

APLICACIÓN DEL MÉTODO DE LOS ELEMENTOS DISCRETOS AL ESTUDIO DEL MECANISMO DE FRACTURA POR CRECIMIENTO Y COALESCENCIA DE VACÍOS

Ruben G. Batista^a, I. Iturrioz^a A. Cisilino^b,

^a*Programa de Pos-graduação em Engenharia Mecânica –PROMEC, Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS, Sarmiento Leite, 425 CEP 90050-170, Porto Alegre, RS, Brasil.*

^b*Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales INTEMA, Universidad Nacional de Mar del Plata, Av. Juan B. Justo 4302 (7600), Mar del Plata, Argentina*

Palabras clave: coalescencia de vacíos, método de los elementos discretos, fractura.

Resumen. En este trabajo es aplicado el método de los elementos discretos (MED) al estudio computacional del micromecanismo de fractura de materiales microporosos de matriz metálica. Para esto son utilizados modelos en MED que representan elementos de volumen representativos (EVR) de una pseudo-micro-estructura de hierro fundido nodular ferrítico. La variable de daño considerada es la fracción de volumen de vacíos. Para determinar y monitorear la evolución de esta variable de daño fue implementada una metodología dentro de la formulación en MED. Se utiliza como criterio de coalescencia, la unión física de dos o mas vacíos próximos, y es verificada la misma en 40 EVRs de la pseudo-micro-estructura de hierro fundido nodular ferrítico, comparándola con los resultados obtenidos en la bibliografía. Se observó excelente coherencia entre los resultados obtenidos para la fracción de volumen de vacíos de coalescencia f_c reportados en la literatura y los encontrados en este trabajo, demostrando la validez de aplicar el método de los Elementos Discretos al estudio del micromecanismo de fractura por crecimiento y coalescencia de vacíos.

1 INTRODUCCIÓN

La observación de superficies de fractura de materiales metálicos que rompieron por el mecanismo de fractura dúctil indican que la misma se caracteriza por la interacción entre vacíos que se forman a partir de inclusiones y partículas de segunda fase propias de la microestructura de estos materiales (Puttick, 1959; Garrison, 1987).

Esta interacción entre los vacíos que caracteriza la fractura dúctil, se ha dividido para su estudio en tres etapas fundamentales, las cuales son: nucleación de los vacíos, crecimiento y por último, coalescencia de los mismos. Debido a la escala en que se desarrollan, la observación directa de la evolución de estas etapas, resulta extremadamente cara o entonces imposible. Algunos estudios reportan la observación in situ de esta evolución, en la superficie de cuerpos de prueba, durante un ensayo de tracción, utilizando las técnicas de microscopía electrónica (Berdin, 2001), por otro lado existen reportes en relación a que la evolución de los vacíos localizados en la superficie de un cuerpo prueba, es diferente de la de los vacíos localizados en su interior (Puttick, 1959), debido principalmente al estado de tensiones característico de estas regiones.

Como alternativa auxiliar a la experimentación física, relacionada a la interacción entre los vacíos, la mecánica computacional se ha mostrado una herramienta eficaz para un mejor entendimiento de estos fenómenos, una vez que permite tanto la posibilidad de monitorear la evolución de los vacíos como la influencia de los mismos en la respuesta mecánica macroscópica del material. Dentro de este ámbito, se han desarrollado trabajos que van desde la propuesta de modelos constitutivos que consideran la fracción de volumen de vacíos f , existente en el material (Tvergaard e Needleman, 1982) hasta verificar la influencia de variables mecánico-metalúrgicas, tales como, fracción de volumen de vacíos inicial f_0 , forma y tamaño de los mismos, triaxialidad en las tensiones, etc, en la evolución de la interacción entre los vacíos, (Kim et al, 2004; Zhang et al, 1999).

La etapa de coalescencia de vacíos determina la formación de un defecto en condiciones de propagar (Garrison, 1987; Anderson, 1991), por lo tanto, resulta importante conocer el inicio de la misma durante el proceso de fractura. La fracción de vacíos que corresponde al comienzo de esta etapa se le conoce como fracción de vacíos crítica (f_c) y para esta se han reportado valores que van desde $f_c = 0.10$ hasta $f_c = 0.20$ en función del criterio utilizado (Tvergaard and Needleman, 1984; Goods and Brown, 1979; Brown and Embury, 1973; Xia et al, 1995; Ruggieri, 1997; Kim et al, 2004). Muchas veces el valor del parámetro f_c está en función de un ajuste fenómeno lógico de la respuesta del modelo computacional con la respuesta del material real, o entonces está en función de restricciones del método numérico utilizado. El presente trabajo tiene por objetivo fundamental verificar la aplicabilidad del método de los elementos discretos (MED) al estudio del mecanismo de fractura por crecimiento y coalescencia de vacíos. Para esto son utilizados modelos en dos dimensiones que constituyen un elemento de volumen representativo (EVR) de una pseudo-micro estructura de hierro fundido nodular ferrítico en los cuales se verifica la evolución de su respuesta mecánica, relacionada a la evolución de la fracción de volumen de vacíos, estableciendo criterios dentro de la formulación en MED utilizada para determinar tanto la coalescencia como la fractura del material.

El trabajo está estructurado de la siguiente manera: A continuación de esta introducción se abordan los conceptos relacionados al método de los elementos discretos (MED), utilizado en este trabajo, luego en el capítulo 3 se presentan las consideraciones relacionadas a la representación computacional de la micro-estructura de hierro fundido nodular y los criterios relacionados a la obtención del elemento de volumen representativo utilizado para el estudio. A seguir, en el capítulo 4 se describe la metodología utilizada en monitorear la fracción de

volumen correspondiente a los vacíos y es descrito el criterio de coalescencia propuesto. En el capítulo 5 es verificado el criterio de coalescencia propuesto en la respuesta mecánica de 40 réplicas de un EVR de pseudo micro-estructura de hierro fundido nodular y son analizados los resultados y por último en el capítulo 6 son realizadas las conclusiones del estudio realizado.

2 EL MÉTODO DE LOS ELEMENTOS DISCRETOS

El método de los elementos discretos (MED) consiste en representar el continuo utilizando un arreglo de barras (Figura 1 (a) y (b)) de rigidez equivalente al continuo que se quiere representar. Cada nodo posee tres grados de libertad, (desplazamiento en tres direcciones), las masas están ligadas por elementos normales y diagonales de longitud L_c y $\sqrt{3}L_c/2$ respectivamente. Las expresiones, en función del módulo de elasticidad y el coeficiente de poisson, para determinar la rigidez de las barras normales y diagonales del arreglo espacial pueden ser encontradas en [Hayashi, \(1982\); Riera and Iturrioz, \(1995\)](#).

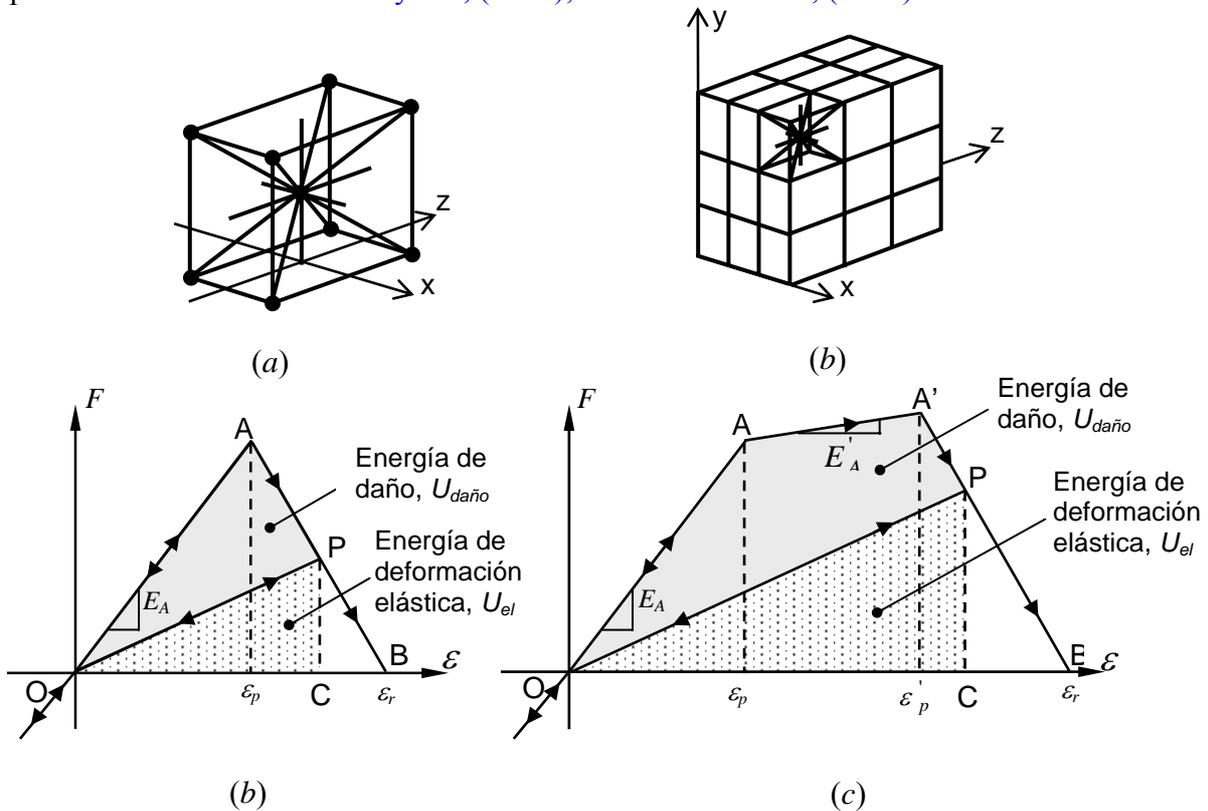


Figura 1. Ley constitutiva bilineal para cada barra del modelo: (a) parámetros de la ley constitutiva, (b) comportamiento de la barra en tracción y compresión, ([Rocha, 1989](#)).

Las ecuaciones de movimiento resultante de la discretización espacial son desacopladas (la matriz de masa es diagonal y la de amortiguamiento es proporcional a la matriz de masa), y son integradas en el tiempo utilizando el método de las diferencias finitas centrales. De esta forma en cada paso de integración una ecuación de equilibrio del tipo de la ecuación 1 es resuelta para cada nodo:

$$m \frac{d^2 u_i}{dt^2} + c \frac{du_i}{dt} = f \quad (1)$$

donde:

m : masa nodal;

- c : coeficiente de amortiguamiento proporcional a la masa;
- u_i : componentes de los vectores nodales respecto a los tres ejes de referencia (X_i);
- f : componentes de las fuerzas externas e internas aplicadas a través de las barras coincidentes en un nodo.

La esencia del método consiste en simular leyes de comportamiento complejas a través de una simple ley constitutiva uniaxial de cada elemento. Para la simulación de fractura, Rocha, (1989) propuso una ley constitutiva bilineal, como la que se ilustra en la Figura 1 (c). Para la obtención de respuestas macroscópicas mas complejas se propone la ley trilineal que se muestra en la Figura 1 (d)

$$\int_0^{\varepsilon_f} F(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{G_f A_f}{L_c} = \text{Área bajo la curva} \quad (2)$$

El área bajo la curva de las leyes constitutivas de la barra son proporcionales a la energía de fractura que caracteriza al material y esta representa por la ecuación 2. Puede verse entonces que la ley constitutiva de cada barra depende de los parámetros G_f , la energía específica de fractura del material, A_f , el área de influencia de la barra, y su longitud L_c . Este último parámetro permite capturar el efecto de escala del problema.

3 MODELO COMPUTACIONAL UTILIZADO.

En muchos de los estudios computacionales realizados, es considerada periodicidad de la micro-estructura del material, y el análisis es realizado sobre una única célula. En este trabajo será considerada distribución aleatoria de la fase dispersa lo que implica en la determinación de un elemento de volumen representativo de la micro-estructura considerada. A continuación son presentadas las consideraciones realizadas en relación al modelo computacional utilizado.

3.1 Consideraciones en relación a la representación computacional de la micro estructura de hierro fundido nodular.

El material tomado como referencia para la construcción de los modelos computacionales fue el hierro fundido nodular ferrítico y su selección estuvo influenciada, principalmente, por existir en la literatura suficiente información en relación a su comportamiento mecánico (Berdin, 2001, Dong, 1997) y porque las características de su micro-estructura (Figura 2) permiten, en alguna medida, la realización de simplificaciones en su representación computacional. De este modo, los modelos computacionales bidimensionales utilizados, son una pseudo-micro-estructura de hierro fundido nodular, en que se considera 100 % de nodularidad, con los nódulos de grafito todos de un mismo diámetro y modelados como vacíos distribuidos de forma aleatoria en una matriz metálica, considerada homogénea. Esta última consideración ha sido utilizada por diversos autores. (Kim, 2004, Brocks, 1995). El hecho de considerar los nódulos de grafito como poros, está justificado, primeramente por existir una diferencia considerable entre la resistencia de la matriz metálica y los nódulos de grafito, y en segundo lugar, observaciones experimentales reportadas en la literatura comprueban que en el caso de hierro nodular ferrítico, el despegue de la matriz y los nódulos de grafito ocurre para valores muy pequeños de deformación plástica (Berdin, 2001).

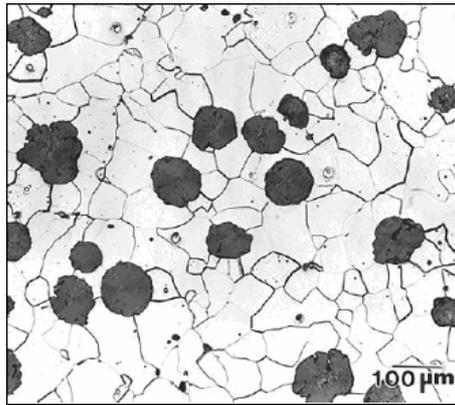


Figura 2: Micro-estructura característica de un hierro fundido nodular ferrítico (ASM Handbook, 1985)

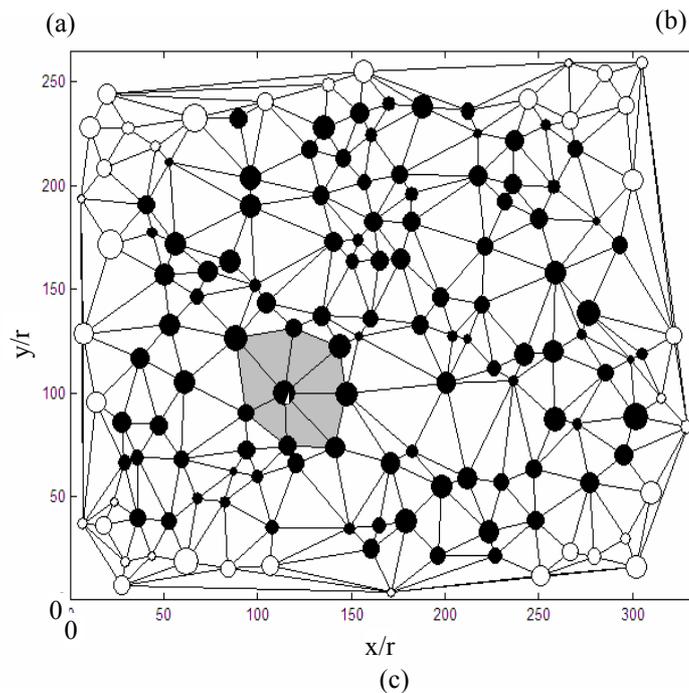
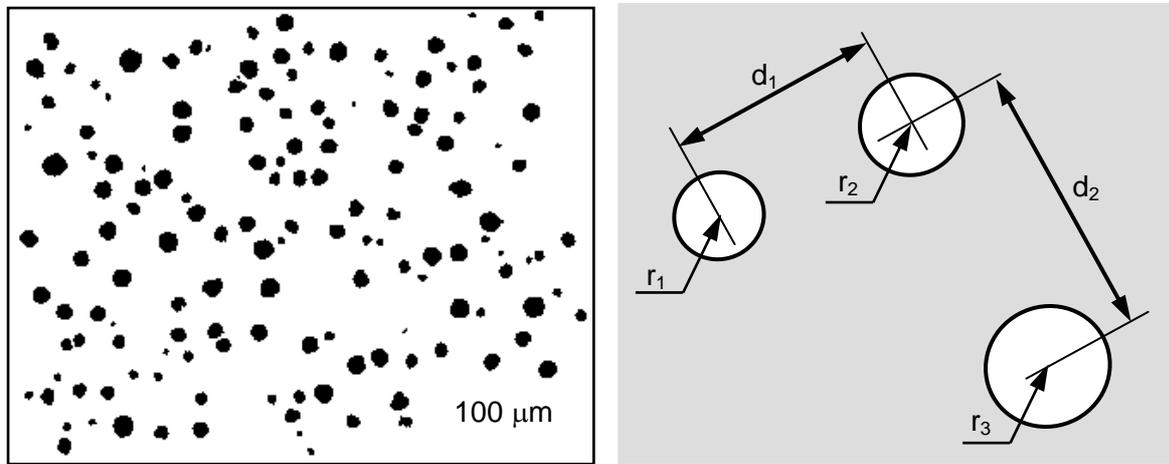


Figura 3: (a) micrografía característica de hierro fundido nodular, (b) parámetros verificados en las micrografías analizadas (c) figura esquemática de la determinación de los vecinos más cercanos de un nódulo de grafito

La distribución de los nódulos fue caracterizada a partir del análisis estadístico de mediciones realizadas en micrografías standard de hierro fundido nodular (Figura 3 (a)) utilizando un software de procesamiento de imágenes (image pro plus cibernetic). Todas las micrografías procesadas tenían 100 % de nodularidad y conteos nodulares desde 60 a 600 nódulos/mm².

Los parámetros considerados en el análisis estadístico de las micrográficas de hierro fundido procesadas fueron los siguientes:

- radio de los nódulos, r
- distancia de cada nódulo al nódulo más cercano, d (Figura 3 (b))
- número de primeros vecinos de cada nódulo
- distancia promedio de cada nódulo a sus primeros vecinos

Para la obtención de los primeros vecinos de cada uno de los nódulos se realizó una triangulación de Delaunay de las posiciones de sus centros, y luego se contó el número de triángulos a los que pertenece cada uno de los nódulos, este proceso es ilustrado en la Figura 3 (c) específicamente para la micrografía mostrada en la Figura 3 (a). Es importante notar que fueron excluidos del análisis los nodos ubicados en la periferia de la muestra, ya que el número de vecinos de estos, no es representativo por no encontrarse completamente rodeados por otros nódulos (círculos vacíos en la Figura 3 (c)). Con la información del número de primeros vecinos y las distancias entre ellos, se calculó para cada muestra el parámetro adimensional d/r . Los resultados obtenidos son mostrados en la Tabla 1.

Muestra		Nódulo más próximo		Primeros vecinos			
N_{area} [Nod/mm ²]	Nodularidad [%]	Promedio d/r		Número de vecinos		Promedio d/r	
		V. Medio	Desviación	V. Medio	Desviación	V. Medio	Desviación
60	100	3.78	1.33 (35%)	5.90	0.82 (14%)	5.61	2.05 (36%)
100	100	4.31	1.99 (46%)	5.85	1.05 (18%)	7.54	4.55 (60%)
150	100	4.01	1.52 (38%)	5.87	1.13 (19%)	6.72	3.39 (50%)
600	100	3.98	1.41 (35%)	5.92	1.16 (20%)	7.16	3.33 (47%)
Valores promedio		4.02	38.5%	5.89	17.8%	6.75	48.3%

Tabla 1. Resultados del estudio de distribución de los nódulos en micrografías de hierro fundido

De los resultados mostrados en la Tabla 1, se observa que para un rango amplio de conteos nodulares (de 60 a 600 nódulos/mm²) los parámetros d/r para el vecino más próximo y a los primeros vecinos presentan valores promedio de 4 y 6,75. El número de vecinos se mantiene casi constante e igual a 5,89. Estos resultados permiten concluir que la disposición geométrica de los nódulos es casi independiente del conteo nodular de la muestra. Sobre la base de esta información las distribuciones de nódulos para los modelos analizados fueron generadas en forma automática (Figura 4), y con el radio de los nódulos como parámetro característico de sus dimensiones.

3.2 Determinación del EVR

El elemento de volumen representativo (EVR) es el menor volumen de material que muestra respuesta macroscópica invariante. Claro está que para satisfacer esta condición, la

muestra de material debe ser grande lo suficiente, como para contener gran número de heterogeneidades (nódulos de grafito en nuestro caso) y que las fluctuaciones en el contorno sean pequeñas en relación a su tamaño (Huet, 1990; Terada and Kikuchi, 1995).

Para la obtención del EVR fueron realizados una serie de análisis en MED, en muestras de control de la pseudo-micro-estructura de hierro fundido nodular conteniendo un número creciente de nódulos. Los modelos fueron sometidos a un estado de tracción biaxial, satisfaciendo la condición de Hill (Hill, 1952; Nemat-Nasser and Hori, 1999) como muestra la Figura 4. El tamaño de elemento utilizado en los modelos en MED foi $L_c=0,33 \cdot r$ y Las cargas fueron aplicadas suficientemente lentas para garantizar la condición de aplicación casi estática de las mismas.

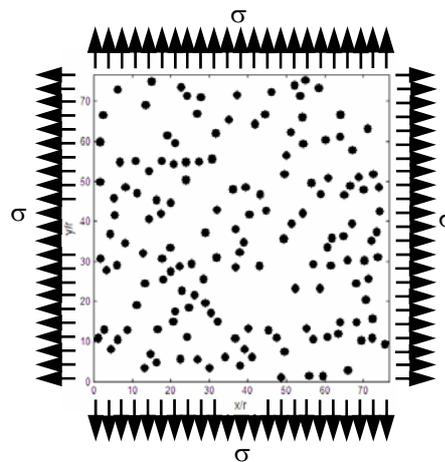


Figura 4: Muestra de material generada computacionalmente, con a representación de las cargas aplicadas

Las propiedades mecánicas atribuidas a la matriz de los modelos, tiene como referencia las propiedades mecánicas del hierro fundido nodular ferrítico reportado por Berdin et al, (2001), que son mostradas en la Tabla 2. Para este material la fracción de vacíos inicial es de $f_0=0,077$

E [GPa]	σ_y [MPa]	σ_{UTS} [MPa]	Elongación total [%]	Elongación uniforme [%]	H_{v200} [MPa]	K_{IC} [Ma \sqrt{m}]
187	260	390	19	23	187	77

Tabla2. Propiedades mecánicas del hierro fundido tomado como referencia (Berdin et al, 2001)

En las muestras analizadas para la determinación del EVR, se mantuvo la fracción de vacíos inicial constante y fue aumentándose el número de vacíos por muestra, siguiendo la secuencia de 2, 5, 10, 20, 40, 60, 70 hasta 80 vacíos. Considerando que el radio siempre es el mismo, los tamaños de los modelos en MED fueron aumentando desde 2 vacíos, constituido por 21,300 elementos, hasta 80 vacíos formado por 849,000 elementos. Todos los modelos fueron analizados utilizando la ley constitutiva trilineal, y los valores para los parámetros característicos de la misma fueron definidos buscando el mejor ajuste de la respuesta del modelo en MED, con la respuesta del material real tomada como referencia (Berdin et al, 2001). Como resultado se obtuvieron los siguientes parámetros para la relación constitutiva elemental de la barra: $\epsilon_p = 9.2 \times 10^{-4}$, $\epsilon'_p = 0.229$, $\epsilon_r = 5.894$, $E = 2.5 \times 10^{11}$ N/m², $G_f = 11 \times 10^3$ N/m y $L_c = 3.33 \times 10^{-6}$ m. La respuesta tensión deformación uniaxial del material de la matriz fue ajustado utilizando la ecuación de Ludwick (ASM Handbook, 1985) resultando en la siguiente respuesta macroscópica: Módulo de Young 233 GPa, Tensión de Fluencia 325 MPa y coeficiente de encruamiento de $n=0.26$. Las propiedades macroscópicas para un EVR

son 181 Gpa y tensión de fluencia de 242 Mpa, resultados estos, que muestran excelente coherencia con los reportados por Berdin et al, (2001) para este material (ver tabla 2).

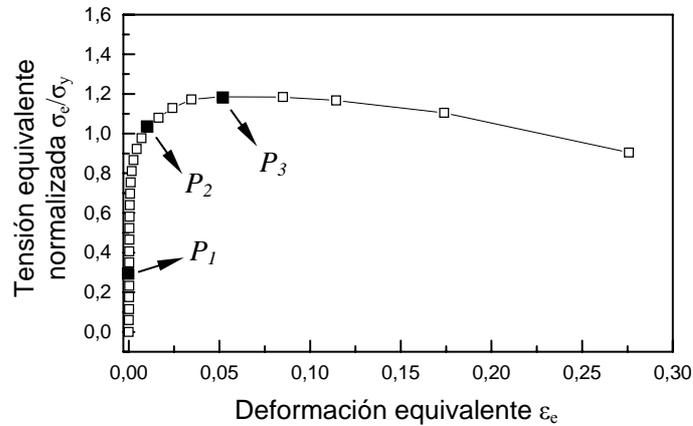


Figura 5: Curva tensión equivalente de Von Mises normalizada vs deformación equivalente, indicando los puntos de análisis, $\sigma_y = 260$ MPa.

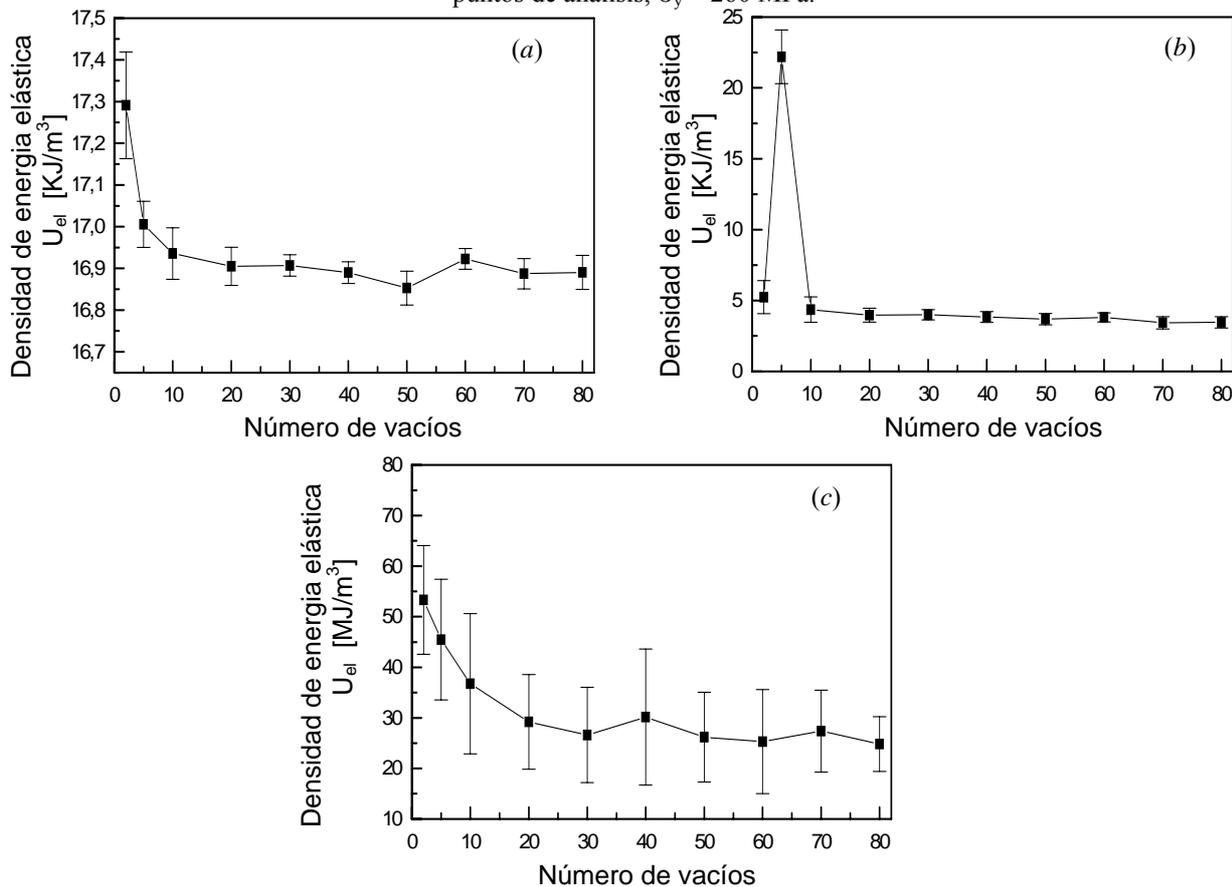


Figura 6: Resultados de densidad de energía elástica para muestras conteniendo número creciente de vacíos: (a) régimen lineal (P_1); (b) régimen no lineal (P_2); (c) Tensión máxima (P_3). Las barras de errores indican la dispersión en los resultados obtenidos

Las variables de campo verificadas durante los análisis realizados en la determinación del EVR fueron la densidad de energía de deformación elástica, U_{el}/V , la densidad de energía de daño, $U_{daño}/V$, y la fracción de volumen de vacíos f . Los resultados obtenidos son mostrados

en las figuras de la 6 a la 7 para los niveles de carga indicados en la Figura 5:

P1: régimen lineal elástico (nivel de carga $\sigma_{eq} / \sigma_y = 0,2$)

P2: régimen no lineal (nivel de carga $\sigma_{eq} / \sigma_y = 0,1$)

P3 : carga máxima

Para cada número de vacíos analizado fueron realizadas 10 réplicas con distribuciones de vacíos diferentes y promediados los resultados, las barras de error que se muestran en los gráficos de las Figuras 6 y 7 corresponden a la dispersión mostrada por las réplicas.

La energía de deformación elástica muestra un comportamiento suave en los regímenes lineal y no lineal. La dispersión en los resultados para 30 nódulos es menor que 0,5% en régimen lineal (Figura 6 (a)) y de aproximadamente 8% para no lineal (Figura 6 (b)). Sin embargo, es de aproximadamente 30% para el punto de tensión máxima (Figura 6 (c)). Los resultados para la energía de daño en régimen no lineal y para el punto de tensión máxima (Figuras 7 (a) y 7 (b)) muestran un comportamiento similar al presentado por la energía elástica. Los resultados correspondientes a la fracción de volumen de vacíos, son presentados en la Figura 8. Puede observarse que para comportamiento en régimen lineal y no lineal, a partir de la muestra de 20 huecos la respuesta obtenida se hace independiente del tamaño de la muestra analizada. La dispersión en los resultados para estos casos es menor que 0.2%. Una vez más, los resultados para el punto de tensión máxima presentan dispersión de aproximadamente 30%.

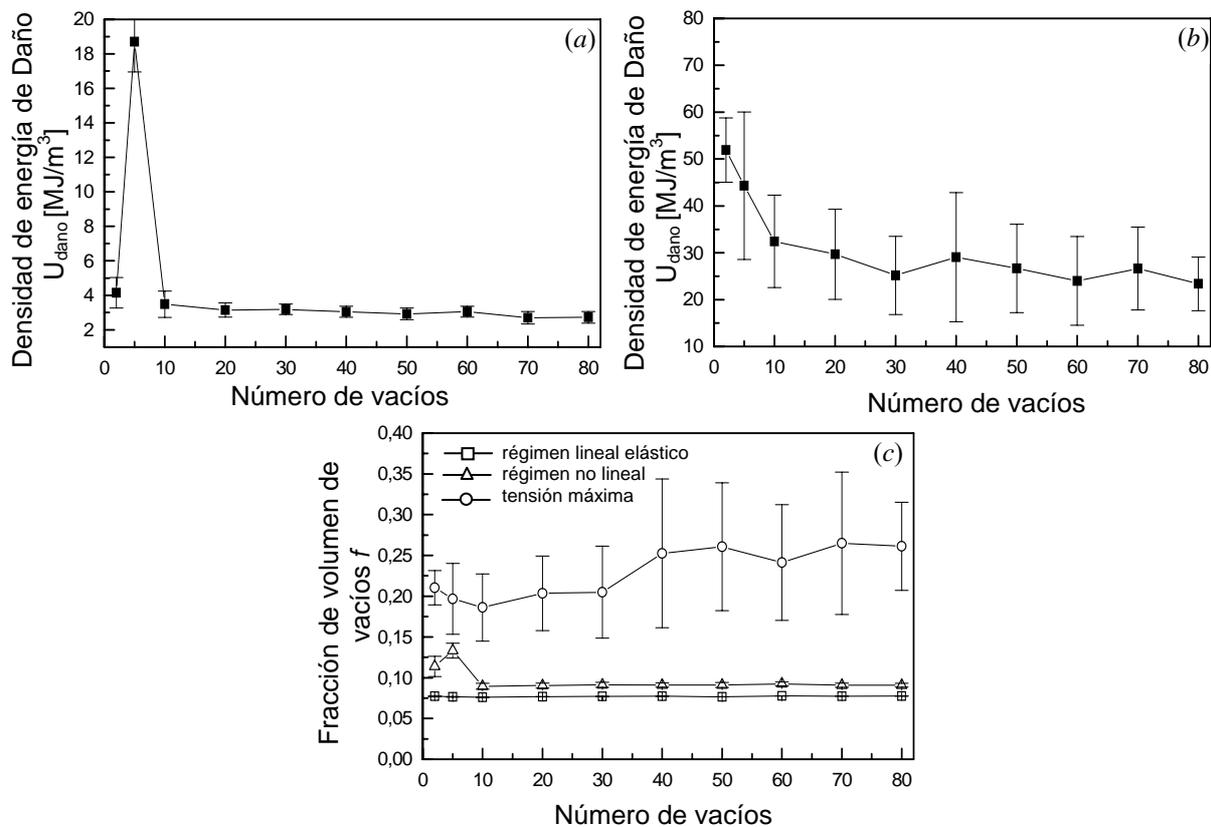


Figura 7: Resultados de densidad de energía de daño y fracción de vacíos para muestras conteniendo número creciente de vacíos: (a) energía de daño régimen no lineal (P₂); (b) energía de daño en tensión máxima (P₃); (c) fracción de volumen de vacíos en los tres niveles de carga analizados. Las barras de errores indican la dispersión en los resultados obtenidos.

De los resultados anteriores puede considerarse que una muestra de pseudo-micro-estructura de hierro fundido nodular conteniendo 40 huecos ofrece una respuesta, tanto en régimen lineal como no lineal, con un grado de dispersión aceptable, por lo tanto, resulta adecuada para el análisis a ser realizado. Utilizar tamaños de muestra mayores encarecería el estudio sin mejorar notablemente la dispersión en los resultados obtenidos. Por otro lado, los resultados obtenidos para carga máxima presentan dispersión de aproximadamente 30% inclusive para las muestras de 80 huecos. También debe notarse que a pesar de las dispersiones presentes, los valores medios entre los tamaños de muestra analizados no varían considerablemente por lo tanto puede concluirse que una muestra conteniendo 40 vacíos podría ser considerada como un elemento de volumen representativo (EVR) de la pseudo-micro-estructura de hierro fundido nodular considerada para el estudio a ser realizado.

4 FRACCIÓN DE VOLUMEN DE VACÍOS Y CRITÉRIO DE COALESCENCIA UTILIZADO

4.1 Determinación de la fracción de volumen de vacíos

El trabajo realizado por Berdin et al. (2001) muestra que en el hierro fundido nodular ferrítico, el despegue entre de la matriz y el nódulo de grafito ocurre luego que comienza a evidenciarse deformación plástica, por lo tanto puede considerarse que este material se comporta esencialmente como un material poroso, con los nódulos de grafito actuando como vacíos y una matriz metálica elastoplástica.

En los modelos en MED los vacíos son introducidos colocándoles un valor de energía específica de fractura reducido a las barras localizadas en la región del nódulo (ver Figure 8). Los elementos debilitados pasan a tener una baja capacidad de transmitir esfuerzos comportándose prácticamente como vacíos.

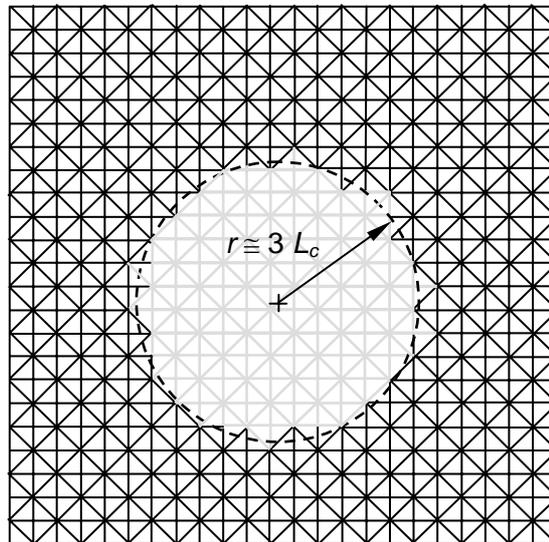


Figura 7: Procedimiento utilizado para introducir los vacíos en los modelos en MED. Note que solamente son debilitados los elementos cuyo baricentro este localizado en la región del nódulo

Utilizando este mismo criterio, la evolución de la fracción de volumen de vacíos durante la aplicación de la carga es seguida computando el número de elementos que hace parte del módulo cúbico, que perdió la capacidad de transmitir esfuerzos (elementos debilitados o rotos). Esto es realizado sumando la contribución individual de cada módulo cúbico de barras

de la formulación en MED utilizada. De tal forma que la fracción de volumen de vacíos correspondiente un determinado módulo cúbico, es afectado por el valor que resulta del cociente entre el número de barras debilitadas, $n_{debilitada}^i$ y rotas, n_{rotas}^i y el número total de barras del módulo, n_{total}^i ($n_{total}^i = 26$ para el módulo cúbico de la formulación en MED utilizada en este trabajo, (ver Figura 1 (a)). De esta forma, la expresión para la fracción de volumen de vacíos se expresa a través de la ecuación (3).

$$f = \frac{\sum_{i=1}^m V_i \cdot \frac{n_{weakened}^i}{n_{total}^i} + \sum_{i=1}^m V_i \cdot \frac{n_{failed}^i}{n_{total}^i}}{\sum_{i=1}^m V_i} \quad (3)$$

Donde V_i representa el volumen de un determinado módulo y m es el número total de módulos en el modelo. La ecuación 4 es general y considera tanto el crecimiento del vacío por deformación del mismo, como la formación de vacíos adicionales por ruptura de la matriz.

Fue realizado un conjunto de testes preliminares, con el objetivo de estudiar la influencia del tamaño del elemento utilizado en los modelos en MED, sobre la determinación de la fracción de vacíos inicial f_0 . Para esto, f_0 fue computado en varias muestras conteniendo de 10 a 20 nódulos y fracciones de volumen de vacíos inicial entre $0,08 \leq f_0 \leq 0,1$. Fueron considerados tamaños de elemento entre $0,5 \leq L_e/r \leq 0,125$. Como era de esperarse, la exactitud en la representación de los vacíos se incrementa con la reducción del tamaño de elemento utilizado. El tamaño de elemento correspondiente a la relación $L_e/r = 0,333$ (i.e. los nódulos son representados utilizando aproximadamente tres módulos cúbicos en la dirección radial, ver Figura 7), fue considerada la más adecuada, una vez que garantiza razonable exactitud y costo computacional. El error obtenido en la fracción de vacíos inicial utilizando este tamaño de elemento fue siempre menor que 0,15%.

4.2 Criterio de colaescencia considerado.

En la fractura de materiales reales que rompen por el mecanismo de crecimiento y coalescencia de vacíos, se verifican dos principales modos de coalescencia (Garrison, 1987). En uno ellos la coalescencia de las partículas mayores que nuclearon primero (a partir de los nódulos de grafito en el caso del hierro fundido nodular), se produce por la coalescencia de las partículas menores que nuclearon por último (precipitados de segunda fase). La otra forma de coalescencia se produce por la coalescencia directa entre los vacíos formados a partir de las partículas mayores, ocurriendo la estricción completa de la interfase entre los vacíos dando lugar cráteres grandes de bordes agudos en la superficie de fractura. Este último será el modo de coalescencia considerado en este trabajo.

En los testes preliminares realizados se observó que la coalescencia siempre se inicia por regiones en que existen nódulos mas próximos y el inicio de la misma está asociado con un mínimo local en la curva de razón de variación de la energía elástica con relación a la deformación del modelo vs deformación

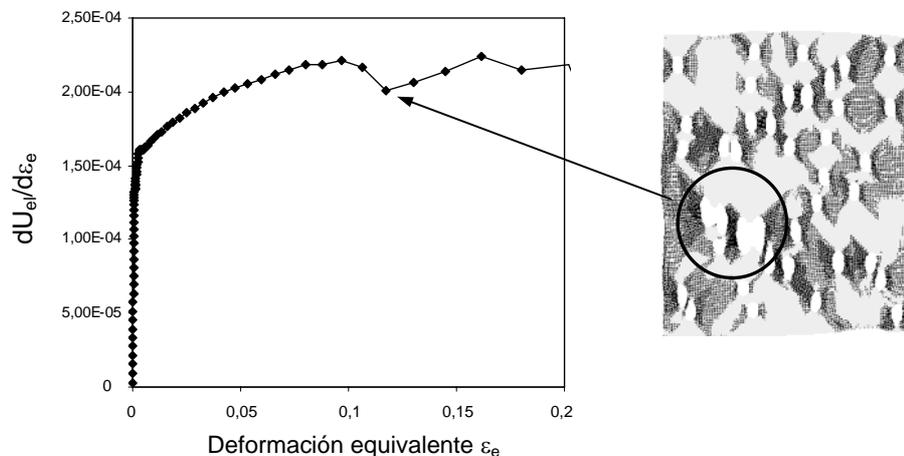


Figura 8: Curva de razón de variación de la energía elástica en relación a la variación de la deformación ($dU_e/d\varepsilon_e$) vs deformación. Detalle indicando la ocurrencia de la coalescencia asociada a un mínimo local de la curva

5 ANÁLISIS DE RESULTADOS.

Para estudiar la evolución del daño en los modelos en MED, cuarenta muestras de la pseudo-micro-estructura de hierro fundido nodular ferrítico, conteniendo 40 nódulos con distribución diferente cada una de ellas, fueron sometidas a tracción uniaxial, los resultados obtenidos fueron comparados con los resultados experimentales reportados por [Berdin et al, \(2001\)](#) para el material real tomado como referencia ([Berdin et al, 2001](#)). La figura 9 muestra la respuesta tensión vs deformación media con su correspondiente desviación standard (barras de error en y) de las 40 réplicas analizadas sobrepuesta con la curva real reportada por [Berdin et al, \(2001\)](#) para este material. Se observe excelente correspondencia entre los resultados numéricos y experimentales hasta que es alcanzado el punto de carga máxima en los modelos numéricos ($\varepsilon_{22} \approx 0.12$), a partir de donde comienza a existir divergencia entre los comportamientos obtenidos. No obstante puede verse que el comportamiento del material real se encuentra dentro de la dispersión de los resultados numéricos.

La evolución del daño en la pseudo-micro-estructura de hierro fundido nodular en los modelos en MED se muestra a través de una serie de detalles localizados en la parte superior del gráfico de la Figura 9. Las regiones en negro de los detalles corresponden a elementos dañados. El detalle (a) muestra la localización del daño en el ligamento entre dos nódulos próximos en los instantes iniciales del comportamiento no lineal del material en la curva tensión deformación. El proceso de daño en el ligamento continúa, con el incremento de la carga aplicada hasta el punto en que se produce el inicio de la coalescencia. Este fenómeno es ilustrado en el detalle (b) para el caso de tres nódulos coalesciendo en un único vacío (ver la región dentro del círculo). Finalmente en el detalle (c) se ilustra un estado de daño avanzado, con la extensión del proceso de crecimiento y coalescencia a la mayor parte del modelo, lo cual resulta en la rápida pérdida de la capacidad de transmisión de esfuerzos del mismo.

Como forma de comparación adicional, fue estudiado también el comportamiento de un modelo MED con distribución regular de vacíos. El mismo posee la misma fracción de vacíos inicial que lo modelos de distribución aleatoria de vacíos, $f_0=0.077$, pero los mismos están dispuestos siguiendo un arreglo regular cuadrado. En estos modelos la distancia normalizada entre los vacíos es constante e igual a $d/r=6.385$, así como el número de vecinos naturales

$N=8$. La respuesta tensión vs deformación para este modelo regular está también graficada en la Figura 9. Puede observarse que la distribución regular de nódulos muestra una mayor tensión de fluencia (275 MPa) que en el caso de los EVRs de distribución aleatoria de vacíos y una tensión siempre creciente. La carga máxima es alcanzada para la deformación uniaxial de $\varepsilon_{22} = 0.36$ (no es mostrado en la figura), instante este seguido de la pérdida abrupta de la capacidad de transmisión de esfuerzos del modelo. La distribución regular induce la ocurrencia casi simultánea del colapso de varios ligamentos entre los vacíos a la vez como es mostrado, en el detalle (d) de la Figura 9. Este resultado obtenido para el modelo regular es coherente con las observaciones reportadas por otros autores: i) La influencia de la distribución especial de las heterogeneidades puede ser desconsiderada durante el comportamiento elástico mientras que para respuesta mecánica más complejas la diferencia es considerable, ii) La micro-estructura de distribución regular de vacíos muestra una mayor rigidez en relación a la de distribución aleatoria (Kouznetsova, 2001).

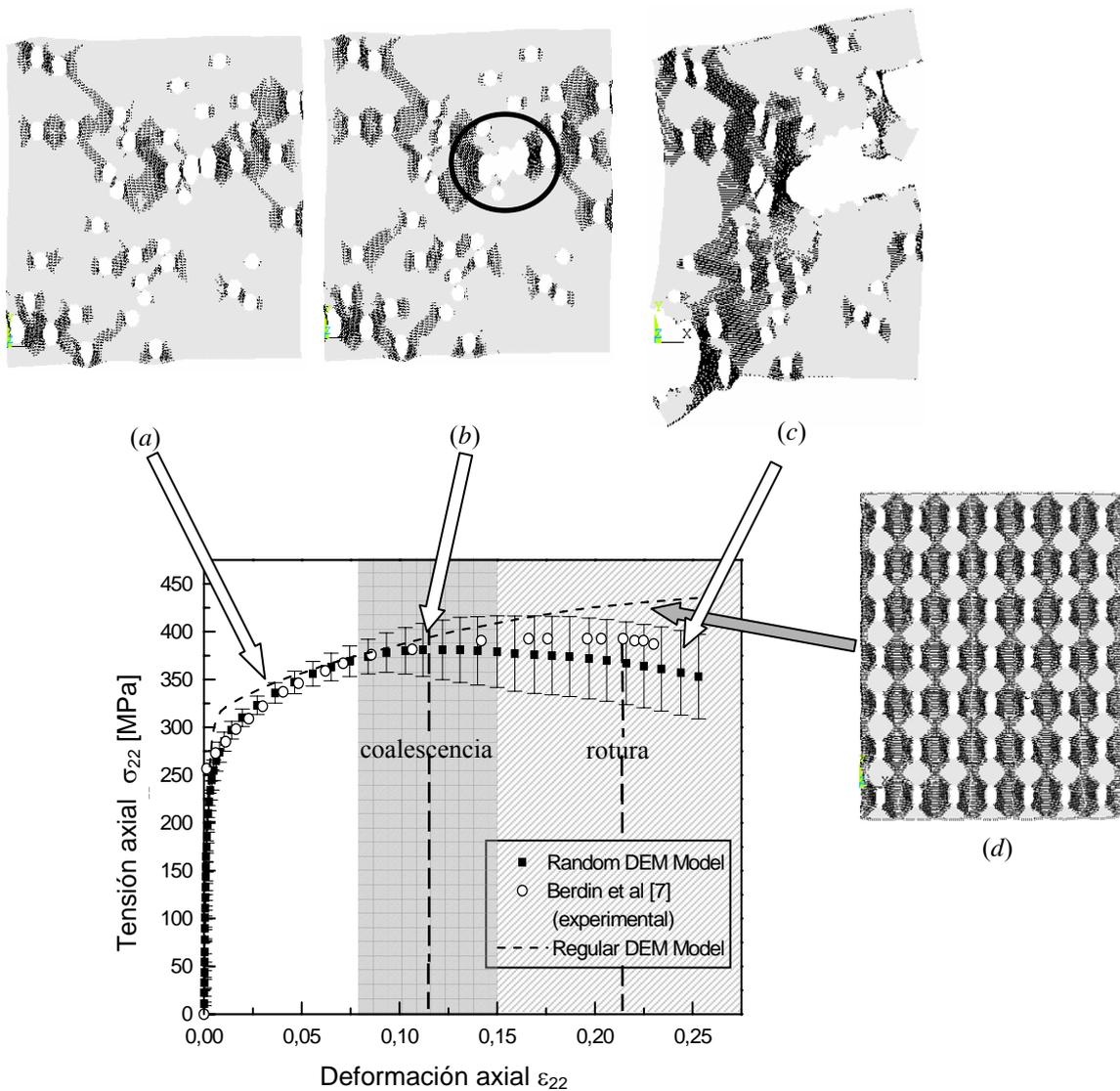


Figura 9: Respuesta media en tensión vs deformación con su respectiva dispersión de los 40 EVRs analizados y de la micro-estructura de distribución regular de vacíos. También es mostrado en los detalles el estado de las pseudo-micro-estructuras para diferentes niveles de carga.

Como fue comentado anteriormente, en este trabajo se considera que la coalescencia se inicia con la ruptura del ligamento entre dos o más nódulos. Este criterio está direccionado a cuantificar la fracción de vacíos real en el modelo, y el mismo difiere de los criterios usualmente utilizados, que generalmente está asociados a la ocurrencia de la localización de la fluencia en el ligamento entre los vacíos (Goods and Brown, 1979; Brown and Embury, 1973; Kim et al, 2004).

La ocurrencia de la coalescencia fue verificada para todas los 40 EVRs analizados, y los resultados obtenidos son resumidos en la Figura 10. Se obtuvo una deformación macroscópica media de inicio de la coalescencia de $\varepsilon_{22}^c = 0.12$ con desviación standard de $\Delta = \pm 0.035$ (ver banda sombreada en la Figure 10). El rango de deformaciones de inicio de la coalescencia es sobrepuesto en la curva tensión vs deformación media de la Figura 9. Se observa que la deformación media de coalescencia, ε_{22}^c , coincide con el punto de tensión máxima alcanzado en los modelos numéricos. Por otro lado la coalescencia en el modelo regular coincide con la falla final del modelo para $\varepsilon_{22} = 0.36$. Como fue mencionado anteriormente, la regularidad en la distribución de huecos induce a la coalescencia simultánea de muchos ligamentos entre los vacíos lo que resulta en la ruptura final del modelo.

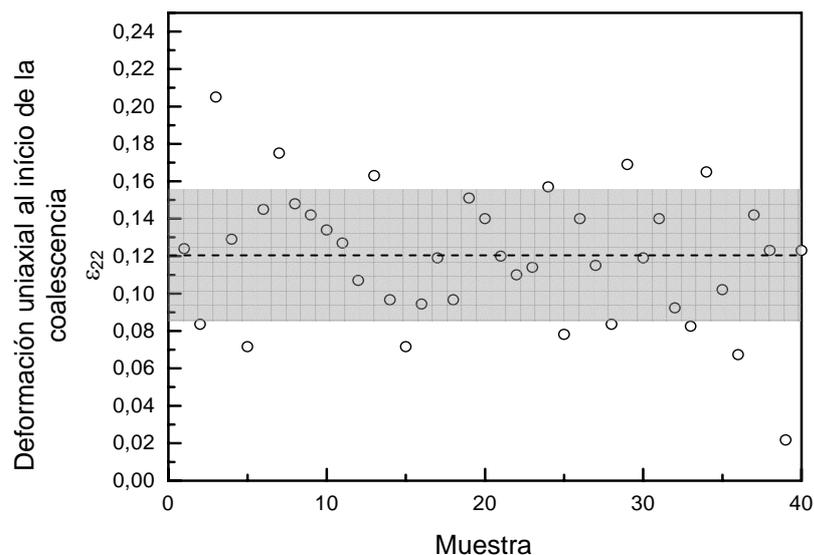


Figura 10: Resultados de deformación uniaxial ε_{22} de inicio da coalescencia. La banda sombreada representa la desviación stadard en los resultados.

La Figura 11 ilustra la evolución de la fracción de volumen de vacíos en función de la deformación longitudinal ε_{22} . De igual manera que para los resultados mostrados anteriormente, las barras de errores en y indican la desviación standard en los datos analizados. El rango de deformaciones correspondiente al inicio de la coalescencia fue utilizado para estimar la fracción de volumen de vacíos crítica f_c . De esta forma, la fracción de volumen de vacíos media obtenida fue de $f_c = 0.19$, con valores limites superior e inferior de $f_c^{\min} = 0.12$ and $f_c^{\max} = 0.27$, respectivamente. Como fue mencionado en la introducción, los valores reportados para inicio de la coalescencia están entre $f_c = 0.10$ y $f_c = 0.20$. Por lo tanto los resultados obtenidos, son coherentes con los valores reportados para f_c en el caso del límite inferior, pues el límite superior sobrestima el valor de f_c . Sin embargo es bueno resaltar

que el valor para el límite superior obtenido, es impreciso por causa de la dispersión considerable que presenta como puede ser visto en la Figura 11.

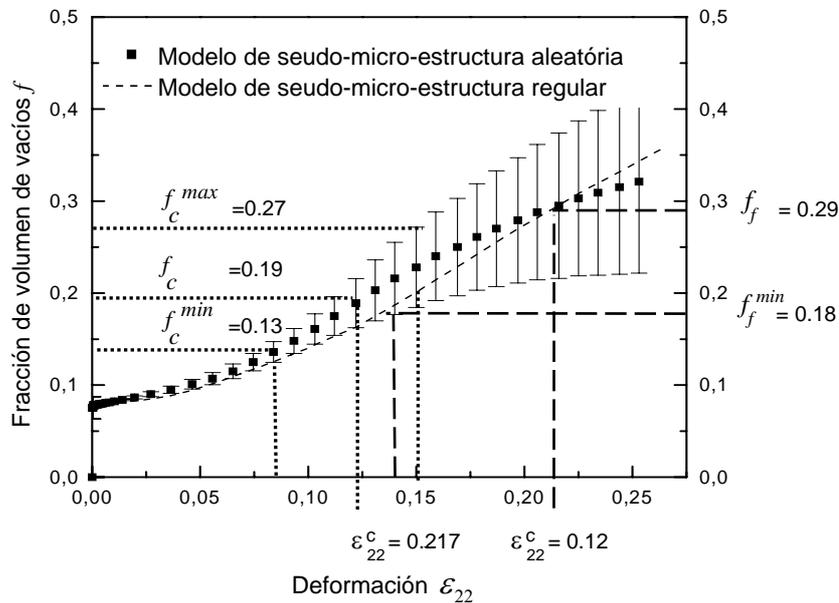


Figura 11: Evolución de la fracción de volumen de vacíos f en función de la deformación axial.

La fracción de volumen de vacíos crítica reportada por [Berdin et al, \(2001\)](#) para el hierro fundido nodular es $f_c = 0.12$. Este valor resulta menor que el valor medio encontrado en este trabajo $f_c = 0.19$. Varios aspectos pueden ayudar a explicar esta discrepancia. La primera consideración esta relacionada con el concepto de coalescencia propiamente dicho. Como fue comentado anteriormente en esta sección, se considera el inicio de la coalescencia en los modelos en MED cuando se produce la unión física de dos vacíos, mientras que el criterio usual utilizado para definir coalescencia es la ocurrencia de la fluencia en el ligamento entre dos vacíos. Por lo tanto, es de esperar que los modelos en MED acusen la ocurrencia de la coalescencia para niveles de daño mas avanzados, durante el proceso de aplicación de la carga. Al mismo tiempo, resulta oportuno mencionar que el valor de f_c reportado por [Berdin et al, \(2001\)](#), no corresponde a observaciones experimentales sino que fue obtenido a partir de ajustar la respuesta del modelo de [Gurson, \(1977\)](#) con la respuesta experimental del material. Otro aspecto importante a ser considerado cuando se comparan los resultados de este trabajo con los reportados por [Berdin et al, \(2001\)](#) es en relación a la triaxialidad en las tensiones presente. Se sabe que el modelo de [Gurson, \(1977\)](#) asume la existencia de un elevado nivel de triaxialidad. En relación a esto [Kim et al, \(2004\)](#) mostró que se obtienen menores valores de f_c para altos niveles de triaxialidad en las tensiones y mayores valores de f_c para menores niveles de triaxialidad. En este sentido [Kim et al, \(2004\)](#) reportó incrementos hasta de 80% en el valor de f_c cuando es reducido el nivel de triaxialidad en las tensiones en un material de fracción de volumen de vacíos inicial $f_o = 0.05$. También fue demostrado por este autor que esta tendencia puede ser incrementada para valores de f_o mayores. Considerando que los modelos en MED utilizados en este trabajo presentan bajo nivel de triaxialidad en las tensiones (estado plano de deformaciones) con fracción de vacíos inicial de $f_o = 0.077$, es de esperar entonces altos valores de fracción de volumen de vacíos de coalescencia.

La falla final también fue verificada para los 40 EVRs analizados y los resultados

obtenidos en términos de deformación macroscópica son mostrados en la Figura 12. El valor medio para la deformación de falla obtenido fue de $\varepsilon_{22}^f = 0.217$ con desviación standard de $\Delta = \pm 0.067$, el cual esta en excelente correspondencia con el valores reportados por [Berdin et al, \(2001\)](#) para este material (ver tabla 2). El rango de valores obtenido para la deformación de ruptura fue utilizado para estimar la fracción de volumen de vacíos de falla f_f (ver Figura 11). El valor medio resultante fue de $f_f = 0.29$, con limites inferior y superior de $f_f^{\min} = 0.18$ y $f_f^{\max} = 0.42$, respectivamente. Cuando comparado con los resultados estimados por [Berdin et al \(2001\)](#) y [Dong et al \(1997\)](#), para la fracción de volumen de vacíos de falla ($f_f = 0.20$), se observa que el mismo es casi coincidente con el limite inferior computado. Por otro lado el limite superior computado se encuentra en el orden del valor obtenido para la distribución regular de vacíos ($f_f^{\text{reg}} = 0.45$).

La gran dispersión encontrada en los resultados para el momento de falla puede ser parcialmente atribuido al tamaño del EVR considerado. Dos formas típicas de falla fueron registradas en los EVRs analizados, los cuales son mostrados en la Figura 14: (a) dentro del dominio del EVR, y (b) en el borde de los modelos. Este último modo de falla envuelve la separación de una pequeña parte del modelo. Aproximadamente 20% de las muestras analizadas rompieron siguiendo el modo (b). Se presume que muestras conteniendo un número mayor de vacíos no tendrán este comportamiento disminuyendo la dispersión en los resultados.

6 CONCLUSIONES

En este trabajo fue presentada la aplicación del Método de los Elementos Discretos (MED) al estudio del micro-mecanismo de falla por crecimiento y coalescencia de vacíos de materiales micro-porosos de matriz metálica. La utilización de este método está vinculada fundamentalmente, a su inherente habilidad en representar nucleación e coalescencia de vacíos. La formulación propuesta considera comportamiento no lineal al hacer uso de la ley trilineal, y permite monitorear la evolución de la fracción de vacíos con la evolución del daño.

La micro estructura del hierro fundido nodular ferrítico fue considerada como la de un material microporoso de matriz metálica elastoplástica. Las distribuciones aleatorias de nódulos generadas computacionalmente fueron caracterizadas a partir del análisis estadístico de micrografías standards de hierros fundidos nodulares utilizando procesamiento de imágenes. Los estudios fueron realizados sobre modelos en MED en 2 dimensiones de una pseudo micro-estructura de hierro fundido nodular ferrítico.

El tamaño de EVR fue determinado utilizando una serie de modelos en MED en que mantiene la fracción de volumen de vacíos inicial constante y se incrementa el número de nódulos considerado. En la determinación del EVR fue monitoreado el comportamiento de la densidad de energía de deformación elástica, la densidad de energía de daño y de la fracción de volumen de vacíos a través de una serie de análisis hasta encontrar un comportamiento invariante de estas variables. Finalmente un EVR conteniendo 40 vacíos fue seleccionado.

La metodología propuesta fue aplicada e comparada con los resultados reportados por [Berdin et al, \(2001\)](#), pudiéndose comprobar que el modelo fue capaz de reproducir el comportamiento tensión vs deformación macroscópico reportado. Fue monitoreado además la evolución del daño en la pseudo-micro-estructura durante el proceso de aplicación de la carga, así como las energías de daño y de deformación elástica, dándose especial atención a los eventos de coalescencia y falla final de los modelos en MED.

El inicio de la coalescencia es considerado cuando se produce la unión física de dos o mas

vacíos vecinos. Considerando este criterio de coalescencia se encontró que la deformación macroscópica media que marca el inicio de la coalescencia está localizado en el punto de tensión máxima. El valor medio resultante para la fracción de volumen de vacíos de coalescencia obtenido fue de $f_c = 0.19$, el mismo excede considerablemente el valor reportado en la literatura (Berdin et al, 2001) para el material real tomado como referencia ($f_c = 0.12$). Esta discrepancia es atribuida a los criterios diferentes utilizados en cada caso para definir el inicio de la coalescencia y el bajo nivel de triaxialidad en las tensiones presente en los modelos utilizados en este trabajo.

El valor medio para la deformación de falla encontrado fué de $\varepsilon_{22}^f = 0.217$, que es coherente con el valor de elongación reportado por Berdin et al (2001). Por otro lado el valor medio para fracción de volumen de vacíos en el momento de la falla fue de $f_f = 0.29$. Igualmente que para la fracción de volumen de vacíos de coalescencia los valores obtenidos en este trabajo para la fracción de volumen de vacíos de falla exceden a los valores de referencia, reportados ($f_f = 0.20$).

La metodología propuesta demuestra la potencialidad del MED en contribuir a la comprensión del micro-mecanismo de fractura por crecimiento y coalescencia de vacíos. La metodología desarrollada puede ser fácilmente adaptada para considerar el efecto de inclusiones e inhomogeneidades en las propiedades mecánicas de la matriz, efectos viscosos y el tratamiento del problema en tres dimensiones.

REFERENCES

- C. Berdin, M.J. Dong and C. Prioul Local approach of damage and fracture toughness for nodular cast iron, *Engineering Fracture Mechanics*, 68: 1107-1117, 2001.
- V. Tvergaard and A. Needleman Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar. *Acta Metallurgica*, 32: 157-169, 1984.
- S. H. Goods and L. M Brown. The nucleation of cavities by plastic deformation, *Acta Metallurgica* Vol 27: Issue 1, 1-159, 1979.
- L. M. Brown and J. D. Embury The initiation and growth of voids at second phase particles. IN: *3ed. Int. Conf. On Strength of Metals and Alloys*, Institute of Metals, 164-169, London 1973.
- L. Xia, F.C. Shih and J.W. Hutchinson. A computational approach to ductile crack growth under large scale yielding conditions, *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 43: 389-413 1995.
- R. Ruggieri, T.L. Panontin and Dodds R. Numerical modeling of ductile crack growth in 3D using computational cell elements. *International Journal of Fracture*, 82:67-95, 1997.
- C. Huet. Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies. *J. Mech. Phys. Solids*, 38(6): 813-841, 1990
- K. Terada and N. Kikuchi. Nonlinear homogenization method for practical applications In: *Computational Methods in Micromechanics* (eds. Ghosh S., Ostoja-Starzewski M.), AMD-Vol. 212/MD-Vol. 62, ASME, 1-16, 1995
- R. Hill, The Elastic Behavior of a Crystalline Aggregate. *Proc. Phys. Soc.* A65, 349-354, London, 1952.
- S. Nemat-Nasser and M. Hori Micromechanics: overall properties of heterogeneous materials. Second Edition. North-Holland, 1999
- ASM Handbook. Mechanical Testing, Volume 8. USA, 1985
- M.M. ROCHA, Ruptura e efeito de escala em materiais não homogêneos de comportamento

- frágil. 1989. 123 páginas. Tesis (Mestrado em Engenharia Civil) - Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil CPGEC/UFRGS, 1989.
- Y.HAYASHI. Sobre um modelo de discretização de estruturas tridimensionais aplicado em dinâmica não linear. 1982. Tesis (Mestrado em Engenharia Civil), Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil CPGEC/UFRGS, 1982.
- A. L. GURSON. Continuum Theory of Ductile Rupture by Void Nucleation and Growth: Part I- Yield Criteria and Flow Rules for Porous Ductile Media, *Journal of Engineering Materials and Technology*, Vol. 99: 2-15, 1977.
- T. L. ANDERSON. *Fracture Mechanics: Fundamentals and Applications*, Department of Mechanical Engineering, Texas A&M University, College Station, Texas, 1991
- M.J Dong, C. Prioul and D. François Damage Effect on the Fracture Toughness of Nodular Cast Iron: Part I. Damage Characterization and Plastic Flow Stress Modelling, *Metalurgical and Materials Transaction A*, V. 28^a:2245 – 2254, 1997.
- J.D Riera and I. Iturrioz. Discrete Element Dynamic-Response of Elastoplastic Shells Subjected to Impulsive Loading, *Communications in Numerical Methods in Engineering*, vol. 11, pp. 417-426, Wiley & Sons, U. K. 1995.
- V. Kouznetsova, W.A.M Brekelmans., and F.P.T. Baaijens. An approach to micro-macro modelling of heterogeneous materials. *Comput. Mechanics*, 27: 37-48, 2001.
- K. Kim, X. Gao and T. Srivtsan. Modeling of void growth in ductile solids: effects of stress triaxiality and initial porosity, *Engineering Fracture Mechanics*, 71: 379-400, 2004.
- W. Brocks, D.-Z Sun and A. Honig, Verification of the transferability of Micromechanical parameters by cell model calculations with visco-plastic materials, *International; Journal of Plasticity*, vol. 11, pp. 971-989, 1995.
- V. Tverggard, and A. Needleman, On Localization in Ductile Materials Containing Spherical Voids, *International Journal of Fracture*, v.18: 237-252, 1982,
- K.E. Putick. Defects and Mechanical Properties, *Philosophical Magazine A: Physics of Condensed Matter*, 4: 964-969. 1959.
- K.S. Zhang, J.B. Bai and D. François, Ductile Fracture of materials with high volume fraction. *International Journal of Solids and Structures*. 36 3407-3425, 1999.
- W.M. Garrison and N.R. Moody. Ductile Fracture. *Journal of the Physics and Chemistry of Solids*, 48, N° 11, pp. 1035-1074, 1987.