

DETERMINACIÓN DE LOS PARÁMETROS CONSTITUTIVOS DEL POLIMETILMETACRILATO (PMMA) MEDIANTE ANÁLISIS INVERSO Y SIMULACIÓN POR ELEMENTOS FINITOS

Juan Pablo Torres^a, Lucas Sanchez Fellay^a, Enrique Pardo^a and Patricia M. Frontini^a

^a*INTEMA, Universidad Nacional de Mar del Plata, Juan B. Justo 4302, B7608FDQ Mar del Plata, Argentina, pmfronti@fi.mdp.edu.ar, <http://www3.fi.mdp.edu.ar/ingpolimeros>*

Palabras Clave: PMMA, Modelos Constitutivos, Elementos Finitos, Método Inverso.

Resumen. Se llevaron a cabo experimentos computacionales de la indentación del PMMA en el código de elementos finitos ABAQUS 6.9. Para la descripción de la respuesta tensión-deformación del PMMA se implementó el modelo constitutivo elasto-viscoplástico de Arruda-Boyce (AB). Se utilizaron los coeficientes del modelo existentes en la literatura y a partir de estos, se generaron curvas de carga de indentación vs profundidad de penetración. Estas curvas sirvieron como datos de entrada para el esquema de optimización con el fin de evaluar la conveniencia de la aplicación del método inverso para la obtención de parámetros constitutivos.

1 INTRODUCCIÓN

El comportamiento mecánico de los polímeros amorfos es no lineal, caracterizado por una respuesta elasto-viscoplástica dependiente de la temperatura y la velocidad de deformación (Boyce et al, 1988). En servicio, estos materiales están comúnmente sujetos a modos de carga complejos bajo un amplio espectro de deformaciones. El ensayo de estos materiales y la determinación de sus parámetros constitutivos son fundamentales para poder predecir el comportamiento en servicio de piezas estructurales para asistir en el diseño de materiales, y desarrollo de nuevos productos.

El enfoque tradicional para la obtención de parámetros normalmente involucra el uso de ensayos de compresión y tracción uniaxial, compresión plana y corte puro. Estos ensayos requieren de un número de muestras de geometría y tamaño estandarizado, bien definido y relativamente grande. Por otro lado, los ensayos de indentación constituyen un método de ensayo relativamente simple, que simula condiciones variables de presión y deformación, y que requieren de muy poco material. Los ensayos de indentación tradicionales solo proveían información sobre la dureza de una muestra y no podían ser directamente utilizados para modelar en detalle el comportamiento del material en servicio. Sin embargo, el desarrollo reciente de los métodos de indentación instrumentada ha mejorado en gran medida la información que es posible determinar a partir de un ensayo (Giannakopoulos, 2006; Vandamme y Ulm, 2006). Recientemente, esta técnica ha sido empleada para capturar las propiedades plásticas de metales y las propiedades elásticas de biomateriales como la piel humana (Delalleau et al, 2006; Erdemir et al, 2006). Ciertamente, este enfoque presenta un gran potencial para la extracción de parámetros elasto-viscoplásticos de materiales poliméricos.

En este trabajo, el uso de la indentación instrumentada, en conjunto con el método de modelado inverso asistido por análisis por elementos finitos, para la determinación de parámetros constitutivos es investigado. Este método ofrece potencialmente un enfoque experimental mucho más simple que el tradicional, con la posibilidad de proveer además, la capacidad de ensayo de materiales en situaciones (e.g. ensayo in-situ) donde los ensayos tradicionales no son realizables.

En la realización de este trabajo, en base a su amplia aceptación, se eligió el modelo constitutivo AB (Boyce et al, 1988; Arruda y Boyce, 1993) para la descripción de la respuesta tensión-deformación de un polímero amorfo. Se utilizaron, a modo de datos experimentales, los resultados de un ensayo computacional de un material de parámetros conocidos y partir de estos datos, se estudio la determinación de los parámetros constitutivos por medio del análisis inverso.

2 MODELO CONSTITUTIVO

El modelo constitutivo tridimensional AB fue desarrollado para la predicción de la respuesta, dependiente de la temperatura y la velocidad de deformación, de polímeros amorfos a grandes deformaciones. El comportamiento de este tipo de materiales, cuando se hallan sujetos a cargas gradualmente crecientes, está caracterizado por una respuesta inicial lineal elástica, seguida de fluencia y luego, a grandes deformaciones, endurecimiento por deformación. La evolución de la respuesta del material con la carga aplicada esta directamente incorporada en el modelo AB.

En la formulación del modelo AB, se descompone al gradiente de deformaciones F en componentes plástica y elástica $F = F^e F^p$ (Fig.1). Esta descomposición puede interpretarse como dos redes trabajando en serie: una red elástica (e) y una red plástica (p).

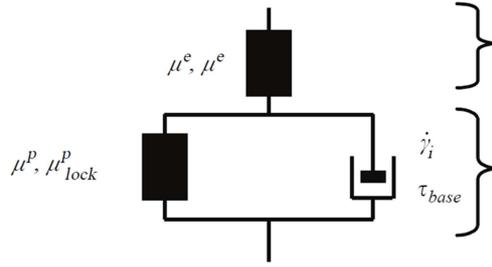


Figura 1: Representación reológica unidimensional del modelo de Arruda-Boyce.

Al usar esta descomposición del gradiente de deformaciones, el tensor de tensiones de Cauchy puede ser calculado a partir de la relación lineal elástica:

$$\mathbf{T} = \frac{1}{J^e} (2\mu^e \mathbf{E}^e + \lambda^e \text{tr}[\mathbf{E}^e] \mathbf{1}) \quad (1)$$

Donde $\mathbf{E}^e = \ln[\mathbf{V}^e]$ es la deformación verdadera (deformación de Hencky), \mathbf{V}^e es el tensor “izquierdo” de deformaciones elásticas, $J^e = \det[\mathbf{F}^e]$, y μ^e, λ^e son las constantes de Lamé, que pueden ser obtenidas a partir del modulo de Young E y el modulo de Poisson ν según $\mu^e = \frac{E}{2(1+\nu)}$ y $\lambda^e = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$. La tensión impulsora del flujo plástico viene dada por la diferencia tensorial entre la tensión total y el tensor de *backstress* referido a la configuración espacial:

$$\mathbf{T}^* = \mathbf{T} - \frac{1}{J^e} \mathbf{F}^e \mathbf{T}^p \mathbf{F}^{eT} \quad (2)$$

Donde el tensor desviador de *backstress* esta dado por la versión incompresible del modelo *eight-chain*, que puede ser expresado como (Bergström y Boyce, 2000):

$$\mathbf{T}^p = \frac{\mu^p \mathcal{L}^{-1}(\bar{\lambda}^p / \lambda_{lock}^p)}{\bar{\lambda}^p \mathcal{L}^{-1}(1 / \lambda_{lock}^p)} \text{dev}[\mathbf{B}^p] \quad (3)$$

Aquí μ^p y λ_{lock}^p son constantes del material (inspiradas en consideraciones de termodinámica estadística); $\mathbf{B}^p = \mathbf{F}^p \mathbf{F}^{pT}$; $\bar{\lambda}^p = \sqrt{\text{tr}(\mathbf{B}^p) / 3}$ es la deformación plástica efectiva y $\mathcal{L}(x) = \coth(x) - 1/x$ es la función de Langevin.

La velocidad de flujo plástico viene dada por:

$$\dot{\gamma}^p = \dot{\gamma}_0 \exp \left[\frac{-As}{k_B \theta} \left(1 - \left(\frac{\tau}{s} \right)^{5/6} \right) \right] \quad (4)$$

Donde $\dot{\gamma}_0, A, s$ son constantes del material, k_B es la constante de Boltzmann, θ es la temperatura absoluta y $\tau = \|\text{dev}[\mathbf{T}^*]\|_F$, con $\|A\|_F = (A_{ij}A_{ij})^{1/2}$. La constante s es denominada tensión de fluencia intrínseca ya que da una medida de la tensión a partir de la cual el flujo plástico es predominante (recordemos que de acuerdo con la descomposición $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p$ ambos mecanismos ocurren simultáneamente en todo el rango de deformaciones. Luego la velocidad de deformación plástica está dada por:

$$\mathbf{D}^p = \frac{\dot{\gamma}^p}{\tau} \text{dev}[\mathbf{T}^*] \quad (5)$$

Y el tensor de spin plástico se toma igual a cero, es decir $\mathbf{W}^p = 0$. Por último, el modelo original de Boyce permitía capturar el fenómeno de *strain-softening* mediante una ecuación que describía la evolución del parámetro s con la deformación. Sin embargo, para la realización de este trabajo se considero un material sin *strain-softening*.

3 ANÁLISIS INVERSO

La calibración directa de un modelo que ajuste los resultados de un ensayo que comprenda un estado de deformación inhomogéneo es difícil ya que, por lo general, no se dispone de la representación analítica del problema (Frontini y Pettarin, 2003). En consecuencia, se emplearon técnicas de optimización en un algoritmo que se puede describir, en líneas generales, en tres partes (Fig.2): *i*) los parámetros de salida de los ensayos son usados como datos de entrada para los procedimientos de optimización; *ii*) se resuelve el problema directo, basándose en el modelo por elementos finitos utilizado para la simulación del ensayo elegido; *iii*) se ejecuta el algoritmo de optimización para la identificación de los coeficientes en los modelos.

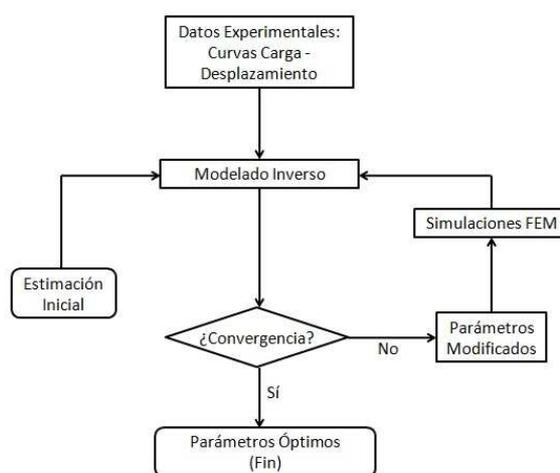


Figura 2: Diagrama de flujo para la determinación de parámetros por el método inverso

El algoritmo de optimización empleado está basado en el método de la región de confianza (*trust region*). El principio general de este método es la minimización, respecto de la variación de los coeficientes desconocidos, de una función objetivo w , que proporciona una medida de la diferencia entre los valores experimentales y los de la simulación FEM.

$$w = \sum_{i=1}^n (F_i^{exp} - F_i^{FEM})^2 \quad (6)$$

Donde F_i^{FEM} y F_i^{exp} son los datos generados y experimentales respectivamente.

4 IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO CONSTITUTIVO

El modelo constitutivo AB fue implementado en una subrutina de usuario (UMAT) para ABAQUS Standard 6.9. La estructura de ecuaciones constitutivas para el modelo AB constituye un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas. La resolución de este sistema en un entorno de elementos finitos requiere de una cuidadosa selección del esquema de integración. En este trabajo, para lograr una óptima precisión y eficiencia numérica (Bergström et al, 2006), se utilizó un esquema de integración implícito con un método predictor-corrector de Adams de orden variable y tamaño de paso variable para resolver las ecuaciones diferenciales.

La implementación se validó mediante la comparación de resultados experimentales y resultados de simulación en ABAQUS de los ensayos de compresión uniaxial y deformación

plana. Estos ensayos fueron simulados utilizando valores de los coeficientes constitutivos y las curvas experimentales disponibles en la literatura (Mulliken, 2006). Para ambos ensayos, los resultados de la simulación reprodujeron los resultados experimentales.

5 EXPERIMENTOS COMPUTACIONALES

5.1 Experimentos Preliminares

Para la simulación del ensayo de indentación, se consideró al indentador como una esfera rígida de 1 mm de radio y la probeta como un cilindro de 10 mm de radio y 10 mm de altura. El problema se modeló utilizando simetría axial y se impusieron condiciones de contorno de desplazamiento nulo (en la dirección de indentación) sobre la base de la muestra. Se eligió una malla con densidad variable, siendo más fina en la cercanía del eje de simetría y de la superficie de indentación (Fig.3), donde se espera que las deformaciones sean mayores.

En una etapa previa, se llevó a cabo el análisis de optimización de malla por medio de la evaluación de la curva carga-desplazamiento obtenida para distintos tamaños de malla y tipos de elemento. Se encontró que la configuración más eficiente es una malla compuesta de elementos axisimétricos triangulares cuadráticos del tipo CAX6R (interpolación cuadrática del campo de desplazamientos) y con integración reducida. La interfaz entre el indentador rígido y la superficie de la muestra fue modelada imponiendo interacción tangencial sin fricción e interacción normal con un *constraint enforcement* del tipo lineal y una rigidez igual a 104.

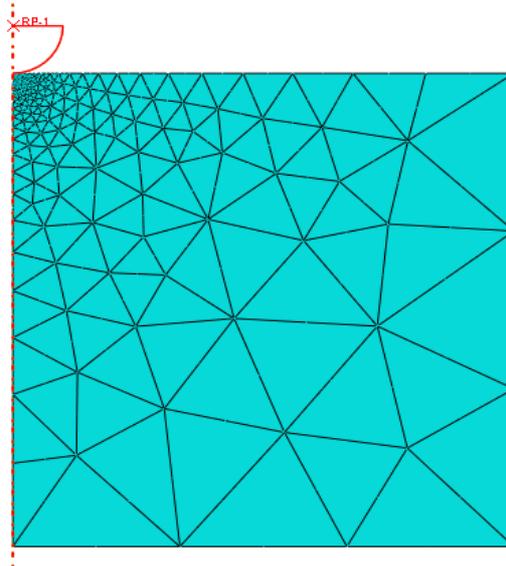


Figura 3: Geometría de la indentación y malla de elementos generada.

Con el fin de determinar la sensibilidad paramétrica del modelo AB con respecto al ensayo de indentación, se llevaron a cabo experimentos computacionales en los cuales se evaluó el cambio en la curva carga-desplazamiento respecto a la variación de cada parámetro (en un rango de valores consistentes con los reportados en la literatura), manteniendo el resto de los parámetros constantes. Los resultados obtenidos se presentan en las Figs.5-9. Se observa que el módulo elástico E afecta la respuesta total del ensayo: influye en la respuesta inicial, la carga máxima y la pendiente de descarga. El módulo de Poisson parece tener una pequeña influencia solo en el valor de carga máxima. La tensión de fluencia intrínseca s afecta la curva a partir de un desplazamiento aproximadamente igual a 0.1 mm, altera la carga máxima y

principalmente se ve manifestada en la energía total de deformación durante un ciclo de carga-descarga i.e., el área encerrada por la curva de carga-desplazamiento. Este último resultado es esperable ya que s controla, en cierta forma, las cantidades relativas de deformación elástica y plástica que se tendrán lugar durante la indentación. Las constantes viscoplásticas $\dot{\gamma}_0$ y A comienzan a afectar la respuesta del material a partir del punto de fluencia (0.06 mm) y principalmente alteran el valor de la pendiente de carga. El coeficiente del tensor de *backstress* μ^p comienzan a influir significativamente a partir de un desplazamiento de 0.12 mm. Este tensor de endurecimiento por deformación solo afecta la pendiente de carga y el valor de carga máxima. Sin embargo, en el rango de deformaciones estudiado, tiene menor influencia en la respuesta final que el elemento de flujo viscoplástico. El parámetro λ_{lock}^p solo pareció afectar la respuesta para valores mucho mayores que los que usualmente corresponden a los polímeros amorfos ($\lambda_{lock}^p > 300$). Es importante remarcar que los parámetros de flujo viscoplástico y del tensor de *backstress* no tienen influencia en la pendiente de descarga.

5.2 Aplicación del Método Inverso

Se realizaron simulaciones del ensayo de indentación utilizando la geometría y condiciones de contorno detalladas en la sección 5.1 y se aplicó el método inverso para la obtención de los parámetros constitutivos. La curva de datos experimentales se generó mediante una simulación inicial utilizando los coeficientes constitutivos correspondientes al PMMA (Boyce et al, 1988). Se encontró que el método hallaba, para la función de optimización, mínimos relativos que no llevaban a la solución verdadera. En consecuencia, se adoptó como estrategia, la calibración simultánea de ensayos de indentación para dos geometrías de indentación (punta esférica y punta Berkovich-Fig.4) y para dos velocidades de indentación (0.2 mm/s y 2 mm/s). De esta manera, se espera acotar el conjunto de soluciones posibles a las que el método pueda converger. Por otra parte, se utilizaron los resultados de la sección anterior para aplicar una estrategia de obtención de parámetros por regiones, esto es: i) el módulo elástico E fue obtenido en la región inicial ($d < 0.06$ mm) y de la pendiente de descarga; ii) $\dot{\gamma}_0$, A , s fueron buscados en la región intermedia (0.06 mm $< d < 0.14$ mm); iii) μ^p y el coeficiente de Poisson ν , fueron obtenidos de la región final de carga ($d > 0.14$ mm).

Para las corridas de optimización, el método logró recuperar los parámetros elásticos E , ν y el coeficiente del tensor de *backstress* μ^p . Con respecto al coeficiente λ_{lock}^p , tal como se señaló en la sección 5.1, parece no afectar la curva de indentación en el rango de deformaciones estudiado y por lo tanto no fue posible obtenerlo de forma unívoca. Los coeficientes de flujo viscoplástico $\dot{\gamma}_0$, A , s eran hallados solamente si se podía conocer a priori el valor de $\dot{\gamma}_0$ o A . De lo contrario, el método alcanzaba mínimos que dependían del valor semilla y que conducían a una solución incorrecta. Es muy posible que debido a la influencia de $\dot{\gamma}_0$ y A en la velocidad de deformación, sea necesario incorporar mayor información (en el proceso de optimización) sobre la variación de la respuesta del material a diferentes velocidades de indentación.

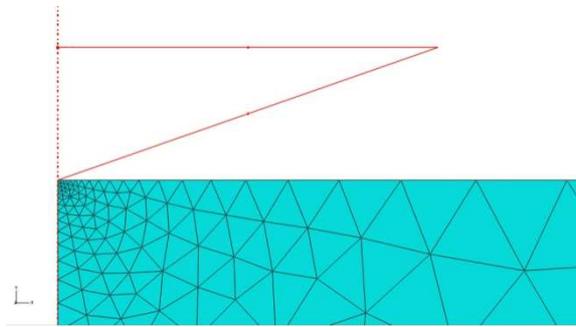


Figura 4: Geometría del indentador tipo Berkovich (el ángulo formado por el cono y el eje de simetría es de 70,5 grados)

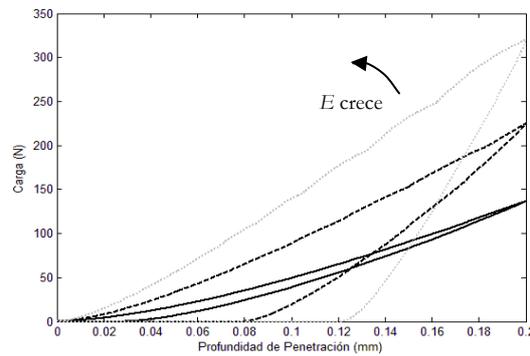


Figura 5: Sensibilidad de respuesta con la variación del parámetro E, en el rango 1500 – 4000 MPa.

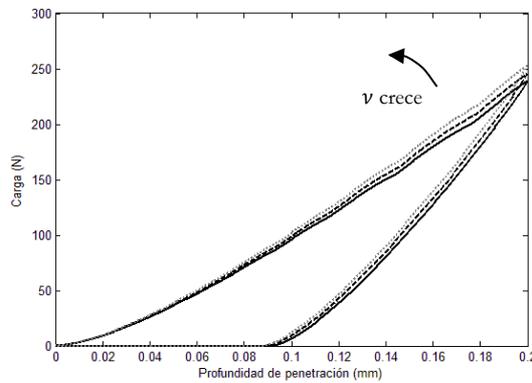


Figura 6: Sensibilidad de respuesta con la variación del parámetro ν , en el rango 0.2 – 0.45.

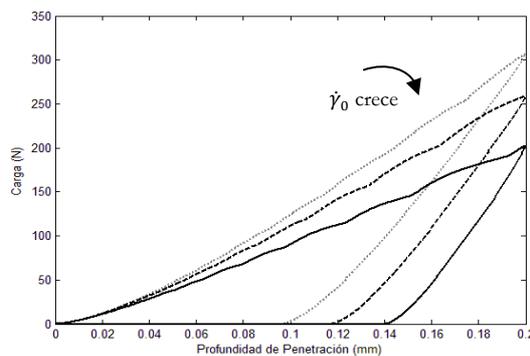


Figura 7: Sensibilidad de respuesta con la variación del parámetro $\dot{\gamma}_0$, en el rango 106 - 1011 s-1.

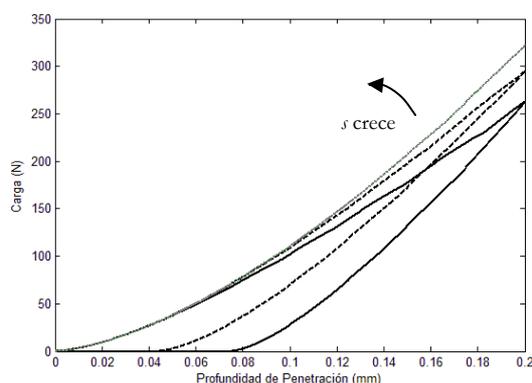


Figura 8: Sensibilidad de respuesta con la variación del parámetro s , en el rango 80 – 300 MPa.

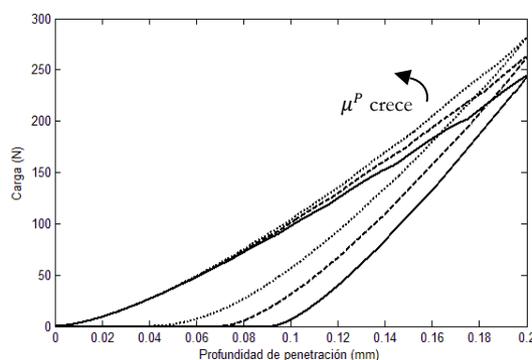


Figura 9: Sensibilidad de respuesta con la variación del parámetro μ^P , en el rango 5 – 150 MPa.

6 CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

Se evaluó la conveniencia de la aplicación del método inverso para la obtención de los parámetros constitutivos del modelo AB, a partir de los resultados del ensayo de indentación.

Se logró recuperar los coeficientes elásticos y el coeficiente μ^P . Por otro lado, los coeficientes de flujo viscoplástico no pudieron ser recuperados unívocamente. Por lo tanto, se propone como trabajo futuro: *i*) Realizar corridas de optimización incorporando un número mayor de curvas experimentales a diferentes velocidades de indentación; *ii*) Evaluar la posibilidad de extraer el parámetro de fluencia s a partir de la optimización (en simultáneo) del área bajo la curva carga-desplazamiento. *iii*) Incorporar geometrías o condiciones de indentación que induzcan estados de deformación más críticos, en donde se manifieste, en mayor medida, la influencia del coeficiente λ_{lock}^P .

REFERENCIAS

- Giannakopoulos AE, “Elastic and viscoelastic indentation of flat surfaces by pyramid indentors”, *J Mech Phys Solids*, 54:1305–32, 2006.
- Arruda EM, Boyce MC., “Evolution of plastic anisotropy in amorphous polymers during finite straining”. *Int J Plast*, 9:697–720, 1993.
- Bergström JS, Boyce MC., “Large strain time-dependent behavior of filled elastomers”, *Mech Mater*; 32:627–44, 2000.
- Bergström J.S., Bowden A.E., Rimnac C.M., Kurtz S.M., Development and Implementation of an Advanced User Material Model for UHMWPE, *9th International LS-DYNA Users Conference*.

- Boyce MC, Parks DM, Argon AS. "Large inelastic deformation of glassy polymers, Part I: Rate-dependent constitutive model". *Mech Mater*; 7:15–33, 1988.
- Delalleau A, Josse G, Lagarde JM, Zahouani H, Bergheau JM, "Characterization of the mechanical properties of skin by inverse analysis combined with the indentation test", *J Biomech*, 39(9):1603–10, 2006.
- Erdemir A, Viveiros ML, Ulbrecht JS, Cavanagh PR, "An inverse finite-element model of heel-pad indentation", *J Biomech*, 39(7):1279–86, 2006.
- Frontini P.M., Pettarin V., "Inverse method for the analysis of instrumented impact tests of polymers, in fracture of polymers, composites and adhesives", London, England : Elsevier Sci. Ltd, 2003. 0080437109.
- Mulliken A., "PhD Thesis", Massachusetts Institute of Technology, 2006.
- Vandamme M, Ulm FJ, "Viscoelastic solutions for conical indentation", *Int J Solids Struct*, 43:3142–65, 2006.