



UNCUYO
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE CUYO



**FACULTAD
DE INGENIERÍA**

“INTRODUCCIÓN A LA CIENCIA (E INGENIERÍA) DE LOS MATERIALES COMPUTACIONAL ”

MATERIALES

Prof. Titular: Dra. Ing. María J. Santillán

Prof. Adjunto: Dr. Ing. Claudio Careglio

PLAN DE LA PRESENTACIÓN

- Introducción
- Modelado y simulación
- Modelado y simulación de materiales
- Escalas en la estructura y comportamiento de materiales
- Desarrollo de modelos de materiales
- Algunos modelos del comportamiento de materiales
- Mecánica Computacional
 - Clasificaciones
- Tipos de Problemas
- Estrategias de solución

INTRODUCCIÓN

- Las **simulaciones computacionales** son cada vez más importantes en el ámbito de la Ingeniería.
- En el **campo de la investigación** las mismas permiten:
 - **disminuir** el número de experimentos a realizar,
 - **disminuir** los costos e incertidumbres que conlleva la realización de experimentos,
 - en algunos casos hasta **sustituir** dichos experimentos por ensayos numéricos.
 - También permiten obtener soluciones a problemas que en forma **analítica** sería muy **difícil** y en muchos casos casi imposible de resolver.

INTRODUCCIÓN

- En el **campo de la industria** permiten a los ingenieros:
 - **diseñar piezas o sistemas** más adecuados para determinadas condiciones de trabajo,
 - como así también realizar estimaciones de la **vida útil** de los mismos,
 - entre otros beneficios.

MODELADO Y SIMULACIÓN

- **Modelo:**
 - Es una idealización del comportamiento real
 - Un modelo comienza como un conjunto de conceptos, luego se transcribe en una forma matemática (de la cual se puede calcular alguna cantidad o comportamiento).

- **Simulación:**
 - Una simulación es un estudio de la respuesta de un sistema modelado a fuerzas externas y restricciones.
 - Llevamos a cabo simulaciones sometiendo a los modelos a las entradas y restricciones de los eventos reales simulados.
 - Las simulaciones se basan en modelos.
 - La simulación no representa la realidad, sino que es un modelo de la realidad.

MODELADO Y SIMULACIÓN (continuación...)

- En resumen, trabajar con **simulaciones computacionales** implica:



tratar con modelos que representen la **realidad de un fenómeno o problema físico**



y obtener, a partir de estos, **modelos matemáticos** que sean adecuados para ser utilizados en **computadoras**.

MODELADO Y SIMULACIÓN DE MATERIALES

- Algunos de los temas que se abordarán en el curso:
 - Presentar las características y posibilidades de la ciencia de los materiales (e ingeniería) computacional (como así también de la Mecánica Computacional en general).
 - Bases de la simulación del comportamiento de materiales.
 - Discutir cómo usarlas para avanzar en el descubrimiento, desarrollo y aplicación de los materiales.
 - Se discutirá como modelar el comportamiento de materiales específicos

MODELADO Y SIMULACIÓN DE MATERIALES (continuación...)

- ¿Que és la **CIENCIA DE MATERIALES COMPUTACIONAL** ?
- Es una disciplina que el ingeniero moderno debe ser capaz de utilizar y que surge de la interacción de:

ciencia (ingeniería) de los materiales

+

matemática

+

computación

- Ciencia (e ingeniería) de los materiales computacional
 1. **Modelado y simulación** para entender y predecir el comportamiento de materiales.
 2. **Ciencia de los materiales Computacional**: los objetivos son comprender y predecir mejor el comportamiento de materiales,
 3. **Ingeniería de los materiales Computacional**: que se centra en las aplicaciones prácticas de materiales, típicamente con un énfasis en los productos.
 4. Esta distinción es **arbitraria** y no está bien definida, teniendo en cuenta que los métodos básicos son generalmente los mismos y son las aplicaciones de dichos métodos las que tienen diferentes objetivos.

MODELADO Y SIMULACIÓN DE MATERIALES (continuación...)

5. CMSE es más potente cuando tiene un fuerte lazo con experimentos.
6. En su forma más simple, los **datos experimentales** pueden servir como una validación de la precisión de los modelos y los cálculos basados en ellos.
7. Cuando se usan juntos, CMSE proporciona una **comprensión más profunda** de un sistema de materiales que el experimento solo.
8. El modelo puede **predecir el comportamiento**, ya sea en condiciones para las que no tenemos datos experimentales o para sistemas con muchos parámetros para los que realizar todos los experimentos posibles no es factible.
9. CMSE sirve como un socio en igualdad con el experimento.

ESCALAS EN LA ESTRUCTURA Y COMPORTAMIENTO DE MATERIALES

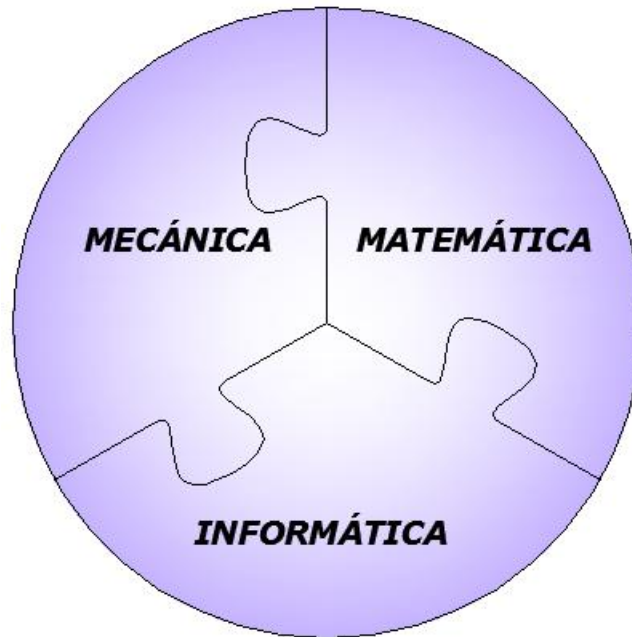
- En el **modelado y simulación de materiales**: diferentes escalas de longitudes y tiempos gobiernan la respuesta de los materiales.
- **Escala de longitud**: desde los nanómetros de los átomos a los metros de estructuras de ingeniería.
- **Escala de tiempo**: desde femtosegundos de las vibraciones atómicas a las décadas de uso de los materiales en los productos.

ESCALAS EN LA ESTRUCTURA Y COMPORTAMIENTO DE MATERIALES (continuación...)

- Dada la variedad de procesos físicos en cada una de estas escalas, no debería sorprender que una sola técnica **no** funcionará para **todas las escalas**.
- Por lo tanto **muchos métodos** han sido desarrollados, cada uno centrado en un conjunto específico de fenómenos físicos y apropiados para un determinado rango de longitudes y tiempos.
- Más adelante veremos algunos de los métodos más importantes.

ESCALAS EN LA ESTRUCTURA Y COMPORTAMIENTO DE MATERIALES (continuación...)

- Una de las áreas de estudio es la mecánica de materiales, asociada específicamente entonces a:
 - Mecánica Computacional



(Figura adaptada de: Careglio, C. (2017); “Respuesta mecánica global y local en problemas elastoplásticos con grandes deformaciones”, Ph.D thesis, Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza, Argentina.)

ESCALAS EN LA ESTRUCTURA Y COMPORTAMIENTO DE MATERIALES (continuación...)

Unit	Length scale	Time scale	Mechanics
Complex structure	10^3 m	10^6 s	Structural mechanics
Simple structure	10^1 m	10^3 s	Fracture mechanics
Component	10^{-1} m	10^0 s	Continuum mechanics
Grain microstructure	10^{-3} m	10^{-3} s	Crystal plasticity
Dislocation microstructure	10^{-5} m	10^{-6} s	Micro-mechanics
Single dislocation	10^{-7} m	10^{-9} s	Dislocation dynamics
Atomic	10^{-9} m	10^{-12} s	Molecular dynamics
Electron orbitals	10^{-11} m	10^{-15} s	Quantum mechanics

Table 3 Range of strain rates in common mechanical property tests

Range of strain rate	Type of test
10^{-8} to 10^{-5} s^{-1}	Creep test at constant load or stress
10^{-5} to 10^{-1} s^{-1}	Tension test with hydraulic or screw driven machines
10^{-1} to 10^2 s^{-1}	Dynamic tension or compression tests
10^2 to 10^4 s^{-1}	High-speed testing using impact bars
10^4 to 10^8 s^{-1}	Hypervelocity impact using gas guns or explosively driven projectiles

ESCALAS EN LA ESTRUCTURA Y COMPORTAMIENTO DE MATERIALES (continuación...)

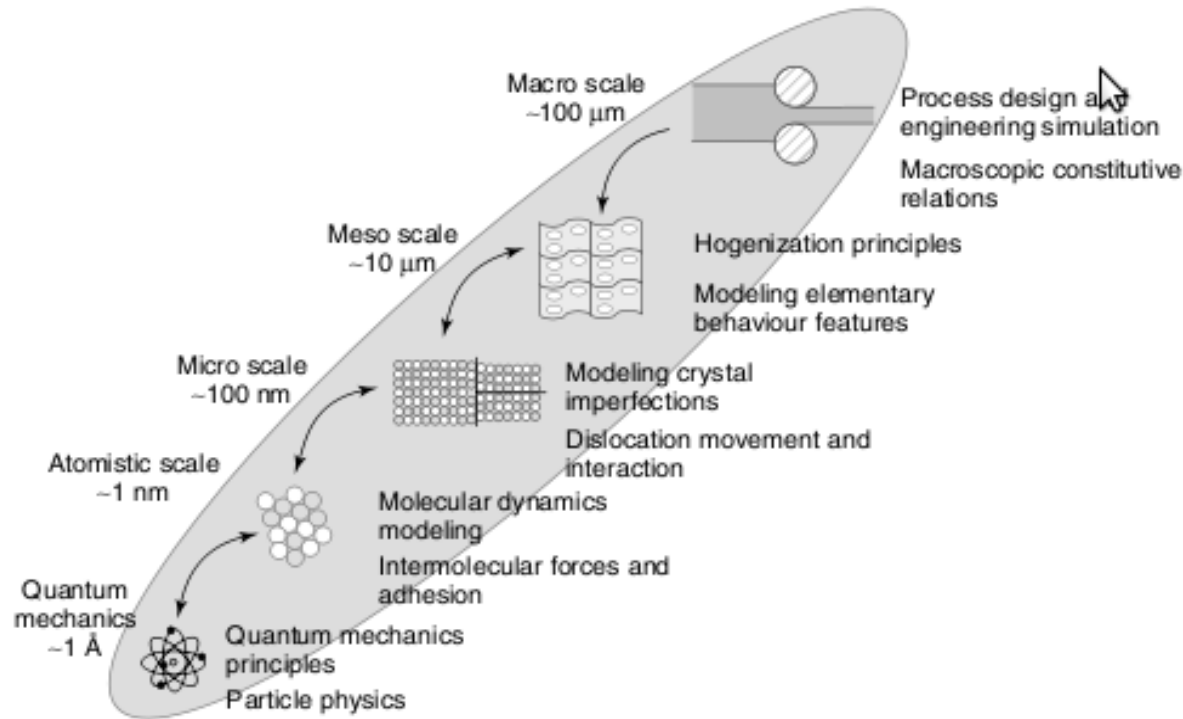
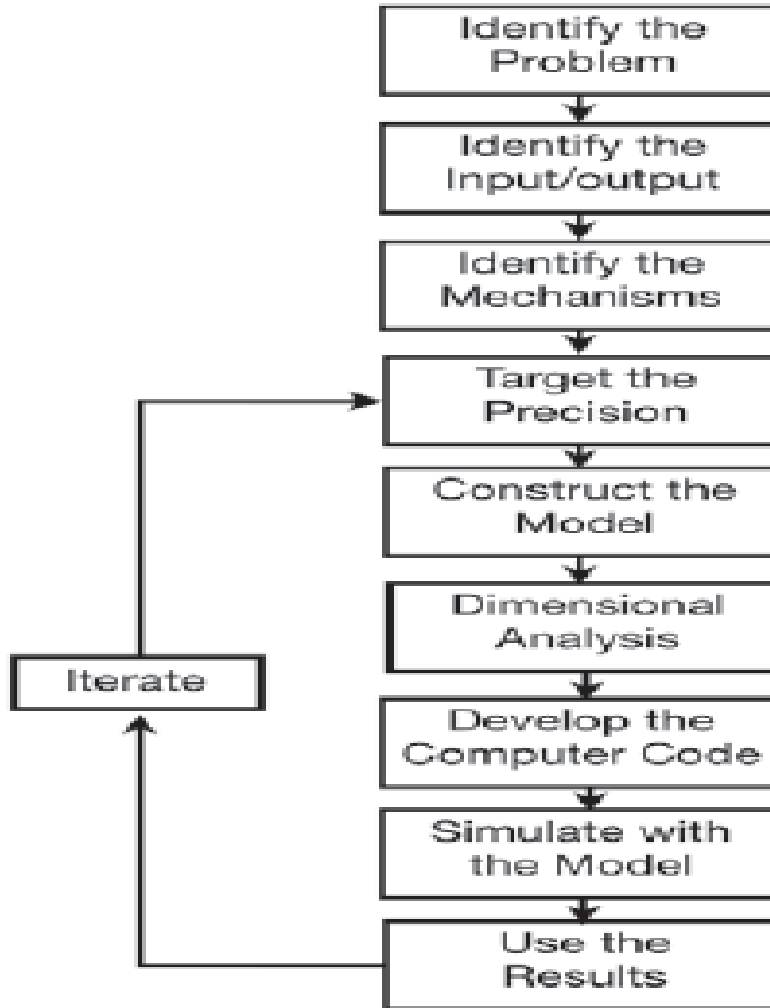


Figure 1.8 Length scales for most metal materials. Classification of physical phenomena in different time and length scales is not an easy task. The concept of scales often differs over the spectrum of nature of materials and microstructures. For instance, biological tissues, such as tendons, frequently present scale classes based upon structural/hierarchical characteristics (from tropocollagen molecules and microfibril structures to the endotendon and tendon itself, the length scale spans from

~1.5 nm to ~3000 μm) [44]. Computational modeling of engineering materials requires also careful considerations owing to different natures and structures: the typical length scales for geotechnical and building materials are significantly different from those characteristic of metal materials, for example, the former can handle macroscales measured in meters, whereas the latter can be modeled using phenomenological approaches with macroscales measured in micrometers.

DESARROLLO DE MODELOS DE MATERIALES

- Proceso para el desarrollo sistemático y validación de modelos de materiales:



- Elasticidad
- Inelasticidad
 - Viscoelasticidad
 - Plasticidad
 - Microplasticidad
 - Plasticidad (pequeñas deformaciones)
 - Plasticidad con grandes deformaciones
 - Viscoplasticidad
- Etc

Nota: En general no se puede representar distintos materiales con un mismo modelo

- **Clasificación según la escala física:**
 - **Nanomecánica** (trata de los fenómenos a escala molecular y atómica).
 - **Micromecánica** (fundamentalmente trata la materia en niveles cristalográficos y granulares).
 - **Mecánica de Medios Continuos** (cuerpos estudiados a nivel macroscópico, utiliza modelos continuos en los que la microestructura se homogeneiza mediante un promediado fenomenológico).
 - **Sólidos y Estructuras** (Las estructuras se fabrican con sólidos. La Mecánica de Sólidos Computacional favorece un enfoque de ciencias aplicadas, mientras que la Mecánica Estructural Computacional hace hincapié en aplicaciones tecnológicas para el análisis y diseño de estructuras.).
 - **Fluidos** (trata problemas que implican el equilibrio y el movimiento de líquidos y los gases.)
 - **Multifísica** (tratar con problemas mecánicos más allá de los límites clásicos de la mecánica de sólidos y fluidos. Ej: interacción fluido-estructura, dinámica de fluidos con reacciones químicas, etc.)
 - **Sistemas** (Ej.: aviones, edificios, puentes, motores, automóviles, etc.)

TIPOS DE PROBLEMAS

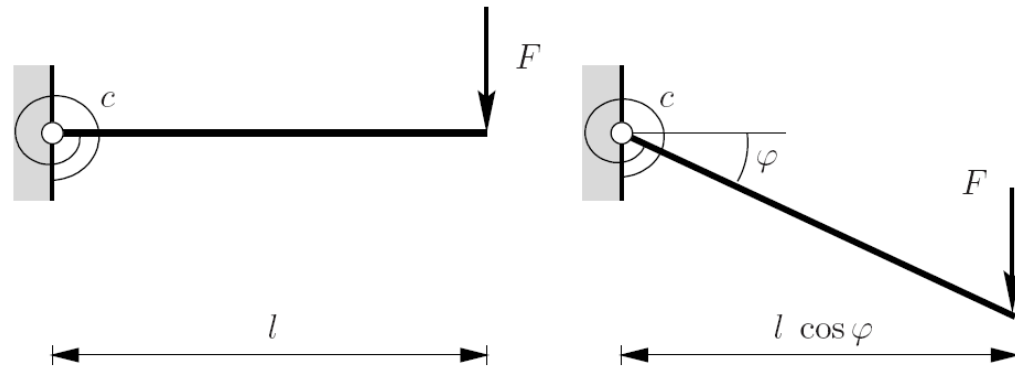
- Los tipos de problemas abordados pueden clasificarse
 - Según si se tienen en cuenta los efectos de inercia:

- Problemas estáticos
- Problemas dinámicos

- Según el tipo de respuesta

(relación causa-efecto)

- Problemas lineales
- Problemas no lineales (no linealidad geométrica, no linealidad del material)



Ejemplo:

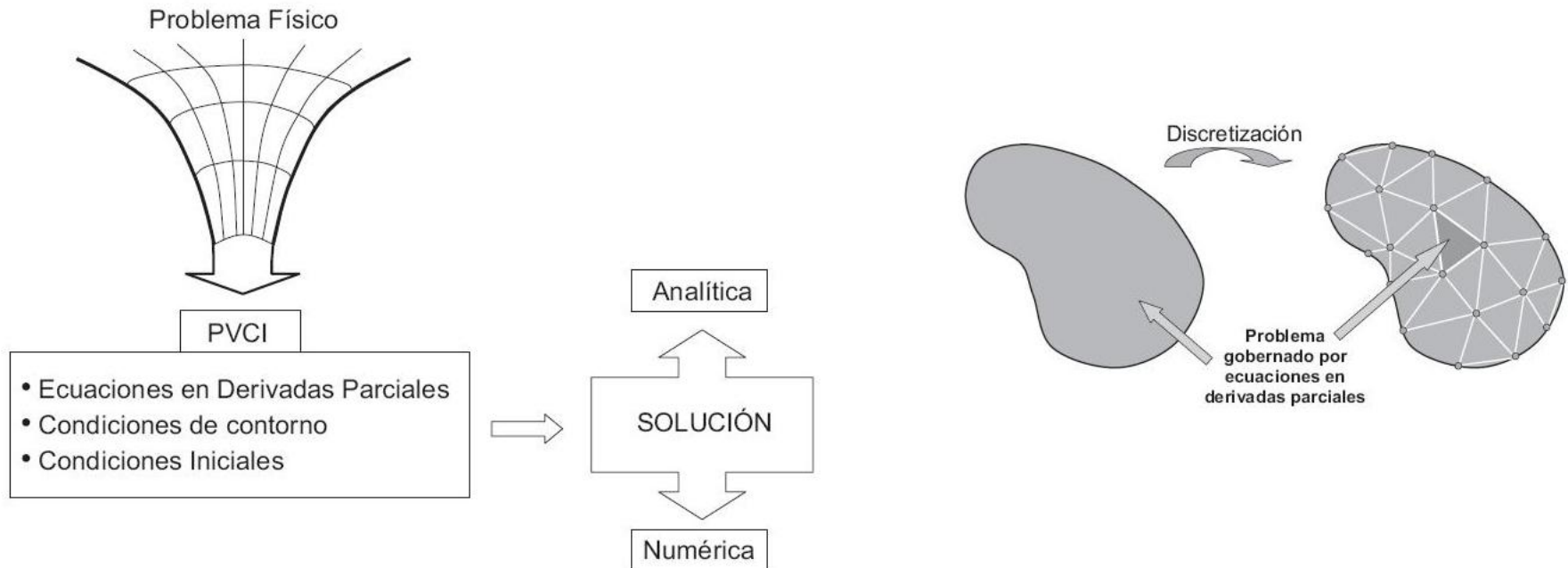
Viga rígida con empotramiento flexible

No lineal: $F l \cos(\varphi) = c \varphi$

Lineal (para pequeñas rotaciones $\cos(\varphi) \rightarrow 1$): $F = c \varphi / l$

ALGUNAS ESTRATEGIAS DE SOLUCIÓN

- Para resolver un problema físico mediante Mecánica Computacional se debe
 - 1. Desarrollar de un modelo;
 - 2. Formular las ecuaciones que lo gobiernan;
 - 3. Discretizar las ecuaciones;
 - 4. Resolver las ecuaciones.



- En el contexto de la simulación de problemas físicos representados por ecuaciones diferenciales algunas de las estrategias de **solución numérica** son:
 - **Método de Diferencias Finitas**
 - Basado en la representación de una derivada mediante una aproximación por diferencias entre los puntos vecinos.
 - En base a tales aproximaciones el sistema original se E.D. se reduce a un sistema de ecuaciones algebraicas que se debe resolver.
 - **Método de Elementos Finitos**
 - Basado en aproximar las E.D. o forma "fuerte" del problema por la forma "débil" (ecuaciones se cumplen en promedio y no punto a punto)
 - El dominio se subdivide en subregiones o elementos.
 - Resolver empleando una aproximación polinomial
 - **Método de Dinámica Molecular**
 - Da información sobre la estructura y la dinámica en la escala atómica.
 - La idea básica es: calcular las fuerzas en los átomos y resolver ecuaciones de Newton para determinar cómo se mueven los mismos.