = 114,6 \text{ GPa}</math></li> <li>- Coef. de Poisson indentador: <math>\nu_1 = 0,3</math></li> <li>- Mòdul de Young indentat: <math>E_2 = 114,6 \text{ GPa}</math></li> <li>- Coef. de Poisson indentat: <math>\nu_2 = 0,3</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mòdul de Young indentador: <math>E_1 = 114,6 \text{ GPa}</math></li> <li>- Coef. de Poisson indentador: <math>\nu_1 = 0,3</math></li> <li>- Mòdul de Young indentat: <math>E_2 = 114,6 \text{ GPa}</math></li> <li>- Coef. de Poisson indentat: <math>\nu_2 = 0,3</math></li> </ul>
<b>Algoritme de resolució</b>	<b>Algoritme de resolució</b>
Mètode de Chiu ComputeOnLargeZone	Mètode de Chiu ComputeOnLargeZone

Taula 11: Definició d'un càlcul a dues escales amb una inhomogeneïtat dura sotmesa a tracció de gran amplitud.

Ens interessem a la tensió de Von Mises en aquest cas d'estudi. Aquesta ha sigut traçada segons l'eix x únicament per als punts de càlcul continguts en el pla  $y = 0$  de la discretització i més precisament per als punts de càlcul situats a la profunditat del centre de la inhomogeneïtat.

Els resultats són els següents:

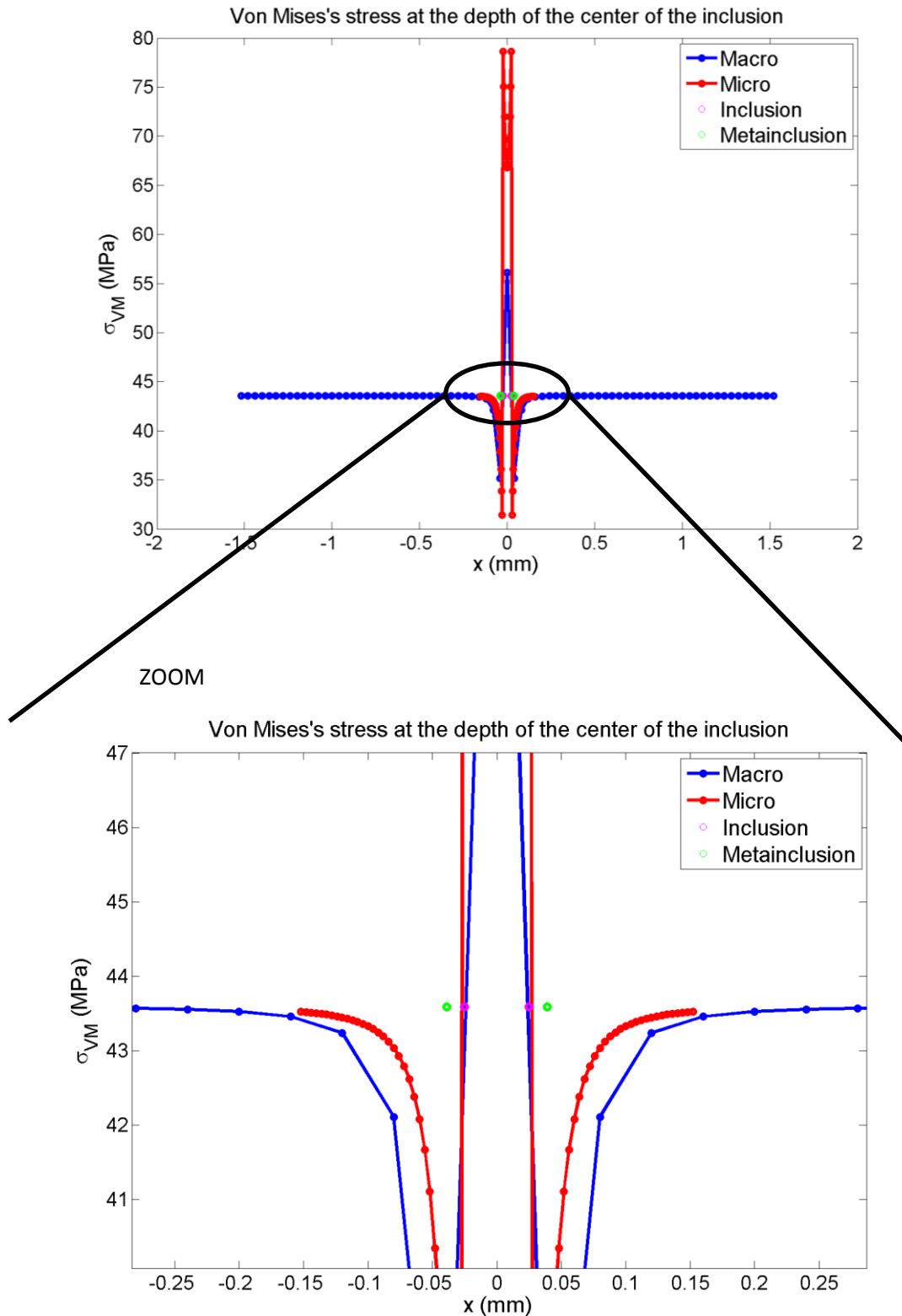


Figura 45: Evolució de la tensió de Von Mises segons l'eix  $x$  en el pla  $y = 0$  per a una profunditat  $z$  igual a la del centre de la inhomogeneïtat (cas 5).

Com a recordatori, la duresa relativa estava definida com el quocient entre el mòdul de Young del material de la inhomogeneïtat i el del material de la matriu:  $\frac{E_i}{E_m}$ . En els estudis precedents, la duresa relativa valia 4,4 mentre que en aquest cas, val 6,1. A pesar d'aquesta

diferència, el traçat obtingut en aquest cinqué cas d'estudi és pràcticament idèntic a l'obtingut en el cas 4 (Figura 44). Per tant, podem concloure que la duresa relativa no té influència sobre la tensió de Von Mises a l'escala macroscòpica  $\sigma$ , en tot cas, els eventuais efectes estan difuminats pel material matriu present en la metainclusió. No obstant això, encara que a l'interior del domini de la metainclusió les descripcions macroscòpica i microscòpica de la tensió de Von Mises no estan obligades a seguir la mateixa tendència, podem observar que l'amplitud de la tensió difereix considerablement entre les dues descripcions. El que justifica aquesta diferència de comportament entre l'escala macroscòpica i microscòpica és el fet que a la interfície entre la matriu i la inhomogeneïtat, existeix una discontinuïtat de tensió produïda pel canvi de domini físic i, per tant, de propietats materials i a mesura que ens allunyem de la discontinuïtat, la corba de tensió tendeix cap al valor de la tensió a l'infinit. Aleshores, quan més matriu hi ha present en la metainclusió, més ràpidament tendirà la corba de tensió de Von Mises al valor de tensió a l'infinit. Llavors, la tensió de Von Mises abasta la configuració d'equilibri a l'interior del domini de la metainclusió i açò provoca que la corba de tensió de Von Mises macroscòpica no puga aproximar-se al valor de referència, donat per la tensió de Von Mises a l'escala microscòpica. Aquesta és, per tant, la causa de la diferència entre els perfils de tensió equivalent quan la fracció volumètrica d'inhomogeneïtat és inferior a 1, és a dir quan la inhomogeneïtat és més menuda que la metainclusió.

#### Estudi 4) Influència de la presència de diverses inhomogeneïtats

En aquest últim cas, hem volgut estudiar l'impacte que diverses inhomogeneïtats de diferent natura geomètrica contingudes en la subsuperfície poden tenir sobre la tensió de Von Mises. Les inhomogeneïtats que hem definit en la metainclusió estan representades en la següent figura:

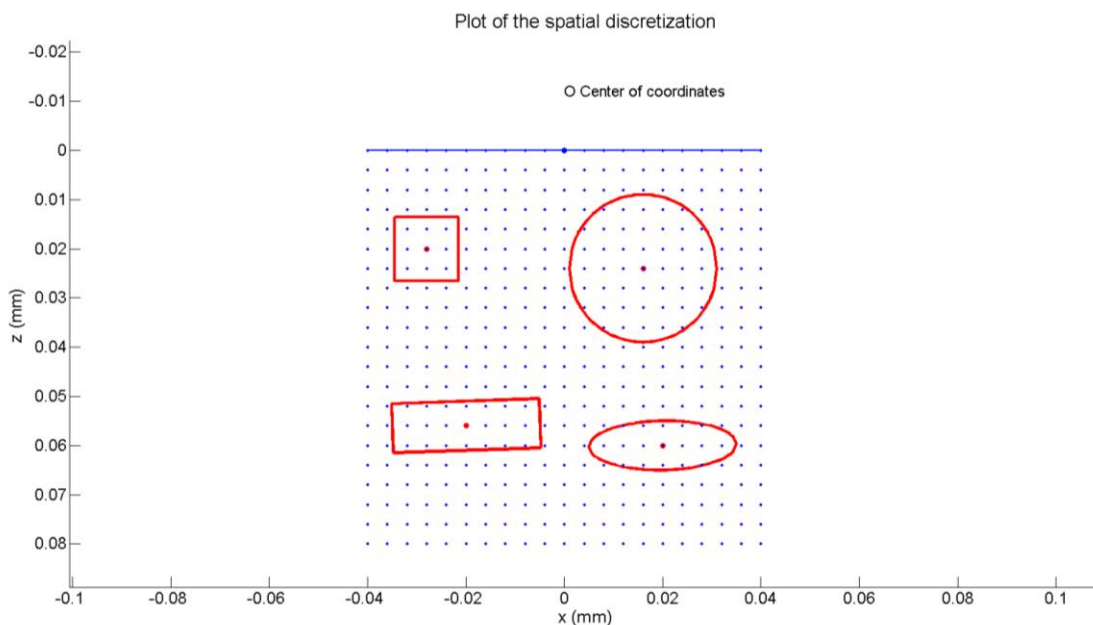


Figura 46: Representació de les inhomogeneïtats contingudes per la metainclusió (cas 6)

Com que la metainclusió conté quatre inhomogeneïtats situades relativament pròximes les unes de les altres, tindrem en compte les influències mútues entre elles. La definició d'aquest cas d'estudi és la següent:

Cas 6: Microscòpic	Cas 6: Macroscòpic
<b>Propietats Geomètriques</b>	<b>Propietats Geomètriques</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b></li> <li>- Nombre de punts en la metainclusió segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>21</b></li> <li>- Pas de mallatge: <b>0,004 mm</b></li> <li>- Tipus de contacte: esfera (radi = 20 mm) - pla</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Nombre màxim de punts segons la direcció x (els mateixos segons y i z): <b>81</b></li> <li>- Pas de mallatge: <b>0,04 mm</b></li> <li>- Tipus de contacte: esfera (radi = 20 mm) - pla</li> </ul>
<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>	<b>Propietats de les Inhomogeneïtats</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)</li> <li>- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains (per a totes les inclusions): 0</li> <li>- mutuallInfluence</li> <li><b>1) Inclusió cúbica:</b></li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(-0,028 ; 0 ; 0,02)</b> mm</li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,013 ; 0,013 ; 0,013)</b> mm</li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) °</li> <li>- Mòdul de Young: E = 500 GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li><b>2) Inclusió el·lipsoidal:</b></li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0,02 ; 0,01 ; 0,06)</b> mm</li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,03 ; 0,01 ; 0,01)</b> mm</li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0; 0; 1,0854) °</li> <li>- Mòdul de Young: E = 700 GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li><b>3) Inclusió esfèrica:</b></li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0,016 ; -0,01 ; 0,024)</b> mm</li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,03 ; 0,03 ; 0,03)</b> mm</li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0 ; 0 ; 0) °</li> <li>- Mòdul de Young: E = 400 GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li><b>4) Inclusió prismàtica rectangular:</b></li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(-0,02 ; -0 ; 0,056)</b> mm</li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,03 ; 0,02 ; 0,01)</b> mm</li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0 ; 0 ; 1,9708) °</li> <li>- Mòdul de Young: E = 500 GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Coordenades / Components en l'ordre: (x,y,z)</li> <li>- Centre de la inhomogeneïtat: <b>(0 ; 0 ; 0,2)</b> mm</li> <li>- Grandària de la inhomogeneïtat: <b>(0,078 ; 0,078 ; 0,078)</b> mm</li> <li>- Orientació de la inhomogeneïtat: (0, 0, 0) rad</li> <li>- Mòdul de Young: E = 500 GPa</li> <li>- Coeficient de Poisson: <math>\nu = 0,3</math></li> <li>- Ordre del desenvolupament polinomial de les eigenstrains: 0</li> <li>- Tipus d'inclusió: <b>cúbica</b></li> </ul>
<b>Tipus de Contacte</b>	<b>Tipus de Contacte</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força Normal Imposada</li> <li>- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)</li> <li>- InfiniteSolid: 30 0 50 0 0 0 →</li> <li><b><math>\sigma_{11} = 30</math> MPa; <math>\sigma_{33} = 50</math> MPa</b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Força Normal Imposada</li> <li>- Contacte rígid (sense càlcul de lliscaments)</li> <li>- InfiniteSolid: 30 0 50 0 0 0 →</li> <li><b><math>\sigma_{11} = 30</math> MPa; <math>\sigma_{33} = 50</math> MPa</b></li> </ul>
<b>Càrrega</b>	<b>Càrrega</b>
- Força normal: 0,001 N	- Força normal: 50 N
<b>Materials</b>	<b>Materials</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mòdul de Young indentador: <math>E_1 = 114,6</math> GPa</li> <li>- Coef. de Poisson indentador: <math>\nu_1 = 0,3</math></li> <li>- Mòdul de Young indentat: <math>E_2 = 114,6</math> GPa</li> <li>- Coef. de Poisson indentat: <math>\nu_2 = 0,3</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mòdul de Young indentador: <math>E_1 = 114,6</math> GPa</li> <li>- Coef. de Poisson indentador: <math>\nu_1 = 0,3</math></li> <li>- Mòdul de Young indentat: <math>E_2 = 114,6</math> GPa</li> <li>- Coef. de Poisson indentat: <math>\nu_2 = 0,3</math></li> </ul>
<b>Algorithme de résolution</b>	<b>Algorithme de résolution</b>
Mètode de Chiu ComputeOnLargeZone	Mètode de Chiu ComputeOnLargeZone

Taula 12: Definició d'un càlcul a dues escales amb un cúmul d'inhomogeneïtats dures sotmeses a tracció de gran amplitud

La tensió de Von Mises que hem trobat segons l'eix x és la següent:

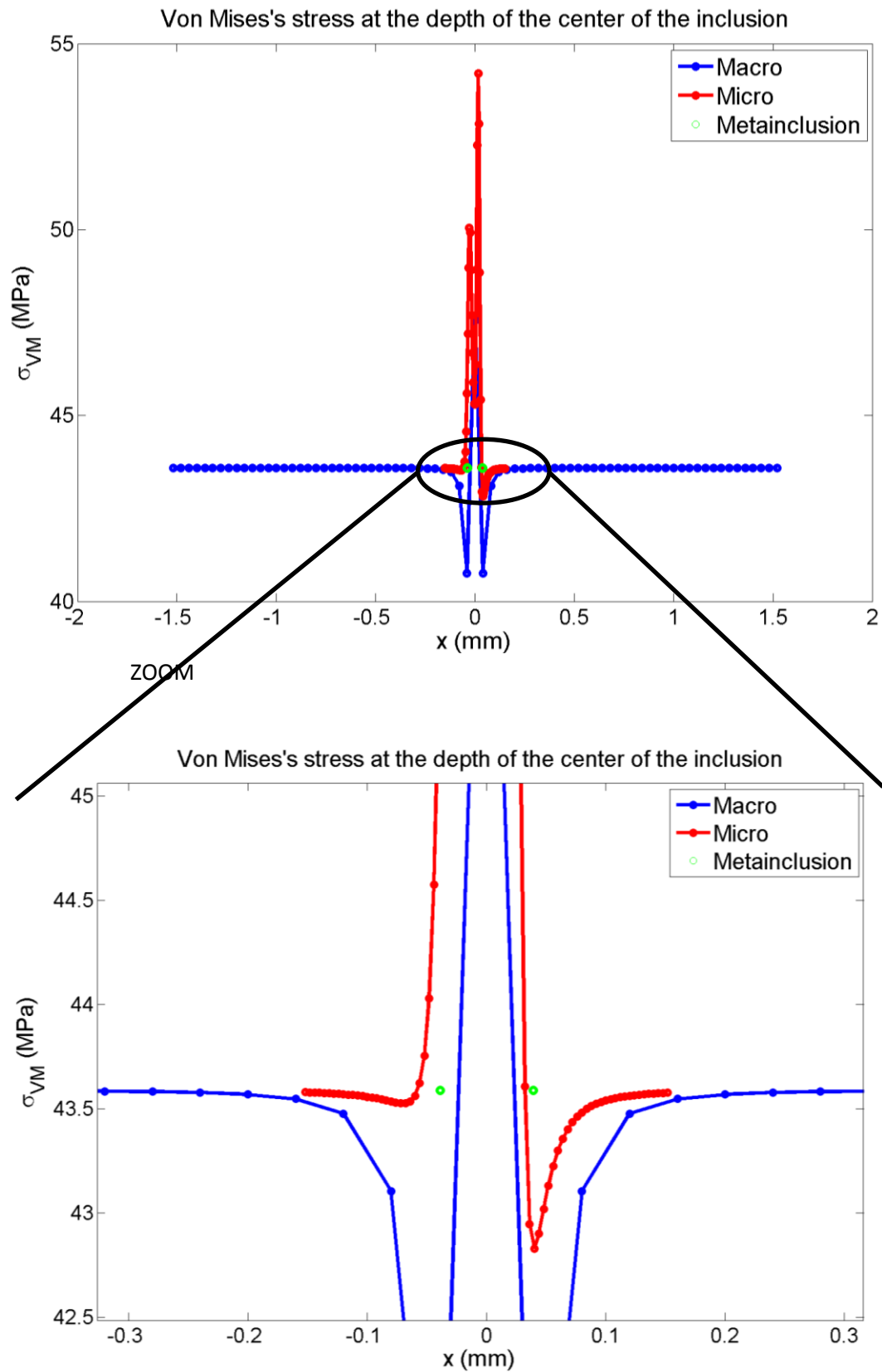


Figura 47: Evolució de la tensió de Von Mises segons l'eix x en el pla  $y = 0$  per a una profunditat  $z$  igual a la del centre de la inhomogeneïtat (cas 6)



El fet d'haver definit una metainclusió que conté quatre inhomogeneïtats diferents dona lloc a un perfil de tensió de Von Mises microscòpica un poc tortuós. Evidentment, la representació macroscòpica és incapaç de traduir totes les variacions induïdes per les quatre inhomogeneïtats que han sigut definides a l'escala microscòpica ja que el nombre de punts de càlcul a l'escala macroscòpica és considerablement inferior a la de la discretització microscòpica. En termes d'aparença, l'evolució de la tensió de Von Mises macroscòpica està relativament pròxima a la microscòpica quan la tensió tendeix cap al seu valor a l'infinit però en les immediacions de la metainclusió, la tensió macroscòpica no aconsegueix seguir la mateixa tendència que la microscòpica. Per tal de ser més precisos en les nostres conclusions, ens interessem al traçat de l'error relatiu de la tensió de Von Mises:

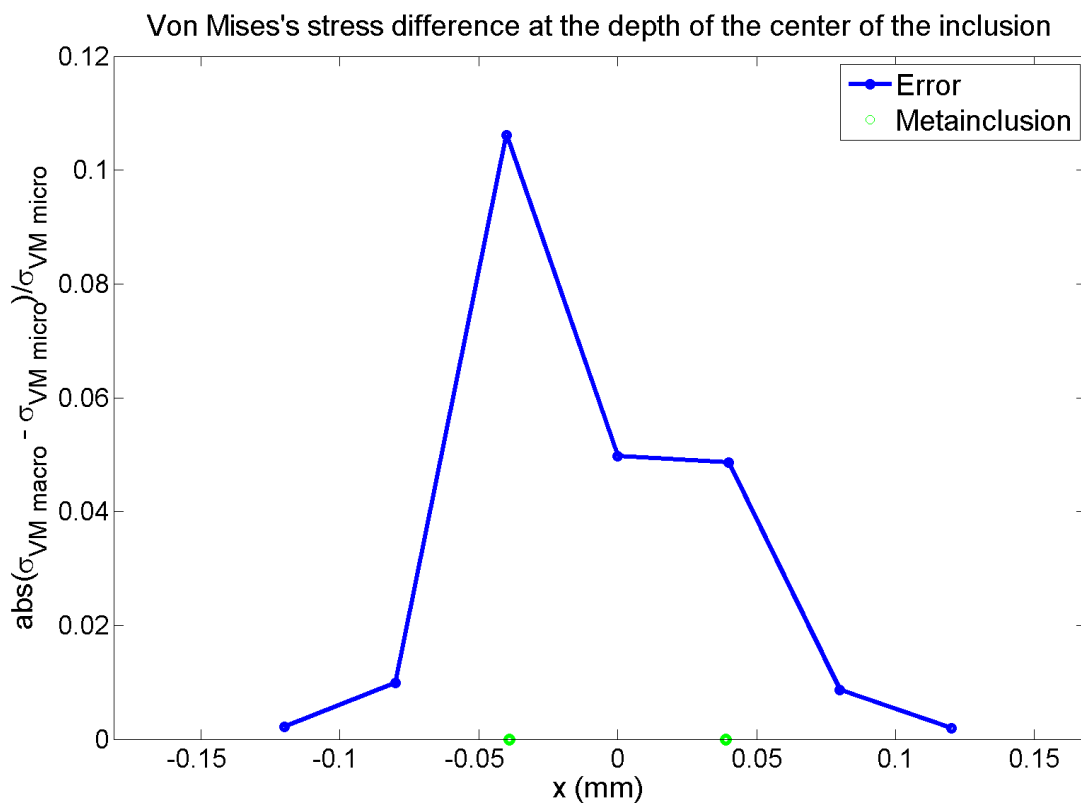


Figura 48: Error entre la tensió de Von Mises a l'escala macroscòpica i microscòpica (cas 6) sobre els punts de càlcul a l'escala macroscòpica

Gràcies a aquesta figura podem destacar que, sobre els punts de discretització de l'escala macroscòpica<sup>4</sup>, l'error relatiu més gran entre la tensió de Von Mises macroscòpica i microscòpica val 11%. Tenint en compte la gran quantitat de simplificacions que han sigut realitzades per a passar d'una metainclusió amb 4 inclusions equivalents a l'escala microscòpica a una metainclusió que posseeix un comportament equivalent a l'escala macroscòpica, es pot considerar que la diferència és tolerable. No obstant això, observant la Figura 47, cal assenyalar que potser la presència de més punts de càlcul a l'escala macroscòpica ens hauria pogut permetre revelar errors relatius més importants.

<sup>4</sup> L'error relatiu ha sigut traçat sobre els punts de la discretització macroscòpica ja que són els únics que coincideixen entre la descripció microscòpica i macroscòpica del sòlid estudiat.

Així, per a concloure sobre aquest últim estudi, podem assenyalar que encara que l'algoritme funcione correctament, la qual cosa era finalment l'objectiu d'aquest treball, no podem pronunciar-nos de manera general sobre la precisió dels resultats per a configuracions amb diverses inhomogeneïtats en la subsuperfície perquè encara que, concretament en aquest estudi amb la metainclusió anisòtropa a l'escala microscòpica, els errors relatius no són molt importants, s'haurien de realitzar més tests per a poder determinar el comportament general de l'algoritme però desgraciadament no s'ha disposat de temps per a fer-ho.

#### 7.2.4) Conclusió de la modelització multiescala

A partir dels diferents estudis que hem realitzat per a intentar validar l'algoritme de modelització a dues escales, podem concloure que el paràmetre que juga un paper capital en l'evolució dels perfils de tensió de Von Mises a l'escala macroscòpica és la fracció volumètrica d'inhomogeneïtat present en la metainclusió. Com a recordatori, l'interés que la tensió de Von Mises obtinguda a l'escala macroscòpica s'aproxime de la representada a l'escala microscòpica és permetre'ns discretitzar grollerament el domini geomètric d'estudi perquè els càlculs siguin executats ràpidament tot i sent capaços de descriure l'estat elàstic al voltant de les inhomogeneïtats de la manera més precisa possible.

Com ho hem vist a través dels diferents estudis que han sigut detallats prèviament en aquesta memòria, el funcionament de l'algoritme és correcte ja que permet arribar a l'equilibri de tensió a mesura que ens allunyem de les immediacions de la inhomogeneïtat. Pel que fa a la precisió dels resultats, quan només teníem una sola inhomogeneïtat en la subsuperfície, les corbes de tensió macroscòpica i microscòpica estaven més pròximes l'una de l'altra quan la fracció volumètrica d'inhomogeneïtat era molt feble. En canvi, quan aquesta fracció volumètrica era més important a l'interior de la metainclusió, es produïen desviacions entre els dos perfils de tensió, encara que, en termes de tendència ambdues continuaven estant pròximes.

No obstant això, les conclusions resulten menys intuïtives quan la metainclusió conté diverses inhomogeneïtats a l'escala microscòpica. De fet, s'han de realitzar més estudis paramètrics per a poder jutjar la precisió dels resultats obtinguts per l'algoritme de modelització a dues escales en aquests cas.

Desgraciadament, per manca de temps, no hem pogut tenir en compte finalment els fenòmens de contacte, cosa que ens haguera permés interrogar-nos, entre altres, sobre com definir la metainclusió en el codi microscòpic sabent que el gradient de tensió experimentat per la inhomogeneïtat com a conseqüència del contacte no és el mateix segons la profunditat de la dita inhomogeneïtat.

Una de les problemàtiques d'aquest treball era que el tensor d'eigenstrains és un tensor d'ordre 2 simètric, és a dir, amb 6 components que cal fer variar de tal manera que aquest tensor en la configuració macroscòpica pugui representar la microestructura del sòlid en qüestió a l'escala microscòpica conservant l'equilibri energètic. Llavors, com ho havíem precisat prèviament, en comptes de fer variar els sis coeficients del tensor d'eigenstrain, la

descomposició multiplicativa del tensor d'eigenstrain macroscòpic ( $\underline{\underline{E}}_{\text{macro}}^* = \alpha \cdot \underline{\underline{d}}$ ) fa que l'únic coeficient sobre el qual podem actuar per a abastar l'equilibri és l'escalar  $\alpha$ , la qual cosa és més simple que haver de modificar al mateix temps tots els coeficients del tensor d'eigenstrain. Finalment, en vista dels resultats que s'han presentat en aquesta memòria, podem jutjar que la descomposició multiplicativa de l'eigenstrain macroscòpica és correcta, almenys en les configuracions en què només hi ha una inhomogeneïtat en la subsuperfície. Per tant, la hipòtesi que la direcció de l'eigenstrain macroscòpica és igual a la de la mitjana de les deformacions totals a l'escala local ha estat ben realitzada.

## 8.) Resultats finals

Aquest treball ha suposat per a mi la oportunitat de participar en un projecte d'investigació, que s'emmarca dins del desenvolupament del codi de càlcul ISAAC, implementat en el LaMCoS per a l'estudi de la mecànica de contactes. L'objectiu d'aquest treball era implementar una modelització multiescala en el codi. En les primeres etapes d'aquest projecte, s'han realitzat estudis paramètrics per a apropiari-nos del sentit físic dels problemes tractats i, en un segon temps, hem abordat la modelització multiescala en el context dels mètodes semianalítics.

Pel que fa a la modelització multiescala, podem concloure que el plantejament energètic retingut és correcte per a sòlids que contenen una sola inhomogeneïtat mentre que les configuracions amb diverses inhomogeneïtats han de ser verificades amb simulacions numèriques suplementàries. Amb els resultats obtinguts per ara, podem afirmar que el funcionament de l'algoritme no és plenament satisfactori per als casos en què considerem diverses inhomogeneïtats ja que la tensió macroscòpica no segueix la tendència de la tensió microscòpica. Les perspectives de continuació d'aquest treball ens portaran necessàriament a interrogar-nos sobre la consideració i la implementació dels fenòmens de contacte en l'algoritme de modelització a dues escales així com sobre la possibilitat d'afegir un nou paràmetre en la modelització que ens permeti eliminar la influència del material matriu en la metainclusió. Encara que de moment, la seua definició resta un poc imprecisa, considerem definir un paràmetre capaç d'ajustar el volum de la metainclusió a l'escala microscòpica per a poder minimitzar la quantitat de matriu present en la metainclusió. A més, s'haurà d'estudiar la influència de la definició del volum de treball i la seua natura geomètrica sobre els resultats ja que en aquest treball sempre han sigut considerats com prismes paral·lelepèdics.

## 9.) Planificació

No aplica.

## **10.) Ordre de prioritat entre els documents**

L'ordre de prioritat dels documents d'aquest projecte són:

- Memòria
- Annexos
- Pressupost

Per a l'elaboració del present document s'ha seguit la normativa UNE 157001-2014 per a la redacció de projectes tècnics. No obstant això, atés que aquest projecte està més orientat a investigació no aplica la inclusió de plànols, plecs de condicions ni mesures.





# ANNEXOS





## Annexos

### A.1) Càlcul dels paràmetres d'Hertz

En el context dels estudis paramètrics, la configuració de contacte que ha sigut retinguda és de tipus: esfera - pla. Per tant, a continuació, només detallarem el càlcul dels paràmetres d'Hertz que corresponen a aquesta configuració:

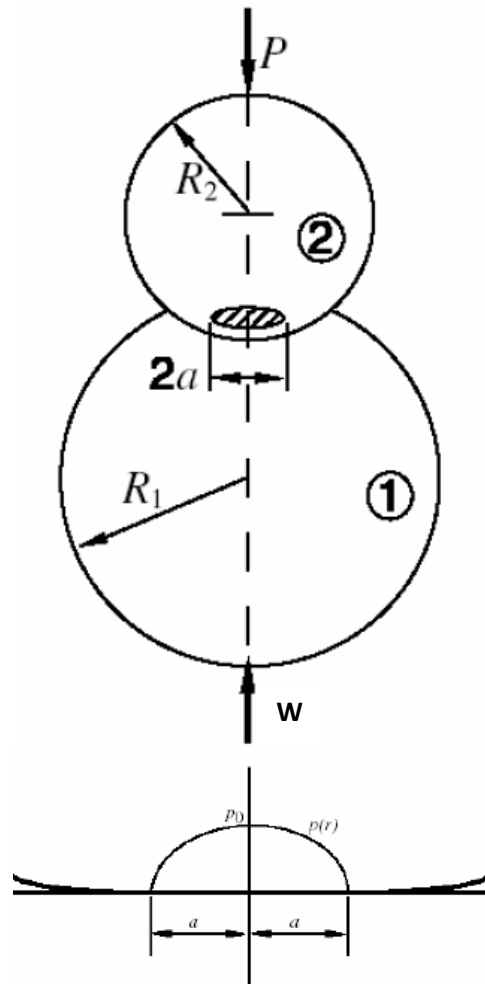


Figura A. 1 Contacte d'Hertz entre dues esferes

El contacte esfera - pla pot ser considerat com un cas particular del contacte esfera - esfera en el qual una de les esferes és de radi infinit.

El radi del cercle de contacte pot ser obtingut amb l'expressió:

$$a = \left[ \frac{3\pi R_x W}{4 E_{eq}} \right]^{1/3} = \left[ \frac{3 R_x W}{2 E'} \right]^{1/3} \quad (75)$$

On

Radi de curvatura reduït: 
$$R_x = \left[ \frac{1}{R_{x1}} + \frac{1}{R_{x2}} \right]^{-1} \quad (76)$$

Mòdul d'elasticitat reduït:  
Unitat (Pa) 
$$E' = \left[ \frac{1}{2} \left\{ \frac{1-\nu_1^2}{E_1} - \frac{1-\nu_2^2}{E_2} \right\} \right]^{-1} \quad (77)$$

Mòdul d'elasticitat equivalent:  
Unitat (Pa) 
$$E_{eq} = \left[ \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{1-\nu_1^2}{E_1} - \frac{1-\nu_2^2}{E_2} \right\} \right]^{-1} \quad (78)$$

$E_i$  i  $\nu_i$  representen respectivament el mòdul de Young i el coeficient de Poisson del sòlid  $i$ .

$W$  representa la càrrega normal.

La pressió màxima d'Hertz pot ser calculada a través de l'expressió:

$$p_0 = \frac{3}{2\pi^2} \left[ \frac{16\pi W E_{eq}^2}{9 R_x^2} \right]^{1/3} = \frac{3}{2\pi} \left[ \frac{4\pi W E'^2}{9 R_x^2} \right]^{1/3} \quad (79)$$

## A.2) Nota tècnica

Per a la realització del codi a dues escales, ens hem basat sobre el codi desenvolupat durant el treball fi de màster de Simon Le Moal [LeM14], qui ha implementat en el codi els càlculs en medi infinit. A continuació, no detallarem les modificacions que ell ha aportat al codi, ja que açò es pot trobar als annexos de la seua memòria de màster, sinó que especificarem les noves rutines creades i les modificacions realitzades sobre el codi existent.

### A.2.1) Codi Microscòpic

- **multiscale.f90**: aquest fitxer ha sigut creat per a la implementació de l'algoritme de modelització a dues escales. El volum de la metainclusió (o volum de la zona de treball) està definit en el codi. Per defecte, el volum de la metainclusió està definit amb 21 punts de discretització en cada direcció de l'espai. Si es canvien els extrems de la metainclusió, caldrà modificar-les també sobre les condicions que permeten calcular el volum de la metainclusió a l'escala microscòpica. Els coeficients d'influència necessaris per al càlcul d'energia de la metainclusió a l'escala macroscòpica també estan definits en el codi. Els coeficients per defecte corresponen a una inhomogeneïtat cúbica la natura geomètrica i les propietats materials de la qual són especificades en el codi. El subprograma "multiscale.f90" permet obtenir en sortida l'eigenstrain macroscòpic a injectar en el codi macroscòpic, la qual cosa permet passar de la descripció microscòpica a la macroscòpica.

- **Eigenstrain\_Chui.f90**: aquest fitxer ha sigut modificat per a aplicar el mètode de descomposició de Chiu quan tenim un formalisme de tipus sòlid infinit, anul·lant les eigenstrains de la inclusió espill.

- **SORTIES.F90**: aquest fitxer ha sigut modificat per a indicar els "outputs" suplementaris que desitgem en sortida del càlcul (tensió i deformació total a l'escala microscòpica). És també aquest fitxer el que crida el subprograma "multiscale.f90".

### A.2.2) Codi Macroscòpic

- **Eigenstrain\_Chui.f90**: aquest fitxer ha sigut modificat de tal manera que es puga imposar l'eigenstrain proporcionat pel codi microscòpic. Per a fer-ho, l'eigenstrain macroscòpic obtingut en sortida del càlcul a l'escala microscòpica ha de ser copiat al final de la línia que defineix totes les dades materials de la metainclusió a l'escala macroscòpica en el fitxer Inclusionisotrope.don. Així, l'eigenstrain calculat pel codi macroscòpic és substituït pel que hem obtingut durant el càlcul inicial amb el codi microscòpic.

- **SigmacoeffiDamage.f90**: aquest fitxer ha sigut modificat per a obtenir com output els 36 coeficients d'influència que corresponen al centre de la metainclusió a l'escala macroscòpica. Com a recordatori, encara que a l'escala microscòpica, una mateixa metainclusió pot contenir

un cúmul d'inhomogeneïtats, a l'escala macroscòpica, aquest és substituït per un comportament equivalent. Per tant, necessitem recuperar els valors dels coeficients d'influència del centre de la metainclusió per a ser capaços de calcular l'energia a l'escala macroscòpica.

- **SORTIES.F90**: aquest fitxer ha sigut modificat per a definir els fitxers d'output suplementaris: tensió i deformació total a l'escala macroscòpica.





**PRESSUPOST**





## Pressupost

En aquest apartat de la memòria presentem una estimació del cost del treball dut a terme.

Quantitat	Descripció	Preu / unitat	Preu total
700	Nombre d'hores de treball	15,00 €	10,500 €
100	- Formació		
200	- Preparació dels càlculs		
250	- Posttractament i anàlisi dels resultats		
150	- Redacció de la memòria + presentació		
1000	Hores de càlcul	6,00 €	6,000 €
1	Codi de càlcul intern (ISAAC)	Difícil de xifrar ja que codi de càlcul desenvolupat en intern des de 2001.	
	Cost total		16,500 €
	IVA (21%)		3,465 €
			19,965 €

Taula 13: Quadre recopilatori del pressupost del projecte

Per tant, el pressupost total del treball realitzat és de 19,965 €.



