

DISEÑO COMPUTACIONAL DE MATERIALES COMPUESTOS MICROHETEROGÉNEOS

Federico C. Buroni* y Adrián P. Cisilino†

* Grupo de Mecânica Aplicada. CNPq
Universidade Federal de Rio Grande do Sul,
Sarmiento Leite 425, Centro CEP 90050-170 Porto Alegre, Brasil
e-mail: fedeburoni@mecanica.ufrgs.br, web page: <http://www-gmap.mecanica.ufrgs.br>

† División Soldadura y Fractomecánica-INTEMA-CONICET
Universidad Nacional de Mar del Plata,
Av. Juan B. Justo 4302 (7600), Mar del Plata, Argentina
e-mail: cisilino@fi.mdp.edu.ar

Key words: Algoritmos genéticos, propiedades mecánicas efectivas, materiales micro-heterogéneos particulados con distribución aleatoria.

Abstract. *Se presenta en este trabajo una metodología para el diseño de materiales compuestos micro-heterogéneos de partículas con distribución aleatoria utilizando algoritmos genéticos y de búsqueda directa. Se muestra que estos métodos de optimización, en los cuales no es necesario evaluar las derivadas de la función objetivo, son adecuados para el diseño de materiales. Se implementa para esto un paquete computacional con programas comerciales y rutinas en MATLAB desarrolladas por los autores.*

El diseño del material implica la selección de materiales para las dos fases del compuesto (matriz y partículas) y la fracción volumétrica de estas últimas para obtener las propiedades mecánicas macroscópicas deseadas. El problema se resuelve en dos dimensiones y con una ley de comportamiento elástica lineal.

Las propiedades macroscópicas del material son evaluadas como 'relaciones entre promedios' de las variables involucradas. Esta relación debe realizarse sobre una muestra representativa del material que incorpore la cantidad suficiente de micro-heterogeneidades. Esta muestra es referida en la literatura como Elemento de Volumen Representativo (EVR). Los campos internos de las distintas variables son calculados sobre la base de un análisis estadístico sobre una serie de EVR sometidos a una carga de prueba utilizando la metodología de 'teoría de campos medios' o 'teoría de propiedades efectivas'.

INTRODUCCIÓN

La clave del éxito de muchos componentes estructurales modernos es el comportamiento “a medida” del material para su aplicación. Una forma relativamente sencilla de obtener una respuesta efectiva deseada es mejorar las propiedades de un material base (matriz) con el agregado de material (micro-heterogeneidades) en una escala menor a la considerada, es decir, manipular su microestructura. Dependiendo del tipo, geometría y orientación de la fase de refuerzo los compuestos pueden ser clasificados en *particulados*, *discontinuos* o de *fibras cortas y continuos* o de *fibras largas*. En este trabajo se estudian compuestos particulados en los que la distribución en el espacio de las partículas es aleatoria. La filosofía básica en la construcción de tales materiales es seleccionar combinaciones de materiales de las fases para producir propiedades macroscópicas o efectivas deseadas. Por ejemplo, en aplicaciones de ingeniería estructural la elección clásica es elegir una fase de partículas más dura que sirve como agente rigidizante de un material dúctil de la matriz.

Existen una variedad de dificultades en el diseño computacional de propiedades mecánicas efectivas de materiales compuestos particulados con distribución aleatoria. Los tres principales problemas son: (i) el amplio conjunto de variables de diseño tales como topología de las partículas, la fracción de volumen de la fase de refuerzo y las propiedades mecánicas del material de la matriz y de las partículas, lo que conduce a funciones objetivos asociadas altamente no convexas; (ii) las funciones objetivo asociadas no son continuamente diferenciables con respecto al espacio de diseño, principalmente debido restricciones de diseño en la microescala tal como límites en la intensidad del campo de tensiones local deseado, y (iii) la respuesta efectiva de diversas muestras de tamaño finito de igual volumen pero diferentes distribuciones aleatorias de las partículas exhiben fluctuaciones resultando en un ruido amplificado en estrategias de optimización donde la sensibilidad o comparaciones de la función objetivo son necesarias. Claramente, los métodos de optimización determinísticos clásicos basados en gradientes no son adecuados para resolver este tipo de problemas. Una alternativa eficiente es la utilización de los llamados “algoritmos genéticos”, formulados sobre la base de un conjunto de procedimientos y técnicas basadas en principios de selección natural. Existe una variedad de tales métodos los cuales emplean el concepto de evolución de las especies tales como reproducción, mutación y cruzamiento [1].

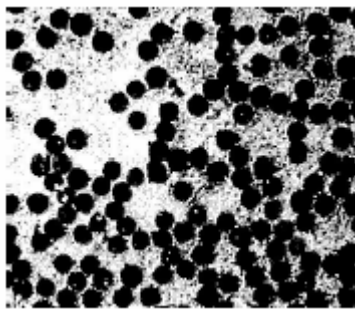
La simulación numérica directa de estructuras compuestas por materiales micro-heterogéneos incorporando todos los detalles de la microescala resulta en un costo computacional muy por encima del disponible actualmente. Por este motivo, en ingeniería estructural son utilizados modelos de materiales homogeneizados o regularizados donde el material es tratado como si fuese homogéneo en la macroescala con propiedades efectivas según sean los comportamientos en las escalas inferiores. Existen muchas formas de obtener propiedades efectivas como por ejemplo Teoría matemática de homogeneización [2], o métodos analíticos y semianalíticos como bandas de Hashin-Shtrikman, método auto-consistente o método de Mori-Tanaka [3,4]. En este trabajo es utilizado un esquema de aproximación computacional junto con el método de análisis EVR lineal o también llamado teoría de campos medios o teoría de propiedades efectivas [5]. La idea del método es

computar relaciones entre promedios de las variables involucradas. Esta relación debe realizarse sobre una muestra representativa del material que incorpore la cantidad suficiente de micro-heterogeneidades (esta estrategia es la respuesta al problema *iii* identificado en un párrafo anterior). Esta muestra es referida en la literatura como Elemento de Volumen Representativo (EVR). Los campos internos de las distintas variables son calculados sobre la base de un análisis estadístico sobre una serie de EVR sometidos a una carga de prueba.

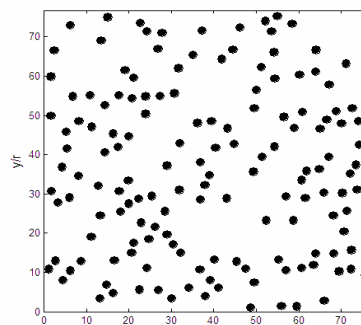
Se presenta en este trabajo la implementación de algoritmos genéticos para el diseño de materiales compuestos micro-heterogéneos de partículas con distribución aleatoria. El algoritmo genético es complementado con un algoritmo de búsqueda directa en la última etapa de la optimización para obtener un ajuste fino de las variables de diseño. El diseño del material implica la selección de materiales para las dos fases del compuesto (matriz y partículas) y la fracción volumétrica de estas últimas para obtener las propiedades mecánicas macroscópicas deseadas. El problema se resuelve en dos dimensiones y con una ley de comportamiento lineal.

ENSAYO COMPUTACIONAL DEL MATERIAL

Una variedad de materiales son caracterizados por heterogeneidades embebidas en una matriz base homogénea, como por ejemplo una aleación de aluminio-boro (Figura 1-a). La microestructura considerada en este trabajo consiste de una matriz homogénea e isotrópica con inclusiones esféricas homogéneas e isotrópicas distribuidas en forma aleatoria (Figura 1-b). El problema es asumido bidimensional para poder ser resuelto con los recursos computacionales disponibles (PC de escritorio).



(a)



(b)

Figura 1. (a) Microestructura de aleación de aluminio 6061 reforzado con partículas de boro (x250) (b) Microestructura considerada en este trabajo.

La función objetivo para el problema de optimización es seleccionada como la diferencia entre las propiedades mecánicas efectivas y aquellas resultantes de la microestructura optimizada. Como el comportamiento isotrópico lineal de un material es completamente representado por dos constantes independientes, la expresión para la función objetivo puede ser escrita como:

$$\Pi = \left| \omega_{\kappa} \frac{(\kappa^* - \kappa_D^*)}{\kappa_D^*} \right| + \left| \omega_{\mu} \frac{(\mu^* - \mu_D^*)}{\mu_D^*} \right| \quad (1)$$

donde κ^* y μ^* son el modulo de rigidez volumétrica efectivo y el modulo de corte efectivo. El subíndice D denota constante elástica “deseada”. Los coeficientes ω_{κ} y ω_{μ} son factores de peso que son establecidos por el usuario para hacer que los dos términos de la derecha de la expresión (1) sean de la misma magnitud.

Las propiedades mecánicas efectivas del material heterogéneo son calculadas siguiendo el procedimiento propuesto por Zohdi [5], el que consiste en evaluar la siguiente relación entre promedios:

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_{\Omega} = C_{ijkm}^* \langle \varepsilon_{km} \rangle_{\Omega} \quad (2)$$

la que escrita en forma explícita y considerando la notación de Voigt resulta

$$\begin{Bmatrix} \langle \sigma_{11} \rangle_{\Omega} \\ \langle \sigma_{22} \rangle_{\Omega} \\ \langle \sigma_{33} \rangle_{\Omega} \\ \langle \sigma_{23} \rangle_{\Omega} \\ \langle \sigma_{13} \rangle_{\Omega} \\ \langle \sigma_{12} \rangle_{\Omega} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11}^* & c_{12}^* & c_{13}^* & c_{14}^* & c_{15}^* & c_{16}^* \\ c_{21}^* & c_{22}^* & c_{23}^* & c_{24}^* & c_{25}^* & c_{26}^* \\ c_{31}^* & c_{32}^* & c_{33}^* & c_{34}^* & c_{35}^* & c_{36}^* \\ c_{41}^* & c_{42}^* & c_{43}^* & c_{44}^* & c_{45}^* & c_{46}^* \\ c_{51}^* & c_{52}^* & c_{53}^* & c_{54}^* & c_{55}^* & c_{56}^* \\ c_{61}^* & c_{62}^* & c_{63}^* & c_{64}^* & c_{65}^* & c_{66}^* \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \langle \varepsilon_{11} \rangle_{\Omega} \\ \langle \varepsilon_{22} \rangle_{\Omega} \\ \langle \varepsilon_{33} \rangle_{\Omega} \\ 2 \langle \varepsilon_{23} \rangle_{\Omega} \\ 2 \langle \varepsilon_{13} \rangle_{\Omega} \\ 2 \langle \varepsilon_{12} \rangle_{\Omega} \end{Bmatrix} \quad (3)$$

donde σ y ε son los campos de tensores de tensión y deformación dentro de la muestra de material con volumen $|\Omega|$. En (2) y (3) se usa la definición del operador $\langle \cdot \rangle_{\Omega} \stackrel{def}{=} \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \cdot d\Omega$.

Para que la relación (2) o (3) sea válida la misma debe ser computada tal que el dominio Ω sea definido suficientemente grande para ser estadísticamente representativo de la microestructura del material (Elemento de Volumen Representativo o EVR). Entonces la muestra de material puede ser evaluada utilizando un modelo de elementos finitos a partir de la solución de los campos de tensión y deformación y estos resultados utilizados para determinar las constantes de la matriz de elasticidad. Nótese que en el caso anisótropo más general son necesarios 6 casos de carga linealmente independientes para obtener las 36 ecuaciones que permiten calcular las 36 constantes elásticas de la expresión (3). Sin embargo si el material tiene una respuesta efectiva isótropa solo un caso de carga con componentes esféricas y desviadoras distintas de cero es suficiente para determinar los módulos efectivos de dilatación volumétrica y de corte. Las constantes elásticas efectivas κ^* y μ^* pueden ser entonces evaluadas directamente usando las expresiones (4) y (5):

$$3\kappa^* = \frac{\left\langle \frac{tr\sigma}{3} \right\rangle_{\Omega}}{\left\langle \frac{tr\varepsilon}{3} \right\rangle_{\Omega}} \quad (4)$$

$$2\mu^* = \sqrt{\frac{\left\langle \sigma - \frac{tr\sigma}{3} I \right\rangle_{\Omega} : \left\langle \sigma - \frac{tr\sigma}{3} I \right\rangle_{\Omega}}{\left\langle \varepsilon - \frac{tr\varepsilon}{3} I \right\rangle_{\Omega} : \left\langle \varepsilon - \frac{tr\varepsilon}{3} I \right\rangle_{\Omega}}} \quad (5)$$

donde el símbolo “:” denota la operación definida por $\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij} B_{ij} = tr(\mathbf{A}^T \mathbf{B})$.

Las condiciones de borde en el ensayo computacional del material deben ser de desplazamiento lineal para el cumplimiento de la condición de energía de Hill [5], [3], [4]. También la matriz y las inclusiones deben estar perfectamente adheridas (sin separación de interfase) y el material debe estar en ausencia de fuerzas de cuerpo.

En este trabajo el problema elástico se resuelve por medio del Método de los Elementos Finitos (MEF) usando el programa comercial Abaqus Standard 6.4 (Hibbitt, Karlsson & Sorensen, RI. USA, 2005). Para facilitar la generación automática de mallas para las microestructuras se utiliza una estrategia de malla alineada. Esto resulta en que los bordes de los elementos coincidan con las interfases matriz-inclusión y por lo tanto los elementos no tienen discontinuidad del material. Siguiendo los resultados de trabajos previos [7], cada partícula es discretizada con 9 elementos en el diámetro como muestra la figura 2-a. La discretización del modelo se realiza usando elementos bilineales de 4 nodos con condición de tensión plana (CPS4R). La figura 2-b ilustra un resultado típico del campo de tensiones.

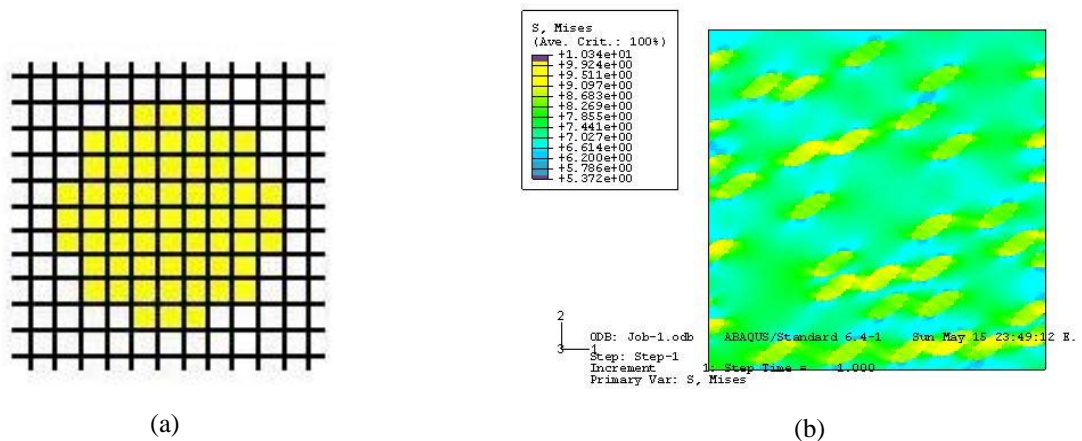


Figura 2. (a) Esquema de discretización de una partícula. (b) Un resultado típico del campo de tensiones de von Mises.

MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN DEL MATERIAL

Algoritmos genéticos

Los algoritmos genéticos son un conjunto de procedimientos y técnicas basadas en principios de selección natural. La popularidad de los AG se debe principalmente a que (i) no requieren continuidad y/o diferenciabilidad de la función objetivo, (ii) no requieren gran (re)formulación del problema, (iii) no son muy sensibles al procedimiento de inicialización, (iv) son menos propensos a converger a óptimos locales, y (v) son naturalmente paralelizables [1].

La idea de los AG está basada en el proceso evolutivo de los organismos biológicos de la naturaleza. Los individuos que tienen más éxito para adaptarse al medio ambiente tendrán más oportunidades de sobrevivir y reproducirse, mientras que los menos aptos serán eliminados. La combinación de las características de ancestrales de los individuos más aptos producirán individuos mejor adaptados que sus padres. Los AG procuran simular este proceso natural con la aplicación de operadores genéticos sobre una población inicial y sus próximas generaciones. Entonces el AG cambia en cada generación la población de individuos que representan posibles soluciones del problema hasta satisfacer un criterio de convergencia. Los pasos básicos de un AG son:

1. Generar aleatoriamente o con algún criterio, una población inicial.
2. El algoritmo crea una secuencia de nuevas poblaciones o generaciones. En cada paso se usan los individuos de la generación actual para crear la próxima generación según los siguientes pasos:
 - a. Calcula el valor de la función objetivo de cada individuo de la población.
 - b. Se ordenan los individuos según sea el valor de la función objetivo (“*ranking*”).
 - c. Se seleccionan los padres que tengan mejor valor de la función objetivo (según sea el *ranking*).
 - d. Se crean los hijos (*operación genética*). Los hijos pueden ser creados haciendo cambios aleatorios en un padre (*mutación*), o por combinación de un par de padres (*cruzamiento*).
 - e. Se substituye algunos o todos los individuos de la población por los hijos.
3. Se el criterio de convergencia no es satisfecho volver al paso 2.
4. Fin

Implementación

El algoritmo propuesto es implementado utilizando MATLAB. La evaluación de la función objetivo se realiza por medio de la función *fobjetivo.m*. Un esquema de esta función es ilustrado en la figura 3. Las variables de diseño son las variables de entrada de esta función. La subrutina *gera_adi.m* genera en forma aleatoria las coordenadas de las posiciones de las partículas, las cuales son almacenadas en el archivo *Coordinadas inclusiones.dat*. El número de

partículas es constante en todos los casos, independientemente de la fracción de volumen ϕ . Al mismo tiempo, el radio de las partículas es siempre unitario y usado para normalizar las dimensiones de la microestructura. La subrutina *adi2FEM.m* construye el archivo de entrada para ABAQUS el cual resulta en el archivo *Problema elástico.inp*. En este archivo las constantes elásticas de cada elemento son asignadas según este coincida con la posición de la matriz o de una partícula (ver figura 2-a). Este archivo también contiene coordenadas de los nodos, conectividad de la malla, condiciones de contorno, etc. Luego el problema es resuelto usando el programa ABAQUS en modo de comando y la solución (tensiones y deformaciones) es tabulada en el archivo *Solución FEM.dat*. Usando esos datos la subrutina *propiedades.m* computa las propiedades mecánicas efectivas siguiendo el esquema mencionado en la sección 2. Finalmente la función objetivo (1) es evaluada. Este esquema de evaluación de la función objetivo es usado junto con el Toolbox de MATLAB *Genetic Algorithm and Direct Search*, para la optimización de propiedades del material.

Método de búsqueda directa

El *método de búsqueda directa* (MBD), es usado luego de obtener un ajuste fino de las variables de diseño (operación que resulta computacionalmente costosa para el algoritmo genético). El MBD no requiere ninguna información del gradiente de la función objetivo.

El algoritmo utilizado forma parte del Toolbox “*Genetic Algorithm and Direct Search*” MATLAB. En cada iteración el algoritmo busca la solución del problema de optimización en un conjunto de puntos que determinan una *malla* alrededor del punto actual. La malla es formada sumando al punto actual un escalar múltiplo de un conjunto de vectores. La base de vectores independientes en este caso de tres variables de diseño es $\{[1\ 0\ 0], [0\ 1\ 0], [0\ 0\ 1], [-1\ 0\ 0], [0\ -1\ 0], [0\ 0\ -1]\}$. En este ejemplo, todos los puntos de la malla son evaluados en cada iteración. También se implementa la opción de “*cache*”. En una iteración cualquiera un punto de la malla puede coincidir con un punto de la malla de una iteración previa que ya fue evaluada y que no es óptimo del problema. Esta opción del MBD almacena la historia de puntos ya evaluados y el algoritmo chequea antes de evaluar un nuevo punto si este no está próximo a ellos con una cierta tolerancia. Si el algoritmo encuentra un punto en la malla que tiene mejor valor de la función objetivo que el actual, ese pasa a ser el nuevo punto actual de la siguiente iteración. Si no, reduce el tamaño de la malla. El algoritmo termina cuando se satisface algún criterio de convergencia.

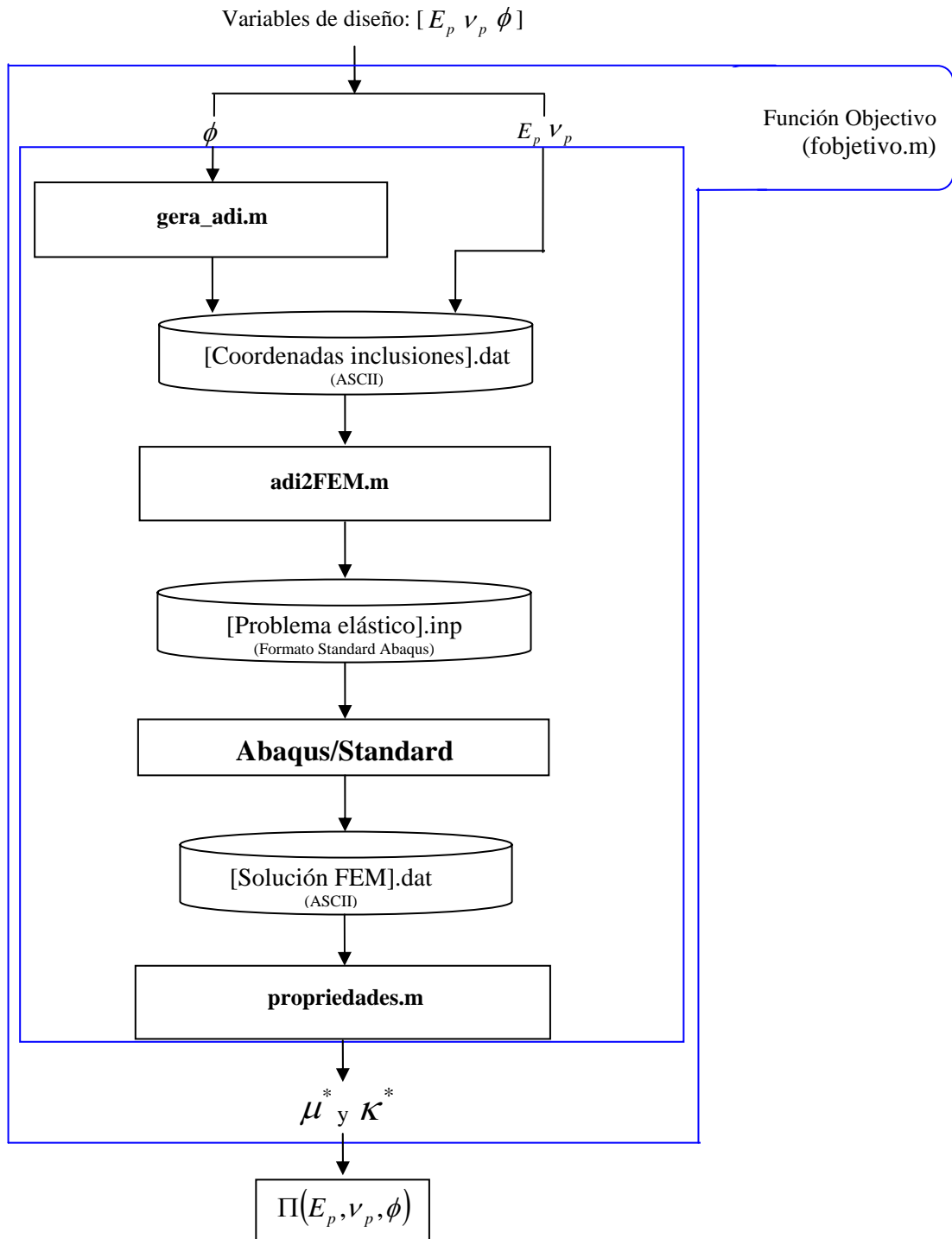


Figura 3. Esquema de la función *fobjetivo.m*

RESULTADOS

Ejemplo de aplicación

El desempeño y las capacidades del algoritmo son ilustrados en esta sección resolviendo un ejemplo de aplicación. Este consiste en el diseño de un material compuesto con matriz de aluminio con propiedades elásticas efectivas de $E_D^* = 67,5$ GPa y $\nu_D^* = 0,2$. El módulo de Young y el coeficiente de Poisson están relacionados al módulo de rigidez volumétrica y al modulo de corte por las conocidas expresiones (6a) y (6b).

$$\kappa_D^* = \frac{E_D^*}{3(1-2\nu_D^*)} = 37500 \text{ MPa} \quad (6a)$$

$$\mu_D^* = \frac{E_D^*}{2(1+\nu_D^*)} = 28125 \text{ MPa} \quad (6b)$$

Debido a que los valores de κ^* y μ^* son del mismo orden los valores de ω_κ y ω_μ son fijados a uno. Luego la función objetivo (1) queda como (7).

$$\Pi = \left| \frac{(\kappa^* - 37500 \text{ MPa})}{37500 \text{ MPa}} \right| + \left| \frac{(\mu^* - 28125 \text{ MPa})}{28125 \text{ MPa}} \right| \quad (7)$$

El módulo de Young E_p y en coeficiente de Poisson ν_p de las partículas y su fracción de volumen ϕ son seleccionados como variables de diseño. Las propiedades mecánicas de la matriz de aluminio ($E_m = 70$ Gpa y $\nu_m = 0,3503$) son prescritas y mantenidas constantes durante todo el proceso de optimización. Se permite variar la fracción de volumen ϕ dentro del rango $0,05 \leq \phi \leq 0,2$. Las condiciones de estabilidad de Drucker que garantizan que la matriz constitutiva del material de las partículas resulte positiva definida [6] se imponen por penalización. De esta forma, se le asigna a la función objetivo de los individuos cuyas variables de diseño no cumplen las condiciones de estabilidad un valor arbitrariamente alto. Basándose en los resultados de trabajos previos de los autores [7] y [8], el tamaño del EVR es fijado para contener 30 partículas. La aptitud del tamaño EVR seleccionado será verificada más tarde.

Los parámetros del algoritmo genético son resumidos en la tabla 1. El tamaño de la población es elegida de 30 individuos. El número de *hijos elite* es la cantidad de individuos de la población que por tener los mejores valores de función objetivo de la generación son automáticamente transferidos a la próxima generación sin ningún cambio. Este parámetro es seleccionado como 3 (10% de la población). El cruzamiento de individuos se realiza con la

estrategia de *punto simple*. En la operación de cruzamiento por punto simple se selecciona un número entero n de forma aleatoria entre 1 y el número de variables. El hijo es creado con los primeros n genes de un padre y los últimos (*número de variables - n*) genes del otro padre. Así si los padres son [a b c d e f g] y [1 2 3 4 5 6 7] y el punto aleatorio de cruzamiento n es 5, los hijos son [a b c d e 6 7] y [1 2 3 4 5 f g]. A partir de los resultados de Zohdi [5] se adoptó un algoritmo sin mutación. Como fue mencionado anteriormente, el modulo de Young E_p y el Coeficiente de Poisson ν_p de las partículas, y la fracción de volumen del compuesto ϕ son seleccionados como variables de diseño (3 variables).

Parámetro	Valor
Tamaño de la población	30
Criterio de parada	8 generaciones
Número de hijos elite	3
Número de hijos con mutación	Ningún individuo
Número de variables de diseño	3
Cruzamiento	Punto simple

Tabla 1. Parámetros de entrada para el AG.

La figura 4 muestra la convergencia del algoritmo genético. En la misma se indican el valor promedio y el mejor valor (el individuo mejor adaptado) de cada generación. Luego de 8 generaciones el algoritmo resulta en el vector solución (8), donde la primera componente corresponde al modulo de Young de las partículas E_p en MPa, la segunda al Coeficiente de Poisson de las partículas ν_p y la tercera a la fracción de volumen del compuesto ϕ .

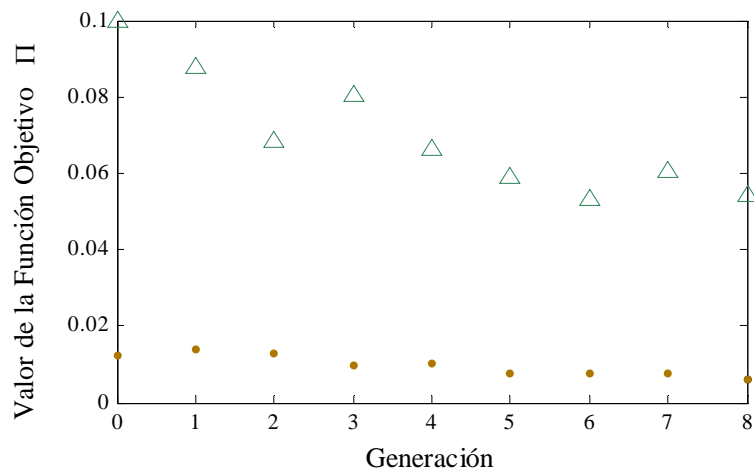


Figura 4. Convergencia del AG. Los triángulos corresponden a los valores promedio de la función objetivo y los círculos al mejor valor en cada generación.

$$\Lambda_{AG} = [151700 \ 0,3454 \ 0,0496] \quad (8)$$

El vector solución Λ_{AG} corresponde a los siguientes valores de función objetivo y propiedades mecánicas efectivas.

$$\Pi(\Lambda_{AG}) = 0,005861 \quad (9)$$

$$E^* = 67114 \text{ Mpa} \quad (10)$$

$$\nu^* = 0,2001 \quad (11)$$

El vector de variables de diseño inicial para el MBD Λ_{MBD}^i es el mismo vector resultante del AG, Λ_{AG} . La figura 5 muestra la convergencia del método de búsqueda directa. Luego de 14 iteraciones se obtiene por este método el vector resultante (12).

$$\Lambda_{MBD}^f = [151700 \ 0,34031 \ 0,059583] \quad (12)$$

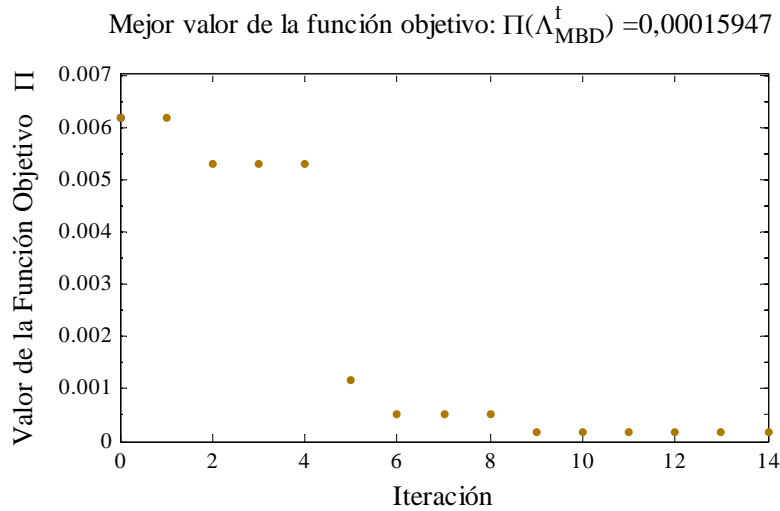


Figura 5. Convergencia del MBD.

El vector de variables de diseño solución Λ_{MBD}^f corresponde a los siguientes valores de función objetivo y propiedades mecánicas efectivas.

$$\Pi(\Lambda_{MBD}^f) = 0,00015947 \quad (13)$$

$$E^* = 67502,005 \text{ MPa} \quad (14)$$

$$\nu^* = 0,199975 \quad (15)$$

Las propiedades efectivas encontradas (14) y (15) representan un error relativo a las propiedades efectivas deseadas de 0,00297% para el modulo de Young y 0,0125% para el coeficiente de Poisson.

Verificación del resultado

Con la solución (12) y considerando valores de las variables del orden de los encontrados en materiales reales se toma como solución del problema (16), (17) y (18).

$$E_p = 151700 \text{ MPa} \quad (16)$$

$$\nu_p = 0,34 \quad (17)$$

$$\phi = 0,06 \quad (18)$$

Para estudiar la respuesta efectiva de la microestructura resultante se simulan 20 muestras diferentes, cada una con una distribución aleatoria diferente de las partículas. La figura 6 y 9 muestran los resultados obtenidos para el modulo de Young y el coeficiente de Poisson respectivamente, con muestras que contienen 32 partículas en todos los casos. Cada punto representa el resultado de una evaluación computacional de la microestructura. También se observan el valor máximo, mínimo, promedio y desviación estándar del grupo de muestras. La figura 7 y 10 muestran los correspondientes histogramas de estos resultados.

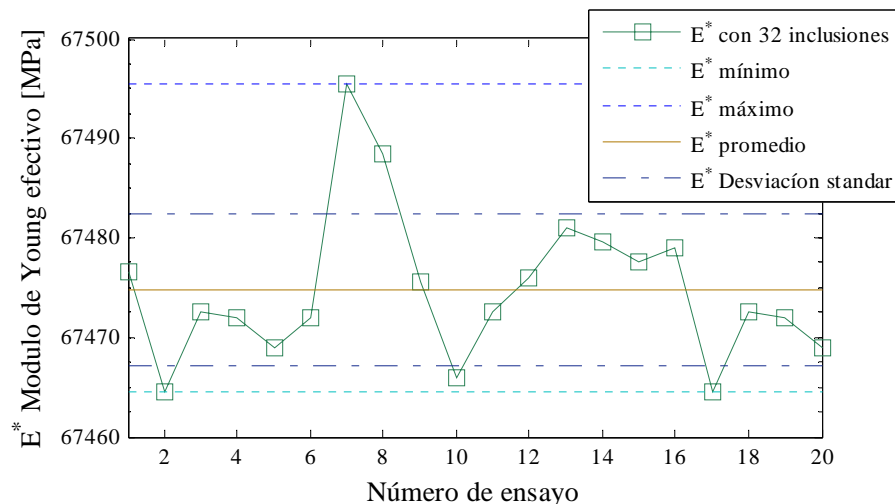


Figura 6. Módulo de Young efectivo del material resultante para 20 microestructuras con 32 inclusiones distribuidas en forma aleatoria en cada caso. Se indican los valores máximos, mínimos, promedio y desviación estándar.

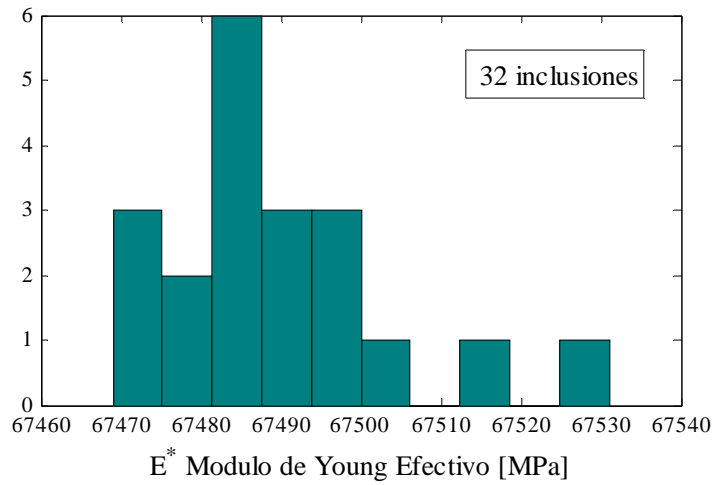


Figura 7. Histograma del Modulo de Young efectivo [MPa] para 20 microestructuras con 32 inclusiones distribuidas en forma aleatoria en cada caso.

De la misma forma, estas simulaciones son realizadas para microestructuras conteniendo 2, 12, 22, 32, 42, y 55 partículas para verificar el tamaño de EVR. En todos los casos son evaluadas 15 muestras a excepción del caso de 32 partículas que son realizadas 20 evaluaciones. Los resultados obtenidos se muestran en la figura 8 y en la tabla 2 para el modulo de Young y en la figura 11 y tabla 3 para el coeficiente de Poisson.

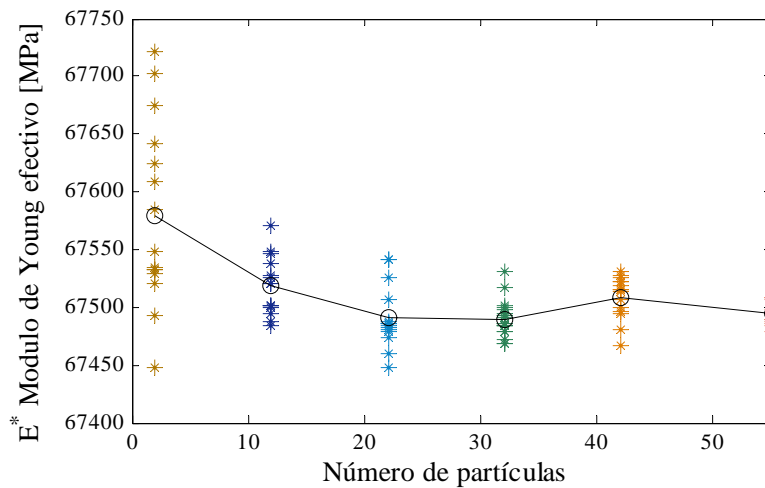


Figura 8. Curva de convergencia de EVR. Valores del modulo de Young efectivo para muestras con distintas distribuciones aleatorias de las partículas y conteniendo un número de inclusiones que va aumentando.

Número de inclusiones	Mod. Young promedio E_{prom}^* [MPa]	Diferencia $E_{máx}^* - E_{mín}^*$	Desviación estándar de E^*	Porcentaje $\frac{E_{máx}^* - E_{mín}^*}{E_{prom}^*} \times 100$	Porcentaje $\frac{\text{Desv. estándar}}{E_{prom}^*} \times 100$
2	67580	274	89,233	0,4%	0,13%
12	67518	87	25,154	0,12%	0,04%
22	67491	94	26,843	0,14%	0,04%
32	67491	62	15,237	0,09%	0,02%
42	67509	64	18,38	0,09%	0,03%
55	67494	30	10,289	0,04%	0,01%

Tabla 2. Resultados de la evaluación computacional de microestructuras con diferentes distribuciones aleatorias de partículas para el modulo de Young.

En la tabla 2 y 3 se muestra información estadística de las muestras como valores promedios del modulo de Young y coeficiente de Poisson, diferencia entre valores máximos y mínimos y desviación estándar de cada caso. También se muestran en porcentaje la porción que estas diferencias y desviación estándar representan sobre los valores promedios de cada caso. Los resultados permiten concluir que una muestra conteniendo 30 inclusiones resulta en un EVR apto para el análisis.

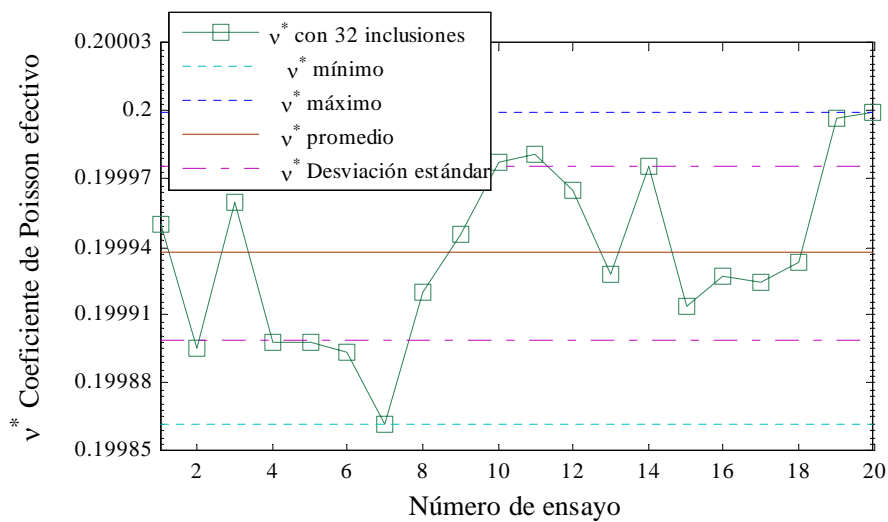


Figura 9. Coeficiente de Poisson efectivo del material resultante para 20 microestructuras con 32 inclusiones distribuidas en forma aleatoria en cada caso. Se indican los valores máximos, mínimos, promedio y desviación estándar.

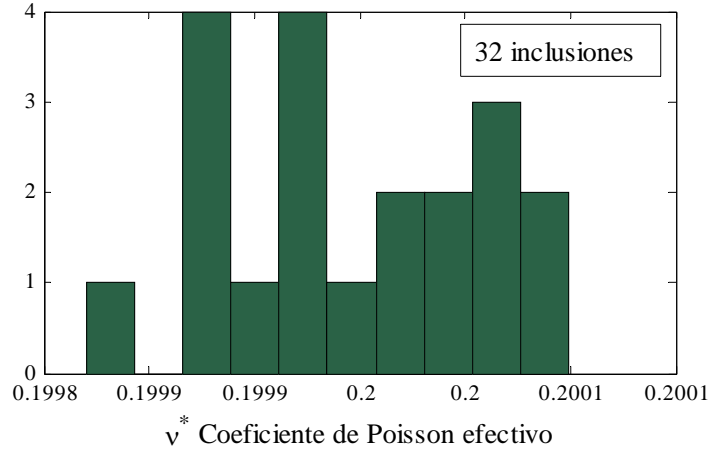


Figura 10. Histograma del coeficiente de Poisson para 20 microestructuras con 32 inclusiones distribuidas en forma aleatoria en cada caso.

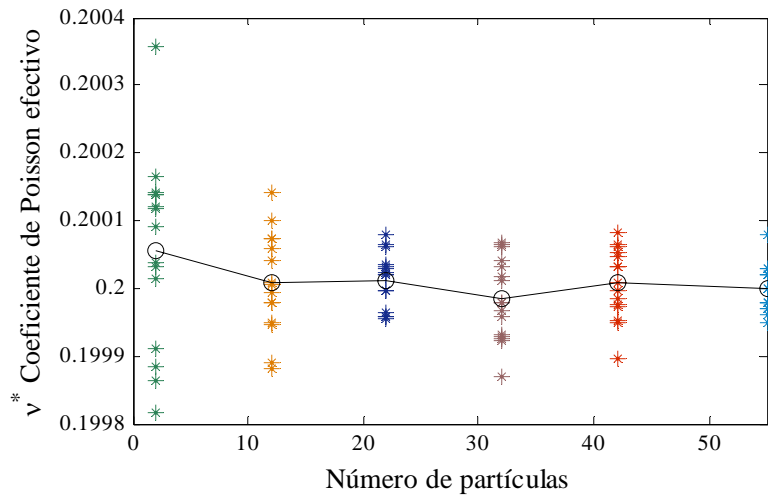


Figura 11. Curva de convergencia de EVR para valores del coeficiente de Poisson efectivo para muestras con distintas distribuciones aleatorias de las partículas y conteniendo un número de inclusiones que va aumentando.

Número de inclusiones	Coef. de Poisson promedio ν_{prom}^*	Diferencia $\nu_{máx}^* - \nu_{mín}^*$	Desviación estándar de ν^*	Porcentaje $\frac{\nu_{máx}^* - \nu_{mín}^*}{\nu_{prom}^*} \times 100$	Porcentaje $\frac{\text{Desv. estándar}}{\nu_{prom}^*} \times 100$
2	0,2000556	0,0005404	0,0000406	0,27%	0,02%
12	0,2000079	0,0002605	0,0000743	0,13%	0,04%
22	0,2000128	0,0001232	0,0000406	0,06%	0,02%
32	0,199995	0,0002292	0,0000635	0,11%	0,03%
42	0,200007	0,0001852	0,0000519	0,09%	0,025%
55	0,1999993	0,00013	0,0000343	0,06%	0,017%

Tabla 3. Resultados de la evaluación computacional de microestructuras con diferentes distribuciones aleatorias de partículas para el coeficiente de Poisson.

CONCLUSIONES

Se presentó en este trabajo un procedimiento para el diseño computacional de materiales compuestos microheterogéneo con propiedades elásticas “a medida” según los requerimientos del usuario. El procedimiento combina algoritmos de optimización genéticos y de búsqueda directa con modelos de elementos finitos.

La implementación presentada en este trabajo se limita al análisis de materiales con comportamiento elástico lineal. La efectividad de la herramienta se ilustra mediante la solución de un ejemplo de aplicación.

La metodología propuesta resulta flexible y se puede ser fácilmente extendida a problemas en tres dimensiones, topologías complejas de las partículas y leyes de comportamiento no lineal. Al mismo tiempo pueden considerarse restricciones de diseño en el nivel de la microescala tal como límites en la intensidad de los campos de tensiones.

AGRADECIMIENTOS

El primer autor quiere expresar su agradecimiento al Gobierno de Brasil por el apoyo financiero a través del Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico CNPq. Este trabajo fue parcialmente financiado por el subsidio PICT 12-12528 de la ANPYCT de la República Argentina.

REFERENCIAS

- [1] D. E. Goldberg, *Genetic algorithms in search optimization & machine learning*. Addison Wesley Longman. 1999
- [2] E. Sánchez-Palencia, *Non-homogeneous media and vibration theory*. Springer-Verlag. New York. 1980
- [3] S. Nemat-Nasser & M. Hori, *Micromechanics: overall properties of heterogeneous solids*. 2nd Edición, Elsevier. 1999

- [4] T. Mura, *Micromechanics of defects in solids*. 2nd Edición. Kluwer Academic Publishers. 1993
- [5] T. I. Zohdi, *Computational modeling and design of new random microheterogeneous materials*. CISM Course notes. 2002
- [6] L. Malvern, *Introduction to the mechanics of a continuous medium*. Prentice Hall. 1968
- [7] F. C. Buroni, *Projeto de materiais compostos micro-heterogêneos*. Trabajo final de la disciplina Otimização de Processos. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. PROMEC-UFRGS. 2004
- [8] R. G. Batista, A. P. Cisilino & I. Iturrioz, *Aplicación del método de los elementos discretos a la homogenización de las propiedades mecánicas de materiales microporosos*. Mecánica Computacional XXII. ENIEF 2003. Bahia Blanca. Argentina. 2003