

UNIVERSIDAD SAN FRANCISCO DE QUITO

Colegio de Ciencias e Ingeniería

Análisis elasto-plástico de microestructuras multifásicas policristalinas

Nelson Alejandro Albán Bajaña

Edison Bonifaz, PhD., Director de Tesis

Tesis de grado presentada como requisito
para la obtención del título de Ingeniero Mecánico.

Quito, mayo de 2015

Universidad San Francisco de Quito

Colegio de Ciencias e Ingeniería

HOJA DE APROBACIÓN DE TESIS

Análisis elasto-plástico de microestructuras multifásicas policristalinas

Nelson Alejandro Albán Bajaña

Edison Bonifaz, PhD.,
Director de Tesis

David Escudero, PhD.,
Miembro del Comité de Tesis

Patricio Chiriboga, PhD.,
Miembro del Comité de Tesis

Alfredo Valarezo, PhD.,
Director de Ingeniería Mecánica

Ximena Córdova, PhD.,
Decana de la Escuela de Ingeniería
Colegio de Ciencias e Ingeniería

Quito, mayo de 2015

© DERECHOS DE AUTOR

Por medio del presente documento certifico que he leído la Política de Propiedad Intelectual de la Universidad San Francisco de Quito y estoy de acuerdo con su contenido, por lo que los derechos de propiedad intelectual del presente trabajo de investigación quedan sujetos a lo dispuesto en la Política.

Asimismo, autorizo a la USFQ para que realice la digitalización y publicación de este trabajo de investigación en el repositorio virtual, de conformidad a lo dispuesto en el Art. 144 de la Ley Orgánica de Educación Superior.

Firma:

Nombre: Nelson Alejandro Albán Bajaña

C. I.: 1718291147

Fecha: Quito, mayo de 2015

DEDICATORIA

Siempre me he sentido agradecido y sorprendido por la linda familia que tengo, se han preocupado de mí desde el momento en que llegué a este mundo y me han formado para saber cómo luchar y salir victorioso ante las diversas adversidades de la vida. Después de muchos años, sus enseñanzas y cariño no cesan, y aquí estoy, con un nuevo logro exitosamente conseguido, mi proyecto de tesis.

Quiero agradecerles por todo, no me alcanzan las palabras para expresar el orgullo y lo bien que me siento por tener una familia tan asombrosa.

AGRADECIMIENTOS

A Dios y a la Virgen Dolorosa, por bendecirme siempre.

A Edison Bonifaz, director de Tesis, por el apoyo incondicional y su invaluable ayuda mostrados durante la realización de este proyecto.

A mis padres, Oscar y Marlene, por toda la ayuda y el apoyo en cada etapa de mi vida.

A mi hermano, Esteban, por su cariño y comprensión.

A Alfredo Valarezo, director del Departamento de Ingeniería Mecánica, y a todos los profesores del Departamento por los conocimientos impartidos.

A todas las personas que ayudaron de manera directa o indirecta en la culminación de este proyecto de investigación, su ayuda y apoyo fueron pieza clave en este logro.

RESUMEN

Inspirado por nanotubos, un modelo de elementos finitos 3D fue desarrollado para simular la influencia de inclusiones cilíndricas en el comportamiento mecánico de policristalino de super-aleaciones de Níquel. El modelo construido en base al modelo de endurecimiento por deformación basado en dislocaciones se utiliza para determinar la influencia de los constituyentes microestructurales (tamaño, morfología y distribución de inclusión) sobre la distribución esfuerzo-deformación inelástica. Elementos de volumen representativos (RVEs) con mallas de diferente tamaño de arista y morfología fueron ensayados para investigar la relación esfuerzo-deformación en las escalas macro y micro. Las muestras virtuales limitadas con apropiadas condiciones de contorno fueron sometidas a carga uniaxial continua. La diferencia en la orientación cristalográfica (que evoluciona en el proceso de deformación) y la incompatibilidad de la deformación entre los granos vecinos se representó con la introducción de factores Taylor promediados, módulos de elasticidad para distintos cristales y la evolución de densidad de dislocaciones geoméricamente necesarias. La contribución individual de cristales orientados ([111], [110], [100]) distribuidos aleatoriamente en los RVEs, fue detectada por la correspondiente malla de elementos finitos del compuesto. Los efectos del diámetro de grano de la matriz y la distribución de las inclusiones en ésta se observan claramente. Los resultados demuestran una fuerte dependencia del esfuerzo de fluencia y de la deformación plástica con módulo elástico y límite elástico de cada fase. Se presenta una estrategia para la modelización constitutiva de granos de fase individuales. Se analizó la influencia del tamaño de grano de la matriz en la respuesta global, en términos de variaciones de tensión locales y módulos elásticos. Se observó que el módulo de elasticidad en el material compuesto no depende del tamaño de grano de la matriz.

Palabras clave: Dislocaciones geoméricamente necesarias, elementos de volumen representativos, comportamiento constitutivo, sistemas de deslizamiento, elementos finitos.

ABSTRACT

Inspired by nanotubes, a 3D finite element model was developed to simulate the influence of cylindrical inclusions in polycrystalline mechanical behavior of Nickel super alloys. The proposed model constructed in the basis of the dislocation based strain hardening model is used to determine the influence of microstructure attributes (size, morphology and distribution of inclusion) on the inelastic stress-strain distribution. Affordable computational representative Volume Elements (RVEs) with meshes of different edge size and morphology were tested to investigate the link between micro and macro variables of deformation and stress. The virtual specimens subjected to continuous monotonic straining loading conditions were constrained with boundary conditions. The difference in crystallographic orientation (which evolves in the process of straining) and the incompatibility of deformation between neighboring grains were accounted by the introduction of averaged Taylor factors, single crystals elastic modulus and the evolution of geometrically necessary dislocation density. The individual contribution of single oriented crystals ([111], [110], [100]) distributed in a randomly manner into the RVEs, was captured by the corresponding composite finite element mesh. The effects of the matrix grain size and distribution of inclusion are clearly observed. Results demonstrate a strong dependence of flow stress and plastic strain on phase type, elastic limit and single crystals elastic modulus. A main strategy for constitutive modeling of individual bulk grains is presented. The influence of the grain of the matrix size on the aggregate response, in terms of local stress variations and aggregate elastic moduli was analyzed. It was observed that the elastic modulus in the bulk material is not dependent on grain size of the matrix.

Keywords: Geometrically necessary dislocations, representative volume elements, constitutive behavior, slip systems, finite elements.

TABLA DE CONTENIDOS

INTRODUCCIÓN	15
Antecedentes	15
Justificación del proyecto	16
Objetivos	16
MARCO TEÓRICO	18
Estructura de los Materiales	18
Super-aleaciones de Níquel	20
Deslizamiento cristalino	21
Sistemas de deslizamientos: direcciones y deslizamientos normales	21
Esfuerzo de cizalladura resuelto crítico	23
Factor de Taylor	24
Modelo de endurecimiento basado en dislocaciones	24
Procesamiento de los Materiales	26
Esfuerzo y deformación	27
CREACIÓN DEL MODELO EN DREAM3D.....	29
Stats Generator	29
Read DREAM3D Data File	32
Initialize Synthetic Volume	33
Establish Shape Types	34
Establish Matrix Phase	35

	10
Find Feature Neighbors	36
Insert Precipitate Phases	37
Write DREAM3D Data File	38
Abaqus Hexaedron Writer	39
MODELO CONSTITUTIVO	41
PREPARACIÓN DE LOS ARCHIVOS PARA ABAQUS.....	43
Condiciones de borde utilizando MATLAB.....	44
MODELO EN ABAQUS	52
Microestructuras creadas para la simulación	52
Tipo de elemento utilizado	53
Condiciones de borde y de desplazamiento	53
RESULTADOS Y DISCUSIONES.....	56
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	69
Conclusiones	69
Recomendaciones	70
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	71
ANEXO A: UNIÓN DE LOS ARCHIVOS GENERADOS POR DREAM3D.....	73
ANEXO B: ARCHIVO GENERAL	74

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1. SOLIDIFICACIÓN DE UN MATERIAL POLICRISTALINO, TOMADA DE (CALLISTER & RETHWISHC, 2009).....	19
FIGURA 2. BORDES DE GRANO, TOMADA DE (CALLISTER & RETHWISHC, 2009)	20
FIGURA 3. COMPOSICIÓN QUÍMICA DE UNA SUPER-ALEACIÓN DE NÍQUEL. PRECIPITADOS γ' CON FORMA (A) CÚBICA Y (B) ESFÉRICA.	21
FIGURA 4. SISTEMA DE DESLIZAMIENTO (111)[110] EN UNA ESTRUCTURA FCC, TOMADA DE (DUNNE & PETRINIC, 2005)	22
FIGURA 5. SISTEMAS DE DESLIZAMIENTO EN UNA ESTRUCTURA BCC, TOMADA DE (DUNNE & PETRINIC, 2005).....	22
FIGURA 6. DIRECCIONES [111], [100] Y [110] EN UNA CELDA, TOMADA DE (CALLISTER & RETHWISHC, 2009)	23
FIGURA 7. MONO-CRISTAL CON UN PLANO Y DIRECCIÓN DE DESLIZAMIENTO, TOMADO DE (DUNNE & PETRINIC, 2005)	23
FIGURA 8. LOS CUATRO COMPONENTES DE LA DISCIPLINA DE CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES Y SU RELACIÓN LINEAL.....	26
FIGURA 9. PROBETA SOMETIDA A UN ENSAYO DE TENSIÓN, TOMADA DE (CALLISTER & RETHWISHC, 2009)	28
FIGURA 10. COMPARACIÓN ENTRE LAS CURVAS DE ESFUERZO-DEFORMACIÓN INGENIERIL, REAL Y CORREGIDO, TOMADA DE (CALLISTER & RETHWISHC, 2009).....	28
FIGURA 11. PROPIEDADES DE LA FASE PRIMARIA.....	30
FIGURA 12. PROPIEDADES DEL PRECIPITADO	31
FIGURA 13. VENTANA READ DREAM3D DATA FILE	32
FIGURA 14. VENTANA INITIALIZE SYNTHETIC VOLUME.....	33
FIGURA 15. VENTANA ESTABLISH SHAPE TYPES.....	34
FIGURA 16. VENTANA FIND FEATURE NEIGHBORS	35
FIGURA 17. VENTANA FIND FEATURE NEIGHBORS	36
FIGURA 18. VENTANA INSERT PRECIPITATE PHASES.....	37
FIGURA 19. VENTANA WRITE DREAM3D DATA FILE.....	38
FIGURA 20. VENTANA ABAQUS HEXAEDRON WRITER	39
FIGURA 21. CORRIDA DEL PROGRAMA.....	40
FIGURA 22. COMPORTAMIENTO MECÁNICO DE LAS FASES MATRIZ (SUAVE) Y PRECIPITADO (DURA).....	41
FIGURA 23. ARCHIVOS PARA IMPORTACIÓN EN ABAQUS	43
FIGURA 24. ARCHIVO MATLAB PARA CREACIÓN DE CONDICIONES DE BORDE	44
FIGURA 25. COPIA DE LA INFORMACIÓN DE LOS NODOS Y SUS COORDENADAS.....	44

FIGURA 26. MANIPULACIÓN DE LA INFORMACIÓN EN EXCEL	45
FIGURA 27. PRIMERA VENTANA EMERGENTE "TEXT TO COLUMNS"	45
FIGURA 28. SEGUNDA VENTANA EMERGENTE "TEXT TO COLUMNS"	46
FIGURA 29. TERCERA VENTANA EMERGENTE "TEXT TO COLUMNS"	46
FIGURA 30. DATOS TRAS SER TRANSFORMADOS A COLUMNAS.....	47
FIGURA 31. NOMBRES DE CADA COLUMNA PARA LA IMPORTACIÓN EN MATLAB	47
FIGURA 32. ARCHIVOS CREADOS CON MATLAB.....	48
FIGURA 33. CAMBIOS FINALES EN EL ARCHIVO CREADO POR MATLAB.....	48
FIGURA 34. MICROESTRUCTURA DE 33 MICRAS DE LONGITUD DE ARISTA l_0	52
FIGURA 35. MICROESTRUCTURA DE 50 MICRAS DE LONGITUD DE ARISTA l_0	53
FIGURA 36. REPRESENTACIÓN DEL ELEMENTO C3D8	53
FIGURA 37. USO DEL COMANDO *EQUATION EN LA SIMULACIÓN	54
FIGURA 38. DIRECCIÓN DE LAS CARAS QUE SE DESPLAZAN DE ACUERDO AL TIPO DE DESPLAZAMIENTO .	55
FIGURA 39. CONDICIONES DE BORDE	55
FIGURA 40. CURVAS ESFUERZO-DEFORMACIÓN PARA UNA MICROESTRUCTRA VIRTUAL DE 50 MICRAS DE ARISTA CON DISTRIBUCIÓN 1 SOMETIDA A CARGA PARALELA A LA ORIENTACIÓN DE LOS PRECIPITADOS.....	57
FIGURA 41. CURVAS ESFUERZO-DEFORMACIÓN PARA UN ELEMENTO FINITO SELECCIONADO DE UN GRUPO PERTENECIENTE A LA DIRECCIÓN [111] PARA LOS DOS TAMAÑOS DE CUBOS EN SUS DOS CONDICIONES DE CARGA Y SU DISTRIBUCIÓN 1.....	58
FIGURA 42. CURVAS ESFUERZO-DEFORMACIÓN PARA UN ELEMENTO FINITO SELECCIONADO DE UN GRUPO PERTENECIENTE A LA DIRECCIÓN [110] PARA LOS DOS TAMAÑOS DE CUBOS EN SUS DOS CONDICIONES DE CARGA Y SU DISTRIBUCIÓN 1.....	59
FIGURA 43. CURVAS ESFUERZO-DEFORMACIÓN PARA UN ELEMENTO FINITO SELECCIONADO DE UN GRUPO PERTENECIENTE A LA DIRECCIÓN [100] PARA LOS DOS TAMAÑOS DE CUBOS EN SUS DOS CONDICIONES DE CARGA Y SU DISTRIBUCIÓN 1.....	60
FIGURA 44. CURVAS ESFUERZO-DEFORMACIÓN PARA UN ELEMENTO FINITO SELECCIONADO DE UN GRUPO PERTENECIENTE A LA MATRIZ PARA LOS DOS TAMAÑOS DE CUBOS EN SUS DOS CONDICIONES DE CARGA Y SU DISTRIBUCIÓN 1.....	61
FIGURA 45. CURVAS ESFUERZO-DEFORMACIÓN PARA EL COMPUESTO ENSAYADO CON CARGA PARALELA A LA ORIENTACIÓN DE LOS PRECIPITADOS.....	62
FIGURA 46. CURVAS ESFUERZO-DEFORMACIÓN PARA EL COMPUESTO ENSAYADO CON CARGA PERPENDICULAR A LA ORIENTACIÓN DE LOS PRECIPITADOS.....	63
FIGURA 47. CONTORNOS DE ESFUERZO DE VON MISES PARA LA MICROESTRUCTURA DE 33 MICRAS DE ARISTA CON CARGA PARALELA Y PERPENDICULAR A LOS PRECIPITADOS.....	64

FIGURA 48. CONTORNO DE ESFUERZO DE VON MISSES PARA LA MICROESTRUCTURA DE 50 MICRAS DE ARISTA CON CARGA PARALELA Y PERPENDICULAR A LOS PRECIPITADOS.....	65
FIGURA 49. CONTORNOS DE DEFORMACIÓN EQUIVALENTE (PEEQ) PARA LA MICROESTRUCTURA DE 33 MICRAS DE ARISTA CON CARGA PARALELA Y PERPENDICULAR A LOS PRECIPITADOS.....	66
FIGURA 50. CONTORNOS DE DEFORMACIÓN EQUIVALENTE (PEEQ) PARA LA MICROESTRUCTURA DE 50 MICRAS DE ARISTA CON CARGA PARALELA Y PERPENDICULAR A LOS PRECIPITADOS.....	67

LISTA DE TABLAS

TABLA 1. VALORES DE CONSTANTES Y PARÁMETROS UTILIZADOS CON EL MODELO CONSTITUTIVO	42
TABLA 2. POSICIÓN DE LAS CARAS EN EL CUBO	51

INTRODUCCIÓN

Antecedentes

Actualmente, el desarrollo de nuevos materiales es de vital importancia para la mayoría de aplicaciones ingenieriles. Siempre se ha buscado optimizar las propiedades mecánicas de los elementos producidos y por ende el desempeño de los mismos, por lo que existen distintos procesos de mejora de propiedades tales como tratamientos térmicos y recubrimientos superficiales, procesos de deformación plástica y cambio de composición química, que ayudan a alcanzar las propiedades deseadas. Otra manera de alcanzar estos objetivos es la manipulación de la microestructura del material que tiene una relación directa con las propiedades mecánicas del mismo. Es por esto que es transcendental tener un pleno conocimiento tanto de los factores externos a los que este material será expuesto, así como el completo entendimiento de su microestructura.

Los materiales policristalinos son usados en su mayoría en aplicaciones de ingeniería. Se han realizado diferentes estudios para entender el comportamiento de la microestructura de estos materiales. Benedetti (Benedetti & Barbe, 2014) muestra la importancia del estudio de la microestructura tanto a nivel bidimensional (2D) como a nivel tridimensional (3D). Esto gracias al desarrollo de aplicaciones que pueden representar y simular realmente el comportamiento usando todo el potencial computacional existente actualmente. Cailletau (Cailletaud, y otros, 2003) muestra la importancia de la simulación computacional para predecir la influencia de la morfología de las fases teniendo como meta final la optimización de la microestructura. Simonovski (Simonovski & Clzelj, 2012) muestra la importancia de la microestructura de los precipitados en los materiales policristalinos y cómo esto afecta a la evolución de fallas y fatiga.

El propósito del presente proyecto de investigación es crear cuatro tipos de microestructuras en DREAM3D, dos de 33 micras de longitud de arista y dos de 50 micras de longitud de arista en las que se varía la distribución del precipitado en la matriz manteniendo constante la fracción volumétrica. El precipitado de forma cilíndrica es distribuido convenientemente en una matriz elipsoidal. Las microestructuras creadas son

sometidas a un análisis elasto-plástico mediante el código de elementos finitos en ABAQUS para determinar la configuración óptima. Se pretende, por lo tanto, mediante esta técnica, crear una base sólida en el diseño de nuevos materiales.

Justificación del proyecto

A pesar del tremendo progreso que se ha hecho en la disciplina de Ciencia e Ingeniería de materiales, existen todavía desafíos tecnológicos, incluyendo el desarrollo de nuevos y sofisticados materiales, así como la consideración del impacto ambiental en su producción (Callister & Rethwishc, 2009).

Diseñar nuevos materiales que puedan sobrellevar grandes niveles de cargas térmicas y mecánicas (estáticas y dinámicas) sin llegar a fallar, es realmente un gran reto de ingeniería. Gracias a códigos computacionales como DREAM3D (Groeber & Jackson, 2014) se pueden crear microestructuras virtuales representativas del material a ser ensayado principalmente a tracción.

El análisis tridimensional del comportamiento esfuerzo-deformación es algo muy importante, ya que la realidad física es tridimensional. Los elementos de volumen representativos RVEs usados son por lo tanto los que mejor se aproximan a la microestructura real y es así entonces que fueron seleccionados para las simulaciones utilizando el método de los elementos finitos.

El entendimiento de cómo los constituyentes microestructurales de un elemento tales como tamaño de grano, morfología, o la distribución de los precipitados en la matriz, pueden llegar a influenciar las propiedades y el desempeño del mismo, es de suma importancia. Además, puede servir como punto de partida para analizar los cambios que se podrían realizar en materiales ya existentes con el fin de mejorar alguna propiedad en específico.

Objetivos

El objetivo general del proyecto es el análisis elasto-plástico de microestructuras multifásicas policristalinas utilizando los softwares DREAM3D y ABAQUS.

Los objetivos específicos del proyecto son:

- Obtener una clara identificación de los granos que conforman cada fase de la microestructura, para poder asignar propiedades específicas a cada uno de ellos.
- Determinar de una manera apropiada los elementos que componen cada grano.
- Identificar las coordenadas de cada nodo, para encontrar los que pertenecen a las caras que necesitan tener condiciones de borde específicas para la simulación en ABAQUS.
- Utilizar el modelo de endurecimiento basado en dislocaciones para asignar las propiedades a cada fase de la microestructura.
- Comparar la influencia de la microestructura en las propiedades mecánicas.
- Aplicación de los códigos DREAM3D, MATLAB Y ABAQUS en la simulación del comportamiento mecánico de super-aleaciones de Níquel.

MARCO TEÓRICO

Estructura de los Materiales

La estructura de un material se refiere al arreglo de sus componentes internos. Esta estructura está caracterizada de manera distinta en diferentes niveles. La estructura subatómica se refiere a los electrones de cada átomo y las interacciones de estos con el núcleo. En el nivel atómico, se estudia las interacciones de átomos y moléculas en relación a sus semejantes (Callister & Rethwishc, 2009). La microestructura está representada por el número de fases presentes, las proporciones de cada una de ellas, y la manera en que estas se encuentran repartidas.

Un material cristalino es aquel en el que los átomos están situados en un arreglo repetitivo en grandes distancias atómicas. La unión de varios de estos mini cristales forma los granos, los cuales van a poseer propiedades específicas y diferentes de los granos que los rodean. Un material policristalino es aquel que está formado por varios cristales o granos. Un ejemplo de la solidificación de un material policristalino se muestra en la Figura 1.

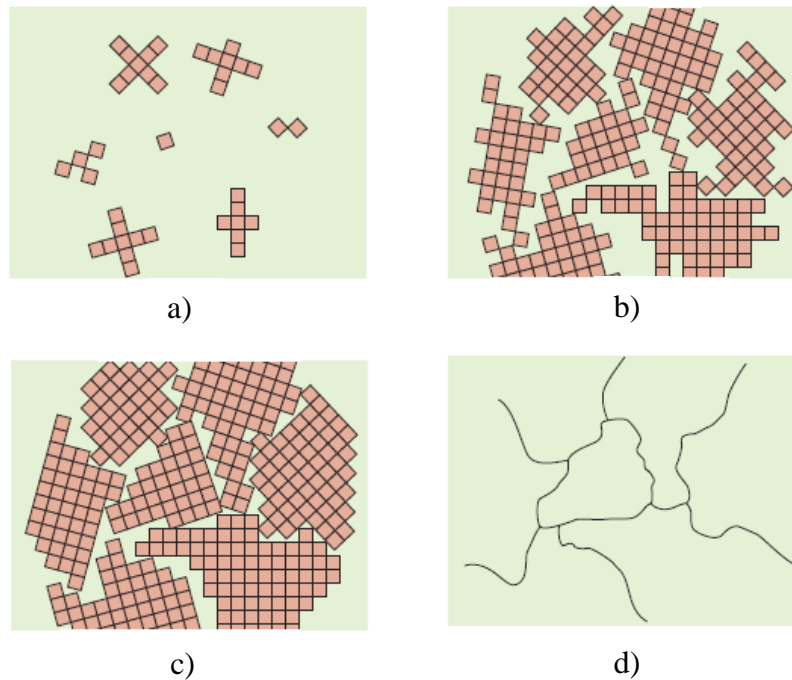


Figura 1. Solidificación de un material policristalino, tomada de (Callister & Rethwischc, 2009)

Tal como se muestra en la Figura 1 a), al comenzar la solidificación, los primeros cristales se forman aislados del resto. Después, mostrado en la Figura 1 b), estos cristales comienzan a crecer con diferentes orientaciones. Cuando el crecimiento de estos cristales se obstruye por otro, se crean los bordes de grano, como se observa en la Figura 1 c). Por último, en la Figura 1 d), se presenta la estructura tal como se vería al microscopio donde las líneas representan los bordes de grano que son defectos interfaciales separan dos granos con diferente dirección cristalográfica y donde existe desajuste atómico (Callister & Rethwishc, 2009). Un esquema de los bordes de grano se indica en la Figura 2.

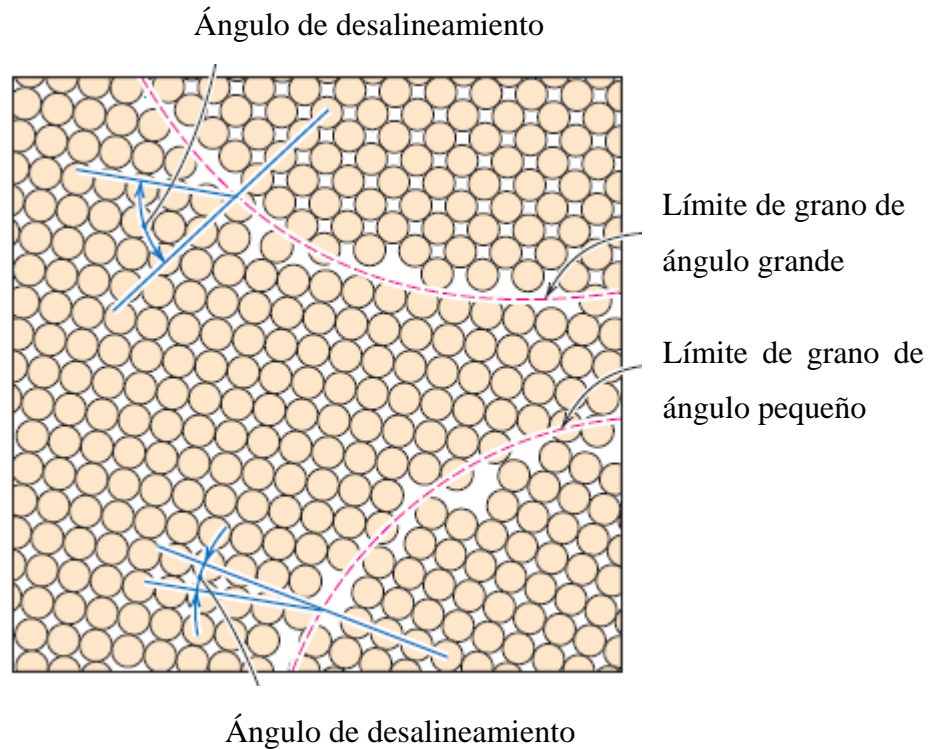


Figura 2. Bordes de grano, tomada de (Callister & Rethwisch, 2009)

Los bordes de grano cumplen un papel importante en la asignación de propiedades de un material, ya que existe una relación directa entre el número de bordes de grano y la dureza del material. Por otra parte, la unión de varios granos similares crea una fase, que es una porción homogénea de un sistema que tiene sus particulares propiedades físicas y químicas. Cuando dos fases están presentes, como en el caso de este proyecto de investigación, existe también un borde de fase en el que se presenta un cambio abrupto de las propiedades físicas y químicas.

Super-aleaciones de Níquel

Las super-aleaciones de Níquel son usadas por su gran resistencia a la tensión y a la corrosión en altas temperaturas. Una muestra la composición química de una microestructura de este tipo de aleaciones se muestra en la Figura 3. El precipitado γ' puede adquirir distinta formas entre las que se encuentran esferas, cubos o formas alargadas.

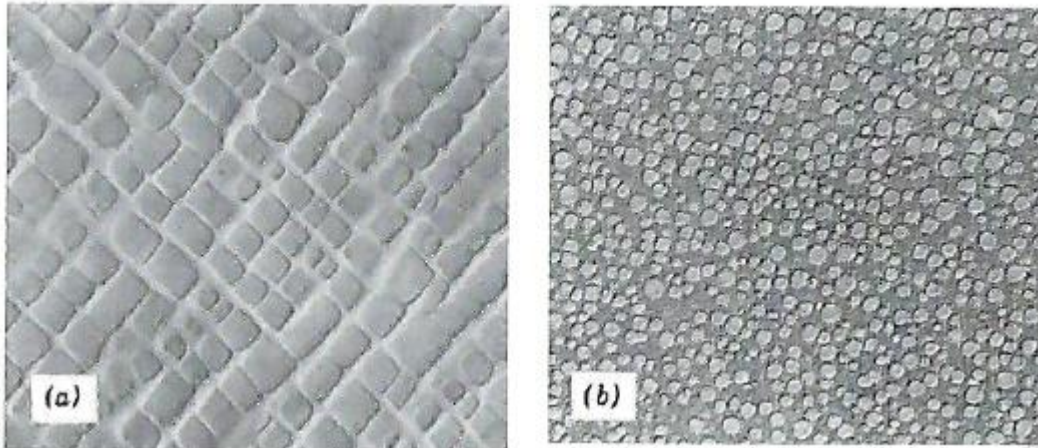


Figura 3. Composición química de una super-aleación de Níquel. Precipitados γ' con forma (a) cúbica y (b) esférica.

En la Figura 3 se muestran los precipitados en la matriz de una super-aleación de Níquel. Este tipo de inclusiones es lo que se reproduce en este proyecto de investigación para probar cómo influye en la respuesta mecánica de este compuesto.

Deslizamiento cristalino

La evidencia de deslizamiento cristalino siendo el origen de la plasticidad viene de los ensayos mecánicos realizados a metales con mono-cristales (Dunne & Petrinic, 2005). El deslizamiento ocurre cuando muchas dislocaciones atraviesan el cuerpo del cristal y llegan a los bordes del mismo.

Sistemas de deslizamientos: direcciones y deslizamientos normales

El deslizamiento tiende a ocurrir en un plano preferencial y en una dirección cristalina específica. La combinación de un plano y dirección de deslizamiento se considera un sistema de deslizamiento. Dichos planos tienden a ser los más compactos, y las direcciones en las que los átomos están distribuidos de manera más cercana.

Para una estructura FCC los planos más densos son los planos diagonales a la celdilla unidad. Existen 12 sistemas de deslizamiento en este tipo de estructura, cuatro planos cada uno con tres direcciones (Dunne & Petrinic, 2005). Esto es mostrado en la Figura 4.

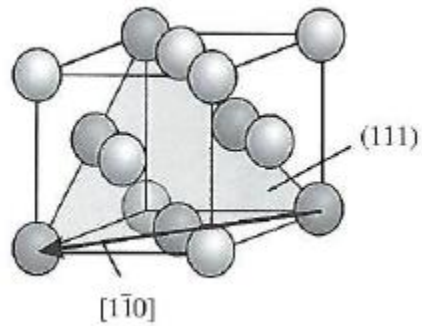


Figura 4. Sistema de deslizamiento $(111)[1\bar{1}0]$ en una estructura FCC, tomada de (Dunne & Petrinic, 2005)

De igual manera, para una estructura BCC, existen distintos planos que tienen una densidad similar y por lo tanto existen distintas familias de planos en la que el deslizamiento ocurre. En la Figura 5 se muestran los sistemas de deslizamiento de esta estructura.

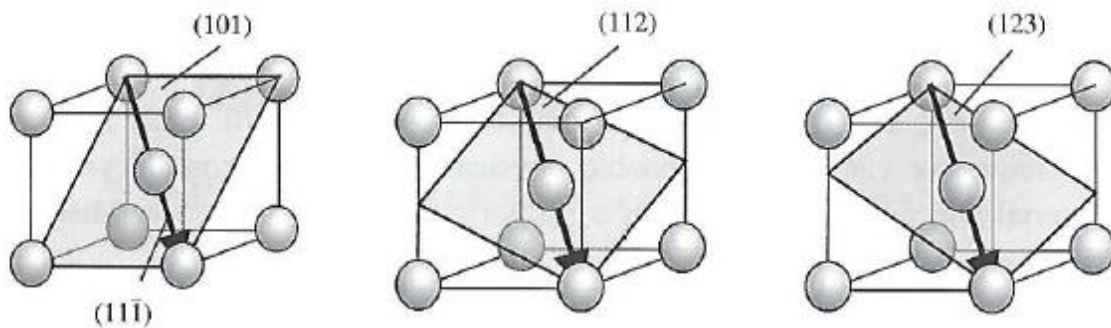


Figura 5. Sistemas de deslizamiento en una estructura BCC, tomada de (Dunne & Petrinic, 2005)

Las direcciones cristalográficas analizadas en este proyecto de investigación se muestran en la Figura 6.

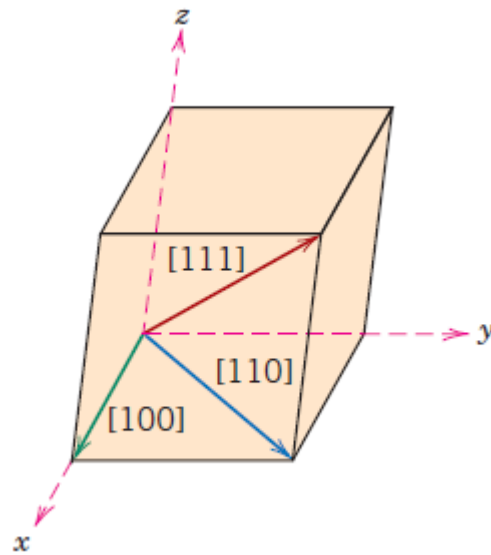


Figura 6. Direcciones [111], [100] y [110] en una celda, tomada de (Callister & Rethwisch, 2009)

Esfuerzo de cizalladura resuelto crítico

Para la explicación de este concepto se supone que un mono-cristal es puesto en tensión y está basado en la Figura 7.

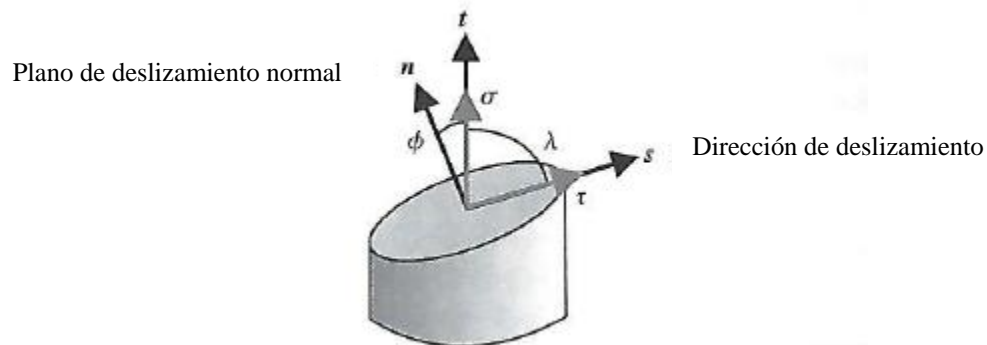


Figura 7. Mono-cristal con un plano y dirección de deslizamiento, tomado de (Dunne & Petrinic, 2005)

Tal como se muestra en la Figura 7, el eje de la muestra es paralelo al vector unitario t . El cristal además tiene un plano de deslizamiento activo, normal a la dirección del vector unitario n . Además posee también una dirección de deslizamiento activa paralela a la

dirección del vector unitario s . Cuando se aplica un esfuerzo de tracción, se produce un esfuerzo cortante el cual es calculado con la ecuación (1).

$$\tau = \sigma \cos \phi \cos \lambda \quad (1)$$

El deslizamiento va a ocurrir cuando el cristal fluya, y en este caso, el esfuerzo cortante τ toma el nombre de esfuerzo de cizalladura resuelto crítico τ_{crss} .

Factor de Taylor

El esfuerzo de fluencia puede variar entre muestras del mismo material debido principalmente a la relación que existe entre la red cristalina y el eje de la carga aplicada. El esfuerzo aplicado se descompone en la dirección de desplazamiento en el plano de desplazamiento lo que produce un esfuerzo cortante que inicia la deformación plástica (Bonifaz E. , 2015). Es por esta razón que se utiliza el factor de Taylor M , dado por la ecuación (2), para simular la condición policristalina de un material.

$$M = \frac{\sigma}{\tau_{crss}} \quad (2)$$

Donde σ es el esfuerzo macroscópico aplicado y τ_{crss} es el esfuerzo de cizalladura resuelto crítico que representa el mínimo esfuerzo necesario para iniciar el deslizamiento y es una propiedad del material que determina cuándo empieza la fluencia (Callister & Rethwischc, 2009).

Modelo de endurecimiento basado en dislocaciones

La diferencia en la orientación cristalográfica y la incompatibilidad de deformación que existe entre distintos granos puede ser modelada con el uso del factor de Taylor y el incremento de la densidad de dislocaciones geoméricamente necesarias.

Al imponer distintos factores de Taylor, uno distinto para cada fase, se puede simular diferente orientación cristalográfica por lo que cada fase empezará a fluir indistintamente de los demás, brindado así un modelo más real para este proyecto de investigación.

Además, el uso del concepto de densidad de dislocaciones en la representación de la microestructura del material brinda un modelo con un mínimo de parámetros que varían para reproducir el comportamiento de un material. La densidad total de dislocación ρ^T es definida como la suma de densidades geoméricamente necesarias ρ^G y dislocaciones estadísticamente almacenadas ρ^S (Ashby, 1970). Las densidades geoméricamente necesarias son puestas en el modelo para ajustar la incompatibilidad de la deformación entre granos adyacentes.

Fue comprobado por Ashby (Ashby, 1970) que el número de dislocaciones geoméricamente necesarias está representado por la ecuación (3).

$$\rho^G = \frac{\bar{\epsilon}}{4bd} \quad (3)$$

Donde $\bar{\epsilon}$ es la deformación equivalente, b es la magnitud del vector de Burgers y d es el diámetro de grano.

De igual manera se sabe que ρ^S puede ser calculado de la ecuación (4) por la investigación llevada a cabo por Bonifaz (Bonifaz E. , 2015).

$$\rho^S = \left[\frac{K_1}{K_2} \left(1 - e^{-\frac{MK_2\bar{\epsilon}}{2}} \right) + \rho^0 e^{-\frac{MK_2\bar{\epsilon}}{2}} \right]^2 \quad (4)$$

Donde K_1 y K_2 son constantes. Más información acerca de estos parámetros fue publicada por Acharya y Beaudoin (Acharya & Beaudoin, 2000), Estrin (Estrin, Dislocation theory based constitutive modelling: foundations and applications, 1998), Narutany y Takamura (Narutany & Takamura, 1991), Buessler (Buessler) y Bonifaz (Bonifaz A. E., 2000).

Ashby (Ashby, 1970) demostró que el esfuerzo de fluencia en materiales policristalinos puede ser modelado por la ecuación (5).

$$\sigma = \sigma_0 + M\alpha Gb\sqrt{\rho^T} \quad (5)$$

Donde σ_0 es el límite elástico, M es el factor de Taylor, α es una constante con un valor de 0.3, G es el esfuerzo cortante del material, y b es la magnitud del vector de Burgers.

La ecuación (5) está respaldada por la observación experimental llevada a cabo por Dingley y McLean (Dingley & McLean, 1967), Meakin y Petch (Meakin & Petch, 1974), Mecking y Kocks (Mecking & Kocks, 1981), Estrin y Mecking (Estrin & Mecking, A unified phenomenological description of work hardening and creep based on, 1984), Bonifaz (Bonifaz A. E., 2000) y Achayra y Beaudoin (Achayra & Beaudoin, 2000).

De esta manera el modelo de endurecimiento basado en dislocaciones puede ser resumido por las ecuaciones (3), (4) y (5).

Procesamiento de los Materiales

En el procesamiento de nuevos materiales existe una relación muy importante la cual se muestra en la Figura 8.

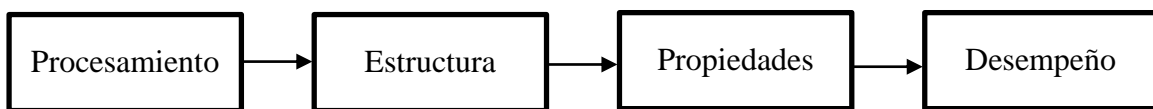


Figura 8. Los cuatro componentes de la disciplina de Ciencia e Ingeniería de materiales y su relación lineal

En esta relación se puede observar cómo el procesamiento de materiales es el primer paso que conlleva a la creación de la microestructura. Para construir un producto final de buena calidad es sumamente importante tener la materia prima correcta. Esta materia prima, sin embargo, no siempre viene en la forma o cantidad que el proceso requiere, y es aquí donde el primero de estos pasos tiene gran influencia. Después, mediante el procesamiento de esta materia prima se crea el material con una microestructura específica que influenciará las propiedades del material. Cuando se elige un material para una aplicación específica es muy importante conocer las condiciones de operación y/o trabajo para asegurar que las propiedades dictadas por la microestructura sean capaces de soportar estas cargas de manera segura. Es así que el último paso de esta relación, el desempeño, cobra vital importancia. Al finalizar todos los pasos anteriores, se evalúa al material para concluir si puede o no soportar las cargas a las que será sometido en su aplicación específica.

El diseño, en cualquier ámbito, es un proceso iterativo que requiere de muchas fases y pruebas (Budynas & Nisbett). Es por esta razón que con la capacidad computacional actual, se facilita mucho este proceso ya que pueden simularse diversos escenarios y comparar la respuesta de un material antes distintos estímulos. Esto ahorra mucho dinero y tiempo al momento de diseñar nuevos materiales ya que únicamente después de varias pruebas digitales se invierte recursos en realizar pruebas físicas para corroborar estos datos.

Esfuerzo y deformación

En la mecánica de materiales se estudia cómo los materiales reaccionan a estímulos externos de diferente tipo.

Algunas de las propiedades más importantes de los materiales en la ingeniería mecánica son el esfuerzo y la deformación. El tipo de carga aplicada en este proyecto de investigación es el esfuerzo normal verdadero, que se define como la fuerza por unidad de área instantánea, y está dado por la ecuación (6).

$$\sigma = \frac{F}{A} \quad (6)$$

Donde F es la fuerza transversal al área instantánea A del elemento, dada por la ecuación (7).

$$A = A_0 e^{-\varepsilon} \quad (7)$$

Aquí, A_0 es el área inicial, mostrada en la Figura 9, y ε es la deformación real dada por la ecuación (8).

$$\varepsilon = \ln \frac{l_0 + u_i}{l_0} \quad (8)$$

Donde l_0 es la longitud inicial, mostrada en la Figura 9, y u_i es el desplazamiento instantáneo.

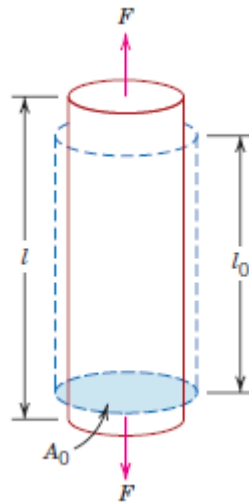


Figura 9. Probeta sometida a un ensayo de tensión, tomada de (Callister & Rethwisch, 2009)

La Figura 10 muestra el diagrama esfuerzo-deformación, con curvas ingenieril, real y corregida a modo de comparación.

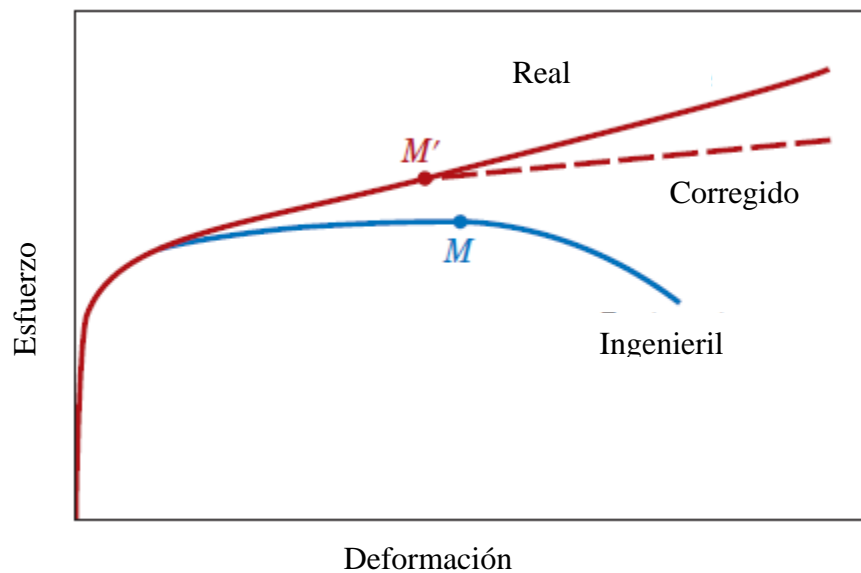


Figura 10. Comparación entre las curvas de esfuerzo-deformación ingenieril, real y corregido, tomada de (Callister & Rethwisch, 2009)

CREACIÓN DEL MODELO EN DREAM3D

La nueva microestructura es creada con el software DREAM3D. Este es un software modular con el que se puede reconstruir, cuantificar, crear mallados, manejar y visualizar microestructuras digitalmente. Toda esta información está basada en el *User Manual* del programa DREAM3D (Groeber & Jackson, 2014), el mismo que usa los siguientes conceptos para definir el mallado:

- Vértice: Es un punto con dimensión 0.
- Borde: Es una curva con dimensión 1 que está delimitada por vértices.
- Cara: Es una superficie con dimensión 2 que está limitada por bordes.
- Volumen: Es un espacio con dimensión 3 que está delimitado por caras. En el programa también son llamados celdas.
- Feature: Es un grupo de elementos conformados por celdas contiguas o de iguales características.
- Arreglo: Es un grupo de elementos formados por features.

En las secciones siguientes se muestran los filtros que se deben usar y el orden en el que deben ser puestos para la creación de una microestructura con su mallado lista para ser importada a ABAQUS para posteriores análisis. Para las siguientes secciones, en el área de *Advanced Inputs* es necesario llenar cada una de las casillas de la manera mostrada en la Figura perteneciente a cada sección para que el programa pueda ser llevado a cabo sin errores.

Stats Generator

Con esta aplicación se da las propiedades a las fases que conformarán la nueva microestructura. Se tiene la opción de dar diferentes características a cada una de las fases presentes en aspectos tales como tamaño de grano, porcentaje presente en la celda, tipo de estructura cristalina, entre otros. En la Figura 11 y Figura 12 se presentan las propiedades dadas tanto a la fase primaria como al precipitado.

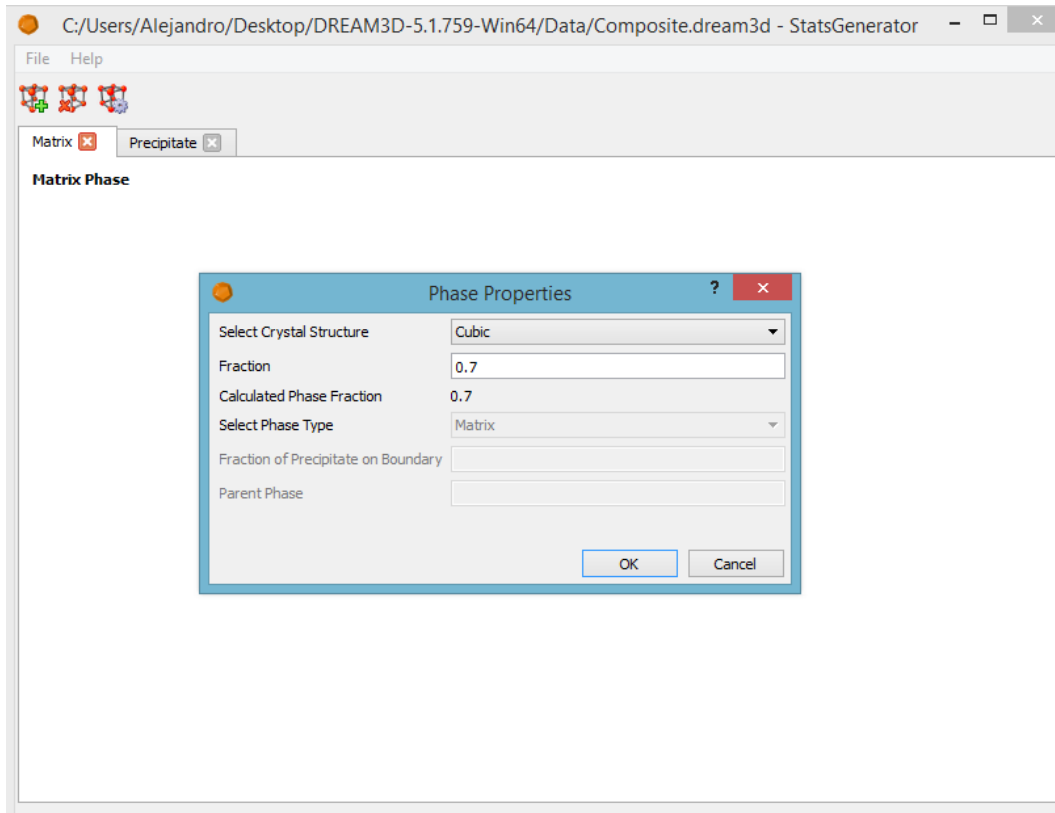


Figura 11. Propiedades de la Fase Primaria

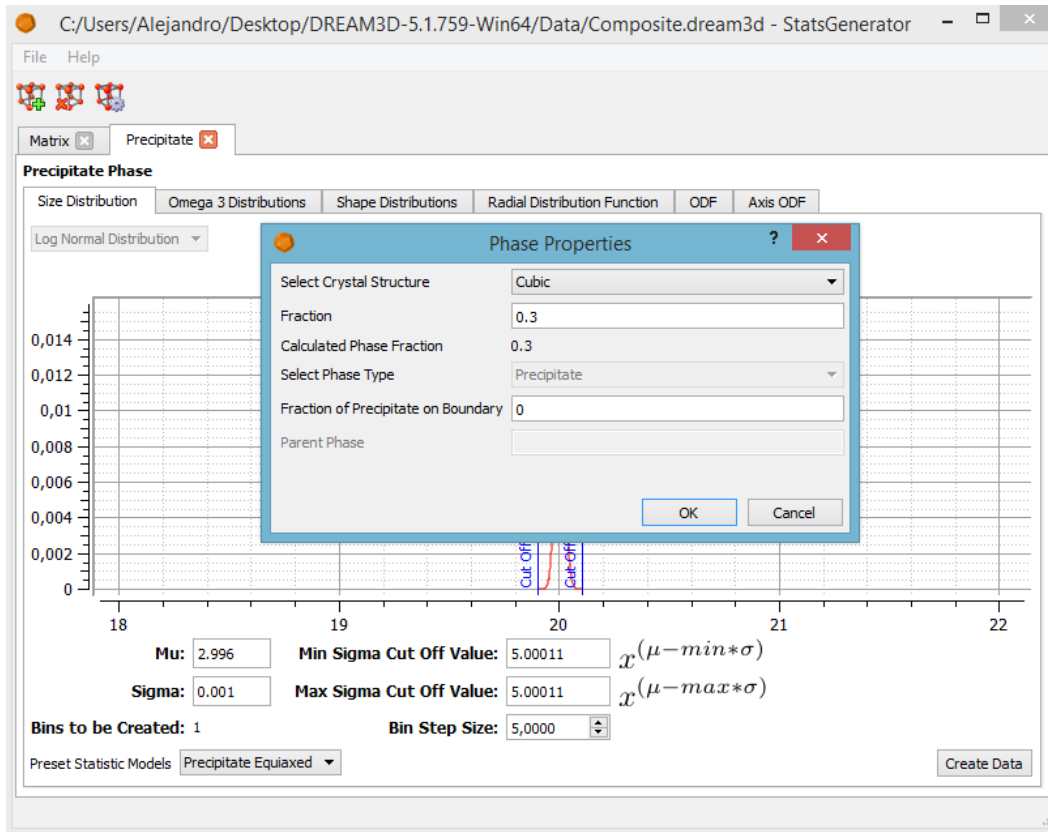


Figura 12. Propiedades del Precipitado

En base a la Figura 11 y Figura 12 se puede apreciar que la microestructura analizada tiene un 70% de matriz y 30% de precipitado en su estructura. Además, el precipitado tiene un diámetro de grano promedio de 16 micras el cuál se mantiene constante para todas las microestructuras creadas.

Read DREAM3D Data File

Read DREAM3D Data File


Basic Inputs

Overwrite Existing DataContainers

Select File... Data/Composite.dream3d

Select Arrays From Input File

StatsGeneratorDataContainer

 **Current Structure**

StatsGeneratorDataContainer

Figura 13. Ventana Read DREAM3D Data File

Con este filtro se selecciona el archivo base para la creación de la microestructura. Se selecciona la opción *StatsGeneratorDataContainer* ya que se necesita únicamente que la información creada por el *Stats Generator* sea cargada.

Initialize Synthetic Volume

Initialize Synthetic Volume

Basic Inputs


Dimensions (Voxels)

Resolution (Microns)

Origin (Microns)

Optional Information

Estimate Number of Features

 **Advanced Inputs**

Required Information


Input Statistics

Input Phase Types

Created Information

New DataContainer Name

New Cell Attribute Matrix Name

 **Current Structure**

StatsGeneratorDataContainer ▶

SyntheticVolumeDataContainer ▶

Figura 14. Ventana Initialize Synthetic Volume

Con este filtro se crea un volumen vacío y con las opciones de *Basic Inputs* se puede especificar el número de voxels, su espaciamiento en cada una de las direcciones y el punto en el que se localizará el origen de coordenadas. Para el caso de la microestructura mostrada tendrá 50 voxels en cada una de las direcciones ortogonales.


Establish Shape Types

Establish Shape Types

Basic Inputs


Shape Types

Phase 1:
Phase 2:

 **Advanced Inputs**

Required Information
Phase Types Array Name:

Created Information
Shape Types Array Name:

 **Current Structure**


StatsGeneratorDataContainer ▶ ^
SyntheticVolumeDataContainer ▶ v

Figura 15. Ventana Establish Shape Types

Con este filtro en el área de *Basic Inputs* se establece la morfología de las fases de la microestructura que está siendo creada. Se pueden elegir diferentes morfologías para cada una de las fases. Las morfologías elegidas para las matriz es siempre elipsoidal (*elipsoid*), y para el precipitado es cilíndrica (*cylinder*).

Establish Matrix Phase

Establish Matrix Phase

 **Advanced Inputs**

Required Information

Statistics Array: StatsGeneratorDataContainer | CellEnsembleData | Statistics

Phase Types Array: StatsGeneratorDataContainer | CellEnsembleData | PhaseTypes

Created Information

Cell Attribute Matrix Name: SyntheticVolumeDataContainer | CellData

Cell Feature Attribute Matrix Name: CellFeatureData


Cell Ensemble Attribute Matrix Name: CellEnsembleData

Feature Ids Array Name: FeatureIds

Cell Phases Array Name: Phases

Feature Phases Array Name: Phases

Number of Features Array Name: NumFeatures

 **Current Structure**

StatsGeneratorDataContainer


SyntheticVolumeDataContainer

Figura 16. Ventana Find Feature Neighbors

Con este filtro se asigna la forma para la matriz de la estructura sintética creada.

Find Feature Neighbors

Find Feature Neighbors

 **Advanced Inputs**

Required Information

Feature Ids Array Path: SyntheticVolumeDataContainer | CellData | FeatureIds

Cell Feature Attribute Matrix: SyntheticVolumeDataContainer | CellFeatureData

Created Information

Number Of Neighbors Array Name: NumNeighbors


Neighbor List Array Name: NeighborList

Neighbor Surface Area List Array Name: SharedSurfaceAreaList

Store Surface Cells Array:

Store Surface Features Array:

Surface Features Array Name: SurfaceFeatures

 **Current Structure**

StatsGeneratorDataContainer

SyntheticVolumeDataContainer

Figura 17. Ventana Find Feature Neighbors

Con este filtro se determina, para cada feature, el número de features que están en contactos con la principal.

Insert Precipitate Phases

Insert Precipitate Phases

Basic Inputs

Periodic Boundary

Match Radial Distribution Function

Already Have Precipitates

Write Goal Attributes

Goal Attribute CSV File

Advanced Inputs

Required Information

Statistics Array

Phase Types Array

Shape Types Array

FeatureIds

Cell Phases

BoundaryCells

FeaturePhases

NumFeatures

Created Information

Current Structure

StatsGeneratorDataContainer ▶ ^

SyntheticVolumeDataContainer ▶ v

Figura 18. Ventana Insert Precipitate Phases

Con este filtro en el área de *Basic Inputs* se inserta la fase con el precipitado en el volumen creado. Además, tiene la opción de crear un archivo (Goal attribute) el cual contiene información acerca de qué granos son los que están dentro de esta fase en particular.

Write DREAM3D Data File

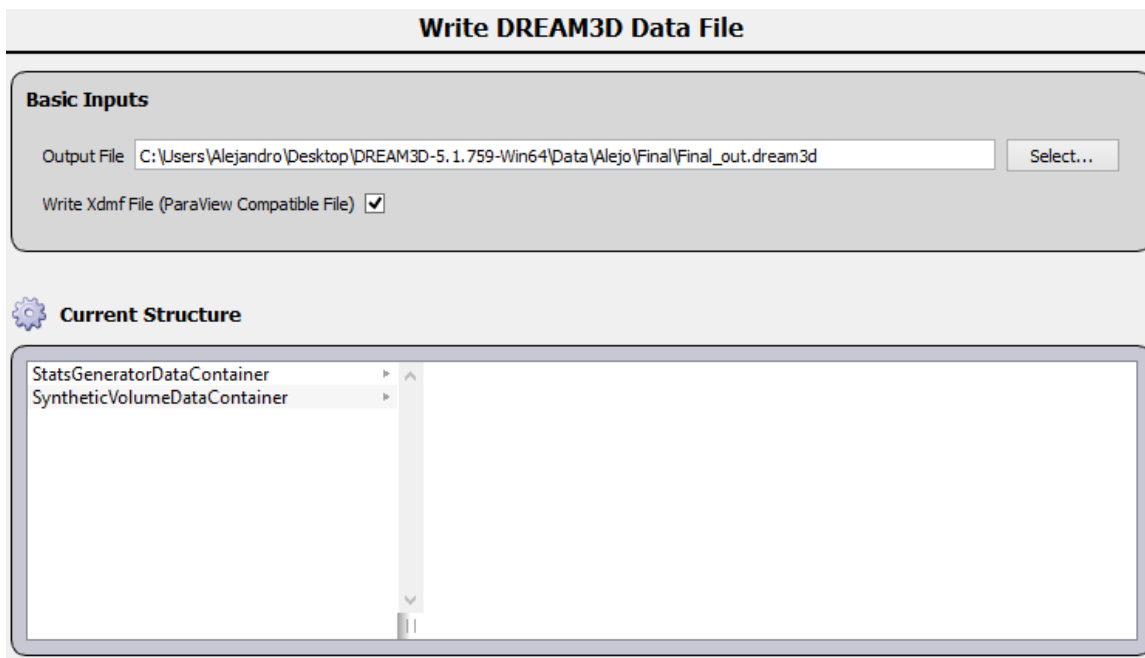
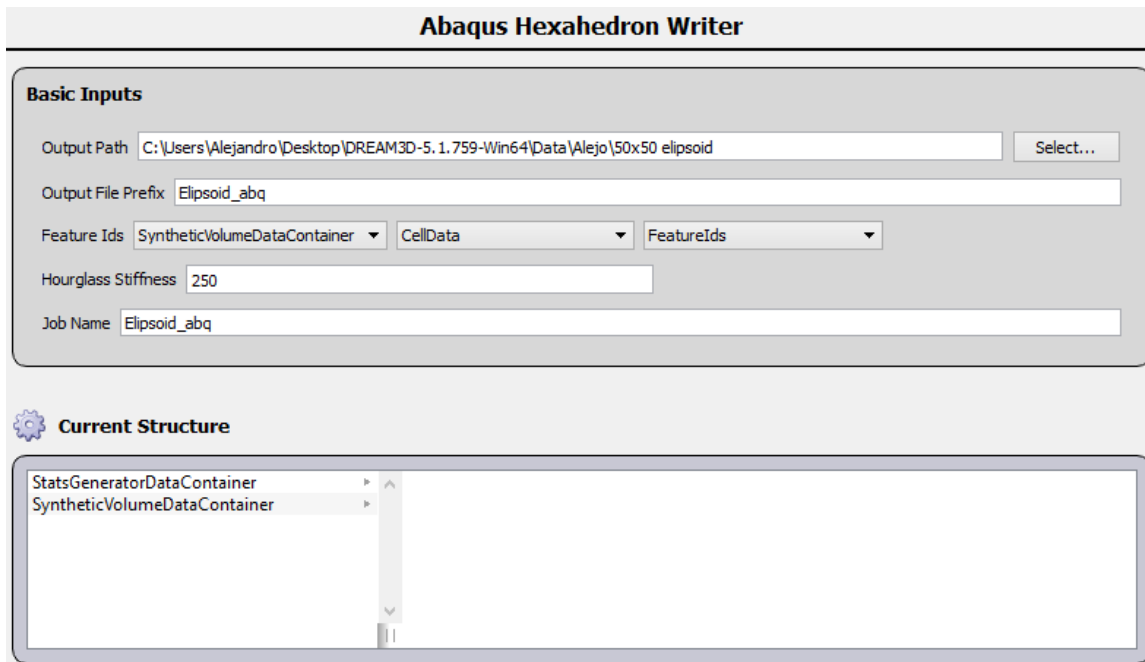


Figura 19. Ventana Write DREAM3D Data File

Este filtro escribe los datos en un formato HDF5. Además existe la opción de crear el archivo “.xdmf” el cual es compatible con PARAVIEW donde se puede visualizar al modelo creado. En el área de *Basic Inputs* se especifica el archivo de salida para los datos.

Abaqus Hexaedron Writer



Abaqus Hexahedron Writer

Basic Inputs

Output Path: C:\Users\Alejandro\Desktop\DREAM3D-5.1.759-Win64\Data\Alejo\50x50 elipsoid Select...

Output File Prefix: Elipsoid_abq

Feature Ids: SyntheticVolumeDataContainer | CellData | FeatureIds

Hourglass Stiffness: 250

Job Name: Elipsoid_abq

Current Structure

- StatsGeneratorDataContainer
- SyntheticVolumeDataContainer

Figura 20. Ventana Abaqus Hexaedron Writer

Con este filtro se crean los archivos con extensión “.inp” para poder importar el modelo en ABAQUS. En el área de *Basic Inputs* se especifica la carpeta para que el archivo sea exportado.

Una vez con los filtros creados en el orden correcto, se procede a correr el programa con el comando GO tal como se muestra en la Figura 21.

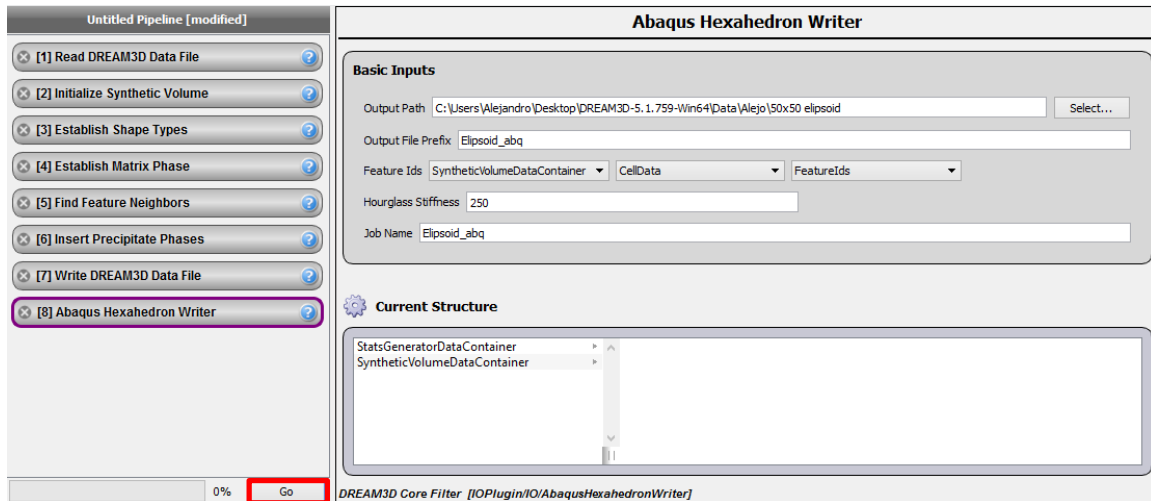


Figura 21. Corrida del programa

De esta manera se crean cuatro diferentes microestructuras, dos de 33 micras de arista y dos de 50 micras de arista en las que lo único que se varía es la distribución del precipitado en la matriz.

MODELO CONSTITUTIVO

Para la asignación de las propiedades de las fases (matriz y precipitados) que conforman el compuesto se utiliza las ecuaciones (3), (4) y (5), obtenidas previamente en base a la teoría de dislocaciones y el modelo de endurecimiento basado en dislocaciones (Bonifaz E. , 2015).

$$\rho^G = \frac{\bar{\epsilon}}{4bd} \quad (3)$$

$$\rho^S = \left[\frac{K_1}{K_2} \left(1 - e^{-\frac{MK_2\bar{\epsilon}}{2}} \right) + \rho^0 e^{-\frac{MK_2\bar{\epsilon}}{2}} \right]^2 \quad (4)$$

$$\sigma = \sigma_0 + M\alpha Gb\sqrt{\rho^T} \quad (5)$$

El esfuerzo cortante es calculado con la ecuación (9).

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (9)$$

Aquí E es el módulo de Young y ν es el coeficiente de Poisson.

En la Tabla 1 se muestra los valores de las constantes y los parámetros utilizados en el modelo constitutivo con el que se obtuvo la Figura 22 donde se muestra el comportamiento mecánico de cada fase.

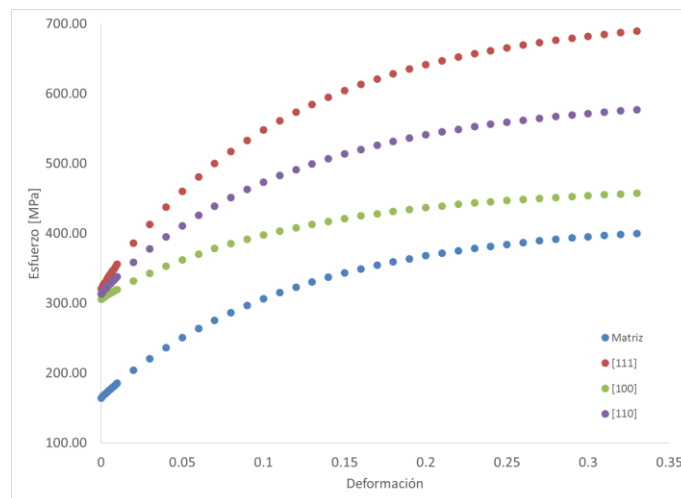


Figura 22. Comportamiento mecánico de las fases matriz (suave) y precipitado (dura)

Tabla 1. Valores de constantes y parámetros utilizados con el modelo constitutivo

Parámetro o constante	Unidades	Matriz	Precipitado
Factor de Taylor, M	(-)	2.73	2.91 [111]
			2.83 [100]
			2.80 [110]
Módulo de Young, E (Reed, 2006)	$\left(\frac{N}{\mu m^2}\right)$	0.207	0.294 [111]
			0.125 [100]
			0.220 [110]
CRSS, K_0 (Bonifaz E. , 2015)	$\left(\frac{N}{\mu m^2}\right)$	8.51E-05	1.70E-04
Límite elástico, $\sigma_0 = \sqrt{3}K_0$	$\left(\frac{N}{\mu m^2}\right)$	1.47E-04	2.95E-04
Constante α (Bonifaz E. , 2015)	(-)	0.3	0.3
Constante K1 (Bonifaz E. , 2015)	$\left(\frac{1}{cm}\right)$	9.47E+05	9.47E+05
Constante K2 (Bonifaz E. , 2015)	(-)	6.12E+00	6.12E+00
Densidad de dislocación inicial, ρ^0 (Bonifaz E. , 2015)	$\left(\frac{N}{\mu m^2}\right)$	1.00E+08	1.00E+08
Vector de Burguers, b (Reed, 2006)	(cm)	2.52E-08	2.52E-08
Coefficiente de Poisson, ν	(-)	0.26	0.26
Diámetro de grano, d	(cm)	2.31E-3 (33 micras)	1.60E-03
		3.5E-3 (50 micras)	

PREPARACIÓN DE LOS ARCHIVOS PARA ABAQUS

Una vez obtenidos los archivos generados por DREAM3D se procede a la importación del modelo a ABAQUS para poder realizar las pruebas requeridas. De DREAM3D se obtienen cinco archivos y se crean dos extras para completar los datos para la simulación. Los archivos se muestran en Figura 23.








 Cylinder50	14/04/2015 16:26	INP File	5 KB
 Cylinder50_abq	08/04/2015 10:36	INP File	1 KB
 Cylinder50_abq_elems	08/04/2015 10:04	INP File	7.749 KB
 Cylinder50_abq_elset	08/04/2015 10:04	INP File	869 KB
 Cylinder50_abq_nodes	08/04/2015 10:04	INP File	4.998 KB
 Cylinder50_abq_ph	08/04/2015 10:35	INP File	1 KB
 Cylinder50_abq_sects	08/04/2015 10:04	INP File	2 KB

Figura 23. Archivos para importación en ABAQUS

El primer archivo “Cylinder50_abq” es en el que se incluyen todos los archivos creados para una mayor facilidad de manipulación de datos. El archivo “Cylinder50_abq_elems” contiene la información de cada elemento que forma la malla y los nodos que pertenecen a dicho elemento. El archivo “Cylinder50_abq_elset” contiene la información de los elementos que forman cada grano de la microestructura. El archivo “Cylinder50_abq_nodes” contiene la información de las coordenadas de cada nodo de la malla creada en la microestructura. El archivo “Cylinder50_abq_sects” contiene la información acerca del número de granos de la microestructura. Se creó además de manera paralela el archivo “Cylinder50_abq_ph” en el que se especifica los granos que pertenecen a cada fase del material. Como fase se entiende al grupo de granos que serán analizados en cada una de las direcciones cristalográficas previamente descritas. Finalmente, el archivo “Cylinder50” contiene la descripción de las condiciones de borde, de carga, parámetros de simulación, y las propiedades de cada fase que fueron obtenidas en la sección 0 en donde se proporcionó distintos factores de Taylor a cada estructura para cambiar sus planos y direcciones de desplazamiento.

Condiciones de borde utilizando MATLAB

Para la asignación de las condiciones de borde, se creó un archivo de MATLAB adicional que lee la información de las coordenadas de cada nodo y crea seis archivos que contienen la caracterización de los nodos pertenecientes a cada una de las caras del cubo que forma la microestructura. El archivo se muestra en la Figura 24.



Figura 24. Archivo MatLab para creación de condiciones de borde

Para utilizar el programa se deben realizar los siguientes pasos:

1. Del archivo creado por DREAM3D “Cylinder50_abq_nodes” copiar la información de los nodos y sus coordenadas tal como se muestra en la Figura 25.

Figura 25. Copia de la información de los nodos y sus coordenadas

2. Pegar esta información en una hoja de Excel y eliminar las cuatro primeras filas y las cuatro últimas filas (contienen información únicamente útil para ABAQUS). Esto es mostrado esquemáticamente en la Figura 26.

	A	B	C	D	E	F	G
1	** Generated by : DREAM3DLib Version 5.1.759.20580e6						
2	** -----						
3	**						
4	*Node						
5	1,	0.000000,	0.000000,	0.000000			
6	2,	1.000000,	0.000000,	0.000000			
7	3,	2.000000,	0.000000,	0.000000			
132653	132649,	48.000000,	50.000000,	50.000000			
132654	132650,	49.000000,	50.000000,	50.000000			
132655	132651,	50.000000,	50.000000,	50.000000			
132656	999999,	0.000000,	0.000000,	0.000000			
132657	**						
132658	** -----						
132659	**						

Figura 26. Manipulación de la información en Excel

3. Transformar la información sobrante con el menú “Data” y la opción “Text to Columns”. Las opciones que se deben seleccionar en las ventanas emergentes son las siguientes:
 - a. Delimited (Figura 27).

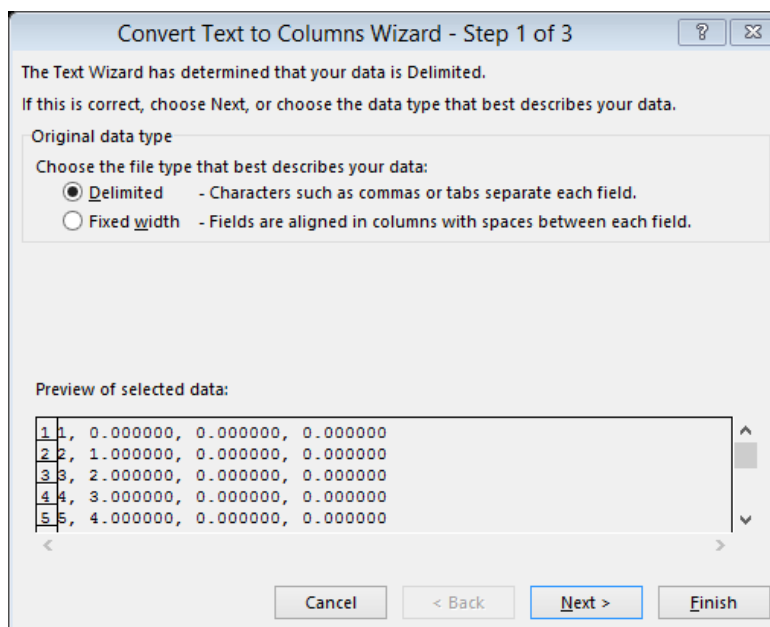


Figura 27. Primera ventana emergente "Text to Columns"

b. Comma (Figura 28).

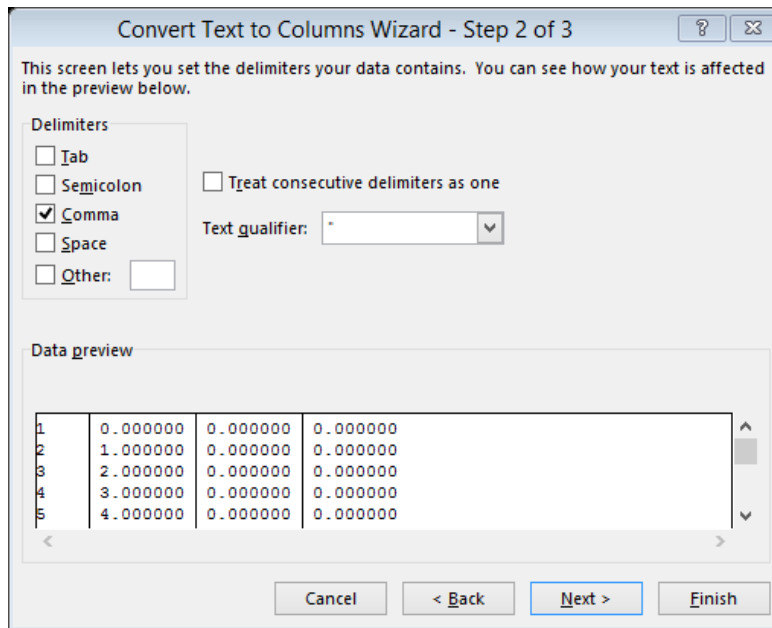


Figura 28. Segunda ventana emergente "Text to Columns"

c. General (Figura 29).

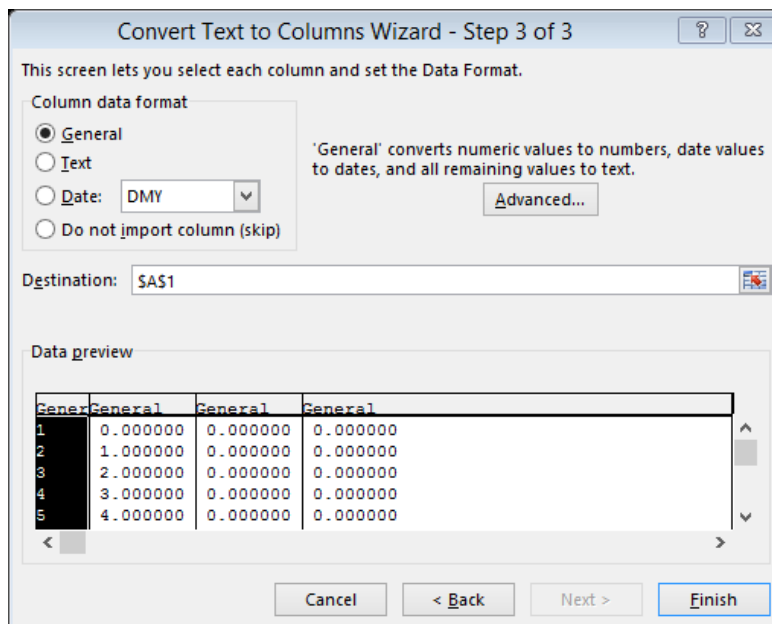


Figura 29. Tercera ventana emergente "Text to Columns"

Una muestra del archivo tras ser manipulado se observa en la Figura 30.

	A	B	C	D
1	1	0	0	0
2	2	1	0	0
3	3	2	0	0
4	4	3	0	0
5	5	4	0	0
6	6	5	0	0
7	7	6	0	0
8	8	7	0	0
9	9	8	0	0

Figura 30. Datos tras ser transformados a columnas

4. Guardar el archivo de Excel en la misma carpeta en la que se encuentre el archivo de MATLAB “nodoscaras”.
5. Abrir MATLAB e importar los datos del archivo de Excel previamente creado. Los nombres que se deben dar a cada columna se muestran en la Figura 31

	A	B	C	D
	nodo	coordx	coordy	coordz
	Number	Number	Number	Number
1	1	0	0	0
2	2	1	0	0
3	3	2	0	0
4	4	3	0	0
5	5	4	0	0
6	6	5	0	0

Figura 31. Nombres de cada columna para la importación en MATLAB

6. Correr el programa “nodoscaras”. Este generará automáticamente los seis archivos con la información de los nodos que pertenecen a cada cara. Los archivos creados se muestran en Figura 32.

datos_cara1	08/04/2015 13:33	File	16 KB
datos_cara2	08/04/2015 13:33	File	16 KB
datos_cara3	08/04/2015 13:34	File	18 KB
datos_cara4	08/04/2015 13:34	File	16 KB
datos_cara5	08/04/2015 13:34	File	16 KB
datos_cara6	08/04/2015 13:34	File	12 KB

Figura 32. Archivos creados con MATLAB

7. Para que los archivos creados puedan funcionar correctamente se deben realizar dos modificaciones. La primera es aumentar antes de la primera fila el siguiente comando de ABAQUS: *NSET, NSET=CARA1. La segunda es buscar la última fila de cada archivo y eliminar todos los datos con valores de cero. Lo único que varía entre los seis archivos es la numeración de la cara de cada uno. Esto se muestra en la Figura 33.

```
*NSET, NSET=CARA1
1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16
17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32
33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48
49, 50, 51, 2602, 2603, 2604, 2605, 2606, 2607, 2608, 2609, 2610, 2611, 2612, 2613, 2614
130061, 130062, 130063, 130064, 130065, 130066, 130067, 130068, 130069, 130070, 130
071, 130072, 130073, 130074, 130075, 130076
130077, 130078, 130079, 130080, 130081, 130082, 130083, 130084, 130085, 130086, 130
087, 130088, 130089, 130090, 130091, 130092
130093, 130094, 130095, 130096, 130097, 130098, 130099, 130100, 130101, 0, 0, 0, 0, 0,
0, 0
```

Figura 33. Cambios finales en el archivo creado por MATLAB

Al seguir estos pasos se va a tener los archivos necesarios para asignar las condiciones necesarias en ABAQUS.

El código creado para realizar esta acción es el siguiente:

```
format long
a=1; %contador de filas
b=1; %contador de filas
c=1; %contador de filas
d=1; %contador de filas
e=1; %contador de filas
f=1; %contador de filas
total=length(nodo);
for i=1:total(1)
```



```

    if coordy(i)==min(coordy)
        nodos_cara1(a)=nodo(i);
        a=a+1;
    elseif coordy(i)==max(coordy)
        nodos_cara2(b)=nodo(i);
        b=b+1;
    end
end
tot_nodos_cara1=a-1;
tot_nodos_cara2=b-1;

for i=1:total(1)
    if coordz(i)==max(coordz)
        nodos_cara3(c)=nodo(i);
        c=c+1;
    elseif coordz(i)==min(coordz)
        nodos_cara6(f)=nodo(i);
        f=f+1;
    end
end
tot_nodos_cara3=c-1;
tot_nodos_cara6=f-1;

for i=1:total(1)
    if coordx(i)==max(coordx)
        nodos_cara4(d)=nodo(i);
        d=d+1;
    elseif coordx(i)==min(coordx)
        nodos_cara5(e)=nodo(i);
        e=e+1;
    end
end
tot_nodos_cara4=d-1;
tot_nodos_cara5=e-1;

%caral abajo
k=1;
j=1;
while j<=length(nodos_cara1)
    format long
    for i=1:16
        if j>length(nodos_cara1)
            datos_cara1(k,i)=0;
        else
            datos_cara1(k,i)=nodos_cara1(j);
            j=j+1;
            i=i+1;
        end
    end
    k=k+1;
end

%cara2 arriba
k=1;
j=1;

```

```

while j<=length(nodos_cara2)
    for i=1:16
        if j>length(nodos_cara2)
            datos_cara2(k,i)=0;
        else
            datos_cara2(k,i)=nodos_cara2(j);
            j=j+1;
            i=i+1;
        end
    end
    k=k+1;
end

%cara3 frontal
k=1;
j=1;
while j<=length(nodos_cara3)
    for i=1:16
        if j>length(nodos_cara3)
            datos_cara3(k,i)=0;
        else
            datos_cara3(k,i)=nodos_cara3(j);
            j=j+1;
            i=i+1;
        end
    end
    k=k+1;
end

%cara4 lat derecha
k=1;
j=1;
while j<=length(nodos_cara4)
    for i=1:16
        if j>length(nodos_cara4)
            datos_cara4(k,i)=0;
        else
            datos_cara4(k,i)=nodos_cara4(j);
            j=j+1;
            i=i+1;
        end
    end
    k=k+1;
end

%cara5 lat izquierda
k=1;
j=1;
while j<=length(nodos_cara5)
    for i=1:16
        if j>length(nodos_cara5)
            datos_cara5(k,i)=0;
        else
            datos_cara5(k,i)=nodos_cara5(j);
            j=j+1;
        end
    end
end

```

```

        i=i+1;
    end
end
k=k+1;
end

%cara6 posterior
k=1;
j=1;
while j<=length(nodos_cara6)
    for i=1:16
        if j>length(nodos_cara6)
            datos_cara6(k,i)=0;
        else
            datos_cara6(k,i)=nodos_cara6(j);
            j=j+1;
            i=i+1;
        end
    end
    k=k+1;
end

tot_nodos_caras=tot_nodos_car1+tot_nodos_cara2+tot_nodos_cara3+tot_nodos_cara4+tot_nodos_cara5+tot_nodos_cara6

dlmwrite('datos_car1',datos_car1,'precision',16)
dlmwrite('datos_cara2',datos_cara2,'precision',16)
dlmwrite('datos_cara3',datos_cara3,'precision',16)
dlmwrite('datos_cara4',datos_cara4,'precision',16)
dlmwrite('datos_cara5',datos_cara5,'precision',16)
dlmwrite('datos_cara6',datos_cara6,'precision',16)

```

En la Tabla 2 se muestra la codificación utilizada para el nombramiento de cada una de las caras del cubo creado.

Tabla 2. Posición de las caras en el cubo

Nombre	Posición real
Cara1	Cara inferior
Cara2	Cara superior
Cara3	Cara frontal
Cara4	Cara lateral derecha
Cara5	Cara lateral izquierda
Cara6	Cara posterior

MODELO EN ABAQUS

En el presente estudio, el dominio del problema es una porción de material multifásico policristalino en el orden de las micras que tiene que ser discretizado (mallado) en un número considerable de elementos finitos. Esto se lo consigue mediante la utilización del código DREAM 3D.

Microestructuras creadas para la simulación

Con DREAM3D se crean cuatro microestructuras virtuales (dos de 33 micras de arista l_0 y dos de 50 micras de arista l_0) con diferente distribución del precipitado en la matriz (Figura 34 y Figura 35). En la Figura 34 se muestra las configuraciones de distribución para la microestructura de 33 micras de arista. También, se muestra cuatro elementos finitos seleccionados para posterior análisis, tres correspondientes a las diferentes direcciones cristalográficas ensayadas, [110], [111] y [100]; y uno correspondiente a la fase matriz.

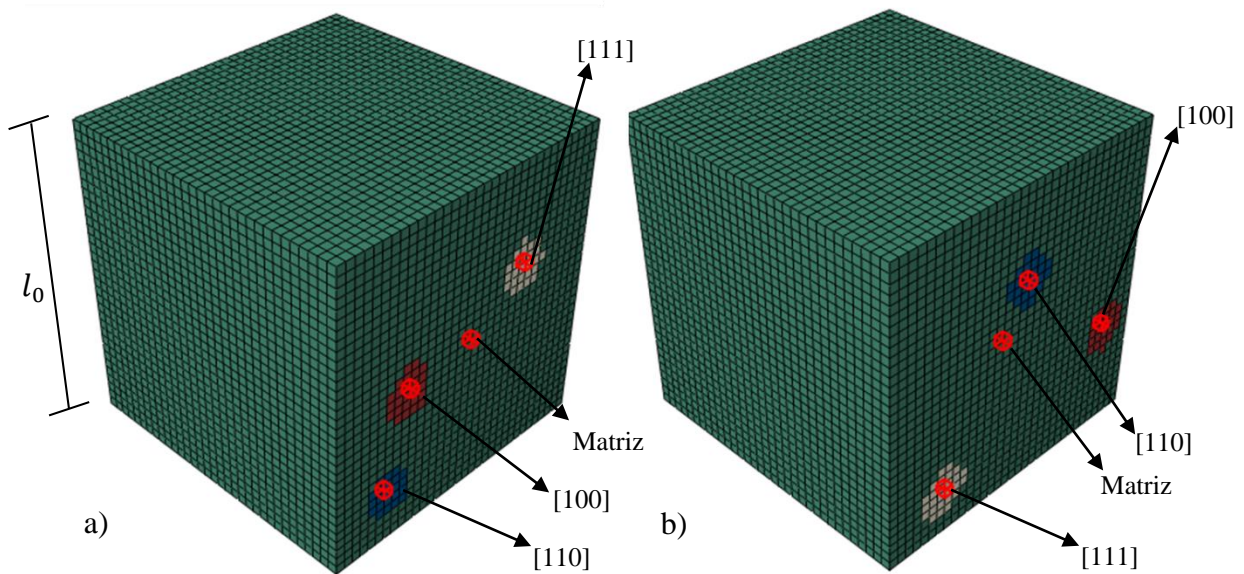


Figura 34. Microestructura de 33 micras de longitud de arista l_0 . a) Distribución 1 b) Distribución 2.

En la Figura 35 se muestran las configuraciones de distribución para la microestructura de 50 micras de arista. Además, se muestra cuatro elementos finitos

seleccionados para su posterior análisis, tres correspondientes a las diferentes direcciones cristalográficas ensayadas, [110], [111] y [100]; y uno correspondiente a la fase matriz.

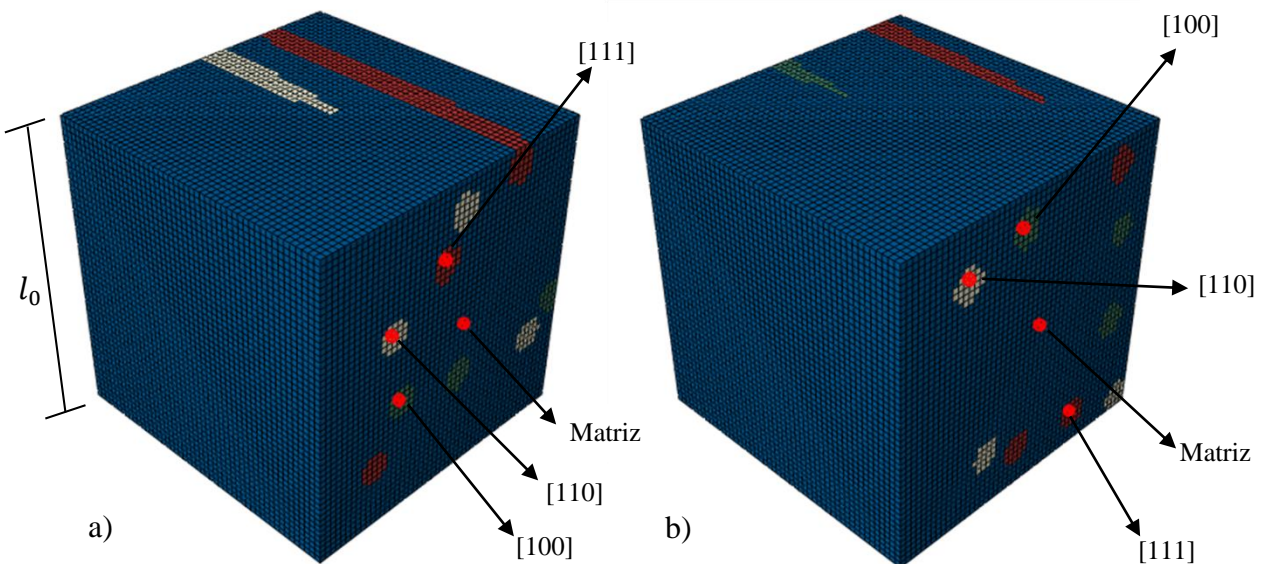


Figura 35. Microestructura de 50 micras de longitud de arista l_0 . a) Distribución 1 b) Distribución 2

Tipo de elemento utilizado

ABAQUS tiene una variedad de elementos para el mallado de las estructuras en análisis. De esa variedad de elementos se seleccionó uno de tipo C3D8 el cual es un elemento continuo en tres dimensiones con 8 nodos. Una representación de este elemento se muestra en la Figura 36.

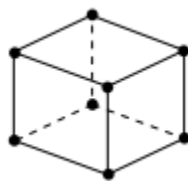


Figura 36. Representación del elemento C3D8

Condiciones de borde y de desplazamiento

Para la simulación de todas las estructuras se impuso un desplazamiento de 30% de la longitud de la arista. Con el fin de imponer este desplazamiento se utiliza el comando “*EQUATION” con el que se iguala el comportamiento de la cara superior del cubo con

el de un nodo de carga predefinido cuando el desplazamiento es perpendicular a la orientación del precipitado, y se iguala el comportamiento de la cara lateral derecha del cubo con el mismo nodo de carga cuando el desplazamiento aplicado es paralelo a la orientación del precipitado. Al imponer el desplazamiento a este nodo de carga, la cara del cubo en cuestión se va a comportar de la misma manera que este nodo. Esto además brinda la oportunidad de obtener el comportamiento del cubo como un todo una vez realizado el ensayo de tensión, en base a los resultados obtenidos en este nodo de carga.

En la Figura 37 se muestra el comando *EQUATION tal como fue usado en las simulaciones.

```
*EQUATION  
2  
CARA2,2,1.0,500000,2,-1.0
```

Figura 37. Uso del comando *EQUATION en la simulación

Este comando es usado para definir restricciones lineales en la forma de una ecuación. En la primera línea se especifica el número de términos de la ecuación (igualada a cero). En la segunda línea se tienen varios parámetros cuyo significado se lo puede encontrar en el manual de documentación de ABAQUS.

Para la simulación se tiene dos escenarios, primero, cuando el desplazamiento es aplicado perpendicular a la dirección de los precipitados (en el eje y) y la cara que se traslada es la cara superior; y segundo, cuando el desplazamiento es aplicado paralelo a la dirección de los precipitados (en el eje x), y la cara que se traslada es la cara lateral derecha. Una representación de estas condiciones se muestra en la Figura 38.

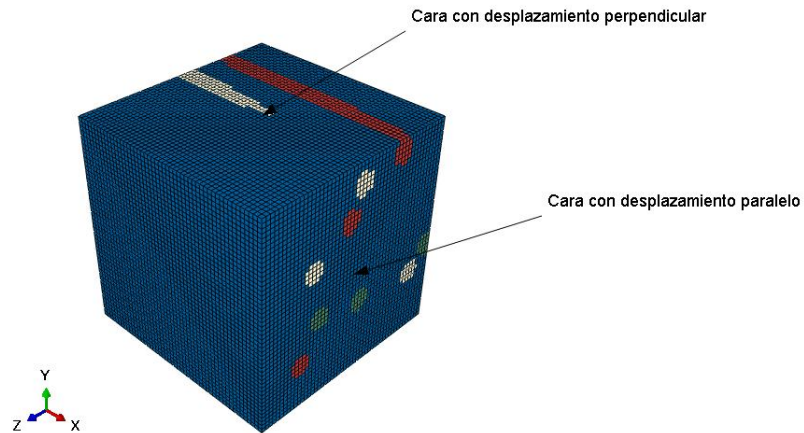


Figura 38. Dirección de las caras que se desplazan de acuerdo al tipo de desplazamiento

Por otra parte, las condiciones de borde fueron fijadas de la siguiente manera:

- La cara 1 (inferior) fue impedida de rotar alrededor del eje y .
- La cara 5 (lateral izquierda) fue impedida de rotar alrededor del eje x .
- La cara 6 (posterior) fue impedida de rotar alrededor del eje z .

Una representación de estas condiciones de borde se muestra en la Figura 39.

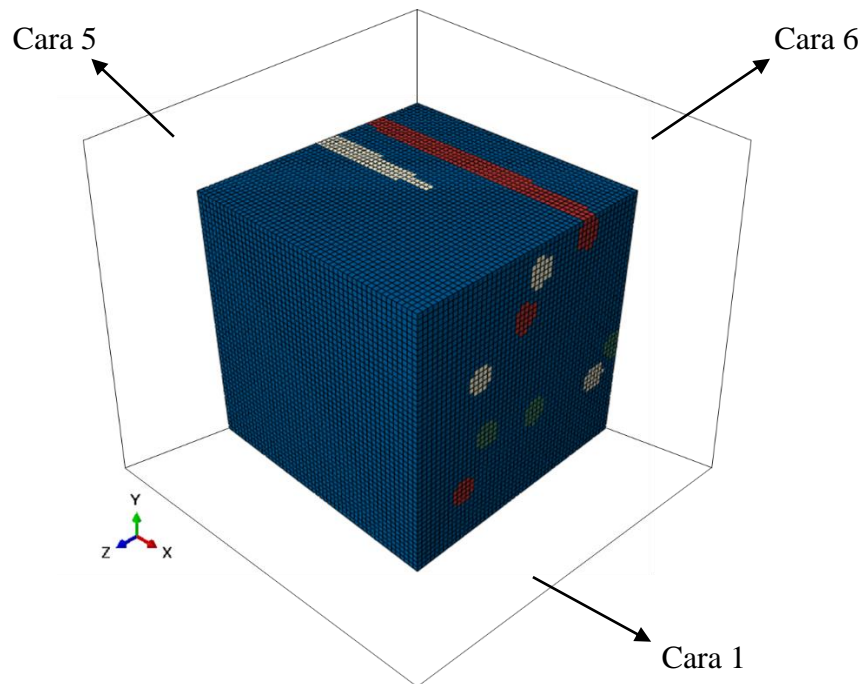


Figura 39. Condiciones de borde

RESULTADOS Y DISCUSIONES

Una vez corridas las simulaciones con los parámetros establecidos, se obtuvieron ocho archivos finales de los cuales se rescataron los resultados que se muestran a continuación. Es importante recordar que se pusieron a prueba dos microestructuras de 33 y 50 micras de arista cada una con dos tipos distintos de distribución del precipitado en la matriz. A estas microestructuras se aplicaron dos desplazamientos, uno paralelo y uno perpendicular a la alineación del precipitado en la matriz. Para los elementos seleccionados de cada estructura, se obtuvieron directamente de ABAQUS los valores de esfuerzo y deformación reales utilizados para la creación de las figuras. En cuanto al comportamiento del compuesto como un todo, se usaron los resultados obtenidos para el nodo de carga, los cuales constaban de valores de fuerza y desplazamiento. Para transformar la fuerza en esfuerzo y el desplazamiento en deformación se utilizaron las ecuaciones (6) y (8) las que pertenecen a la teoría de esfuerzo y deformación reales de un material.

El primer resultado obtenido es el comportamiento de cada uno de los precipitados y de la matriz en el compuesto de 50 micras de arista con carga paralela lo cual se muestra en la Figura 40. Esta gráfica se obtuvo para cada uno de los escenarios simulados, pero únicamente se muestra ésta ya que el comportamiento en las demás sigue el mismo patrón.

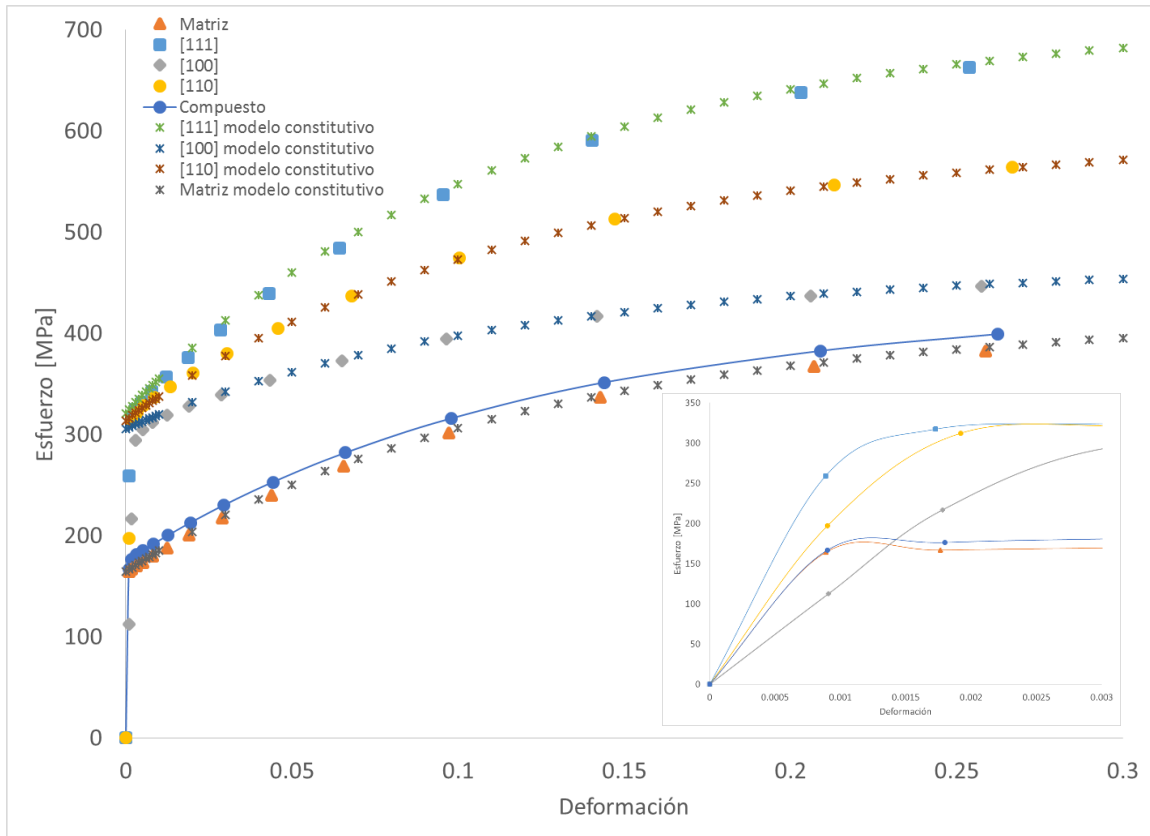


Figura 40. Curvas esfuerzo-deformación para una microestructura virtual de 50 micras de arista con distribución 1 sometida a carga paralela a la orientación de los precipitados. A modo de comparación se muestran también las correspondientes curvas calculadas con el modelo constitutivo usado en el presente estudio.

Tal como se muestra en la Figura 40, el elemento que representa el precipitado perteneciente a la dirección de desplazamiento [111] es el que mayor nivel de esfuerzo alcanza en la microestructura (682.89 MPa), seguido por el de la dirección [100] (446.61 MPa) y después por el de la dirección [110] (382.47 MPa). El valor obtenido para el esfuerzo del compuesto (399.26 MPa), se aproxima al presentado por la matriz (382.47 MPa), independientemente del tipo de carga y de la longitud de la arista. Esto se debe a que el porcentaje de precipitado presente es de 30% frente al 70% propio de la matriz. En la Figura 40 se muestra además en líneas punteadas la respuesta de esfuerzo-deformación calculadas con el modelo de endurecimiento basado en dislocaciones, basado en las ecuaciones (3), (4) y (5), y al comparar estos valores del modelo con los valores obtenidos

de las simulaciones se puede notar que el comportamiento individual de las fases no se ve afectado mayoritariamente cuando éstas son incorporados en el agregado.

De cada microestructura se seleccionó un elemento el cual posee una dirección cristalográfica de deslizamiento preferencial. Dichos elementos fueron mostrados en la sección 0 y permanecieron constantes para cada una de las simulaciones. La respuesta de esfuerzo-deformación para los elementos de la dirección [111] para los dos tipos de carga es mostrada en la Figura 41; para los elementos de la dirección [110] es mostrada en la Figura 42 y para los elementos de la dirección [100] es mostrada en la Figura 43.

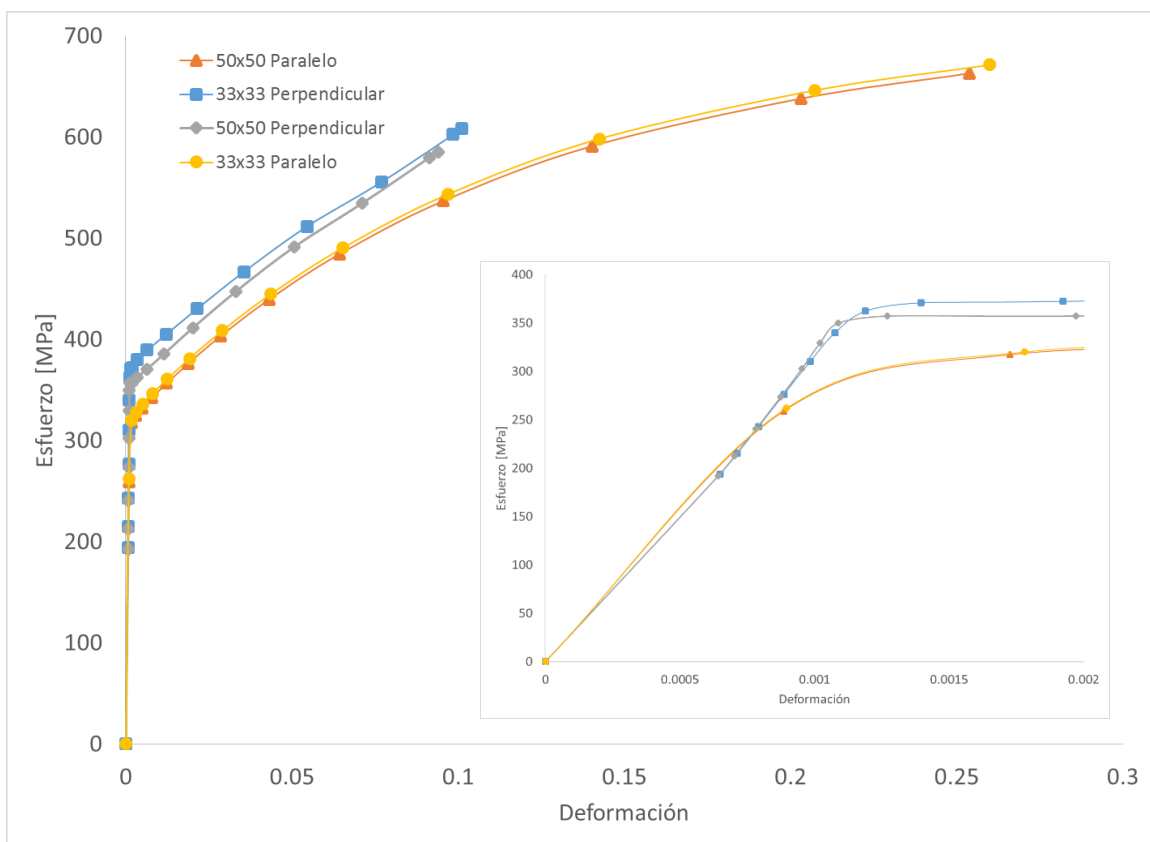


Figura 41. Curvas esfuerzo-deformación para un elemento finito seleccionado de un grupo perteneciente a la dirección [111] para los dos tamaños de cubos en sus dos condiciones de carga y su distribución 1

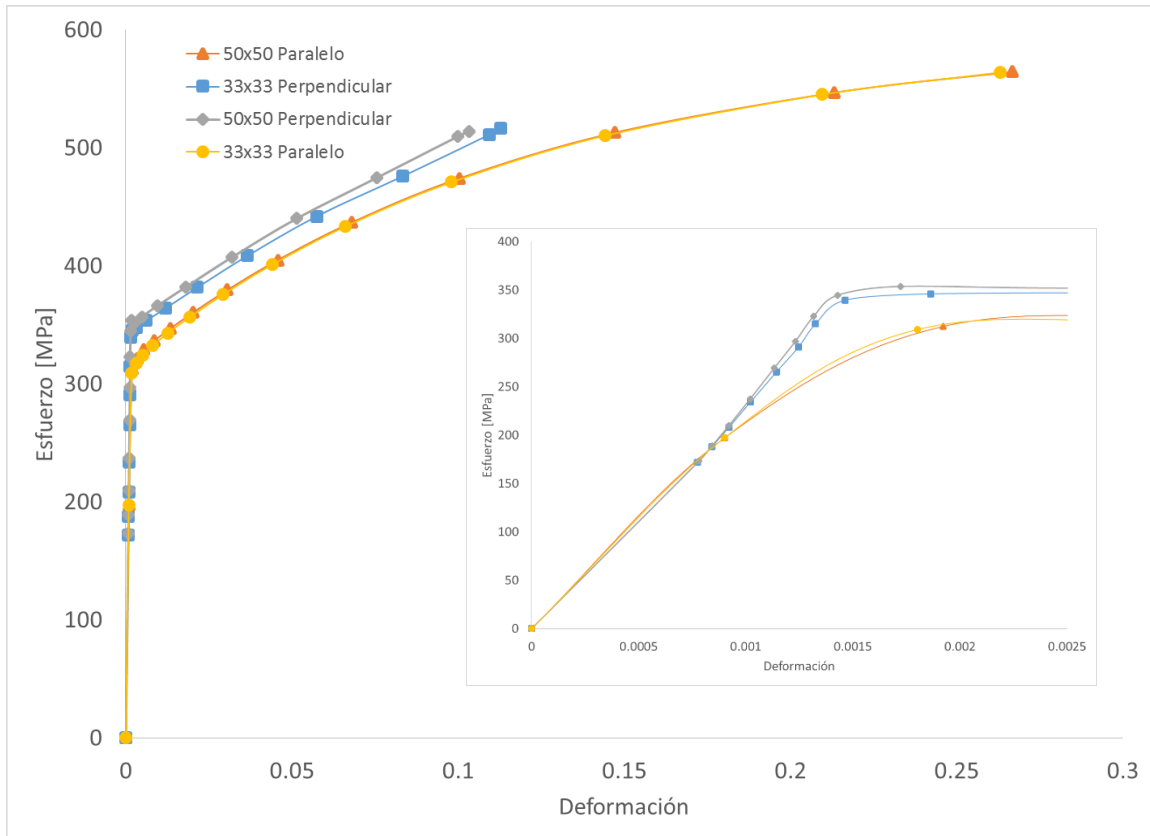


Figura 42. Curvas esfuerzo-deformación para un elemento finito seleccionado de un grupo perteneciente a la dirección [110] para los dos tamaños de cubos en sus dos condiciones de carga y su distribución 1

En la Figura 41 y Figura 42 se observa que el precipitado presentó un mayor esfuerzo de fluencia σ_y , casi 50 MPa más, cuando el desplazamiento aplicado fue en dirección perpendicular a la orientación de los precipitados independientemente de la longitud de arista del cubo. Es decir, los precipitados en esta condición presentan mayor resistencia a la deformación plástica. Por otra parte, cuando el desplazamiento aplicado fue paralelo a la orientación de los precipitados, aunque el esfuerzo de fluencia σ_y es menor, el precipitado presenta un mayor esfuerzo final y una mayor deformación plástica. Esto permite concluir que el precipitado en esta condición de carga absorbe mayor energía antes de fallar.

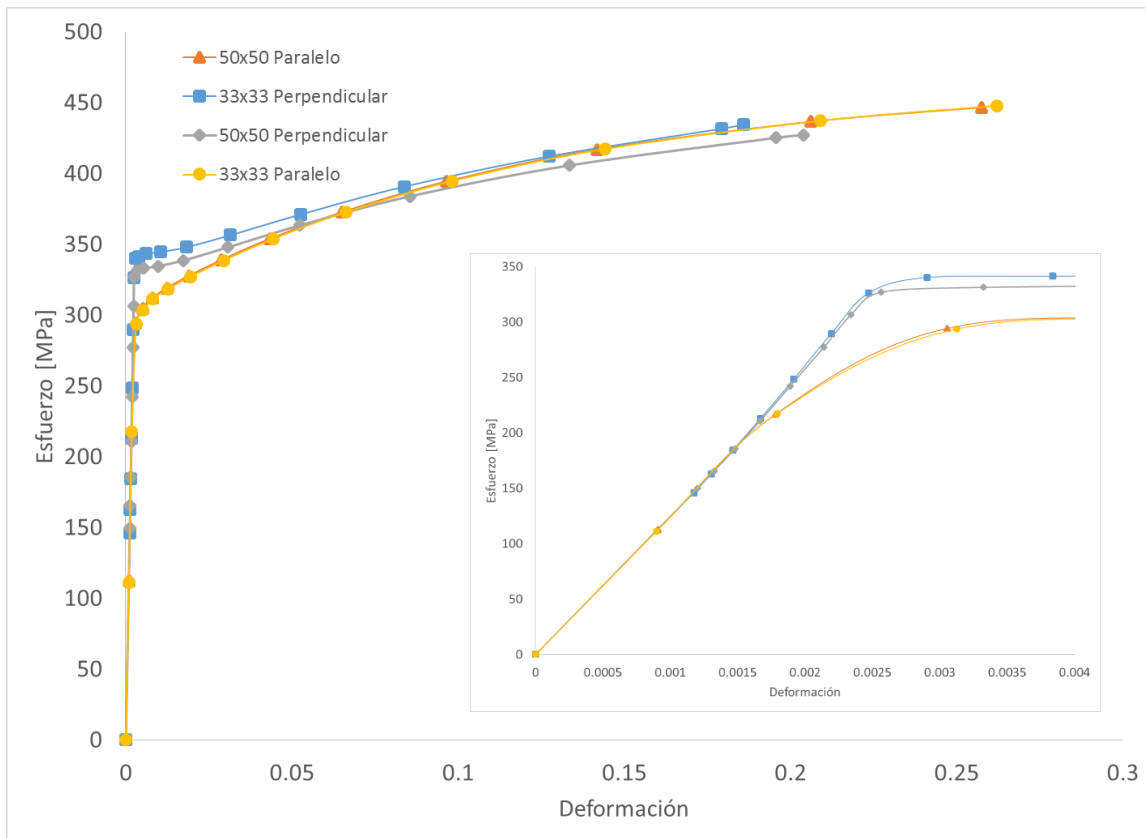


Figura 43. Curvas esfuerzo-deformación para un elemento finito seleccionado de un grupo perteneciente a la dirección [100] para los dos tamaños de cubos en sus dos condiciones de carga y su distribución 1

En la Figura 43 se observa que el comportamiento del precipitado es muy similar a los dos casos anteriores en cuanto al límite elástico se refiere. Sin embargo, el esfuerzo final y el nivel de deformación plástica varían en las dos condiciones de carga analizadas (perpendicular y paralela a los ejes del precipitado). Esto último pone en evidencia que la deformación plástica y el esfuerzo final del precipitado dependen fuertemente de la diferencia que puede existir entre el módulo de Young del precipitado y el módulo de Young de la matriz (fase mayoritaria).

Al comparar la Figura 41, Figura 42 y Figura 43, se puede apreciar que el elemento con dirección de deslizamiento [111] al ser sometido a un desplazamiento paralelo a la orientación del eje axial del precipitado es el que mayor esfuerzo soporta, σ : 663~671 MPa, para 33 y 50 micras respectivamente. El esfuerzo de fluencia σ_y

permaneció constante con un valor de alrededor de 300 MPa, ver Figura 43 ampliada, cuando el elemento fue sometido a un desplazamiento paralelo independientemente de la dirección de deslizamiento a la que el elemento pertenecía.

Se obtuvo también la respuesta esfuerzo-deformación para la matriz del compuesto, lo cual se muestra en la Figura 44.

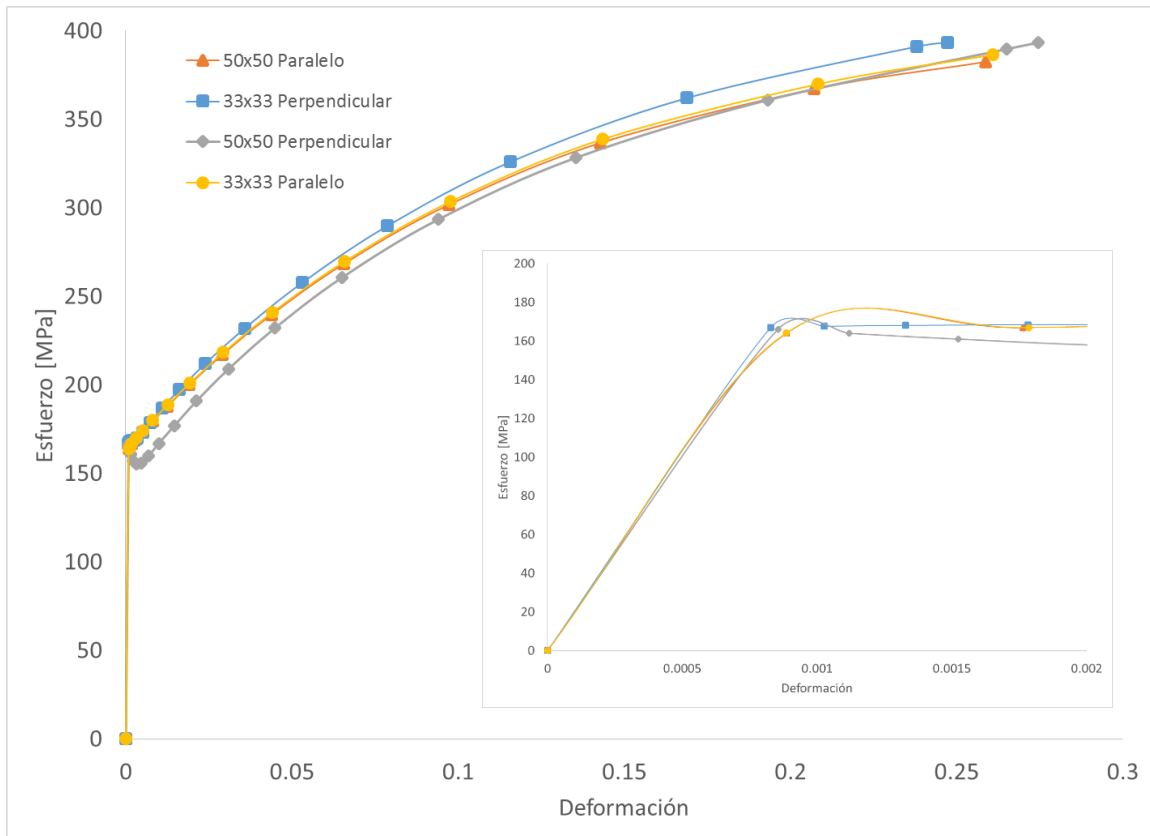


Figura 44. Curvas esfuerzo-deformación para un elemento finito seleccionado de un grupo perteneciente a la matriz para los dos tamaños de cubos en sus dos condiciones de carga y su distribución 1

Al observar la Figura 44 se puede notar que su comportamiento no se ve influenciado de gran manera ni por la longitud de arista del elemento de volumen representativo (RVE), lo cual cambia el tamaño de grano de la matriz, ni por el tipo de desplazamiento aplicado, paralelo o perpendicular a la orientación de los precipitados. La única diferencia que se puede notar es que al aplicar un desplazamiento paralelo a la orientación del eje axial del precipitado, la respuesta esfuerzo-deformación y su gráfica se

vuelve más “suave”, ver Figura 44 ampliada, lo que quiere decir que la matriz fluye con mayor facilidad que en el otro escenario.

Otro resultado que se obtuvo es el comportamiento global del agregado (matriz y precipitados juntos) al aplicar los dos distintos tipos de desplazamiento. La respuesta al desplazamiento paralelo a la orientación de los precipitados es mostrada en la Figura 45 y la respuesta al desplazamiento perpendicular a la orientación de los precipitados es observada en la Figura 46.

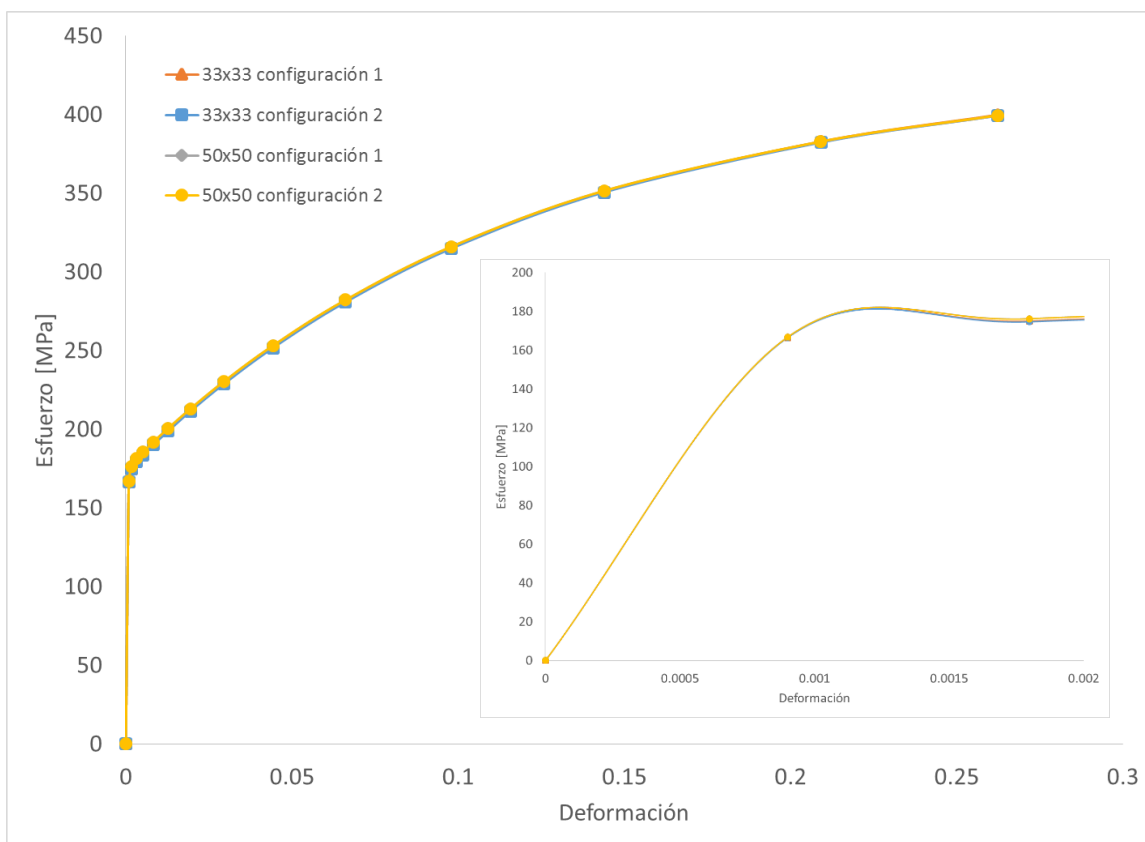


Figura 45. Curvas esfuerzo-deformación para el compuesto ensayado con carga paralela a la orientación de los precipitados

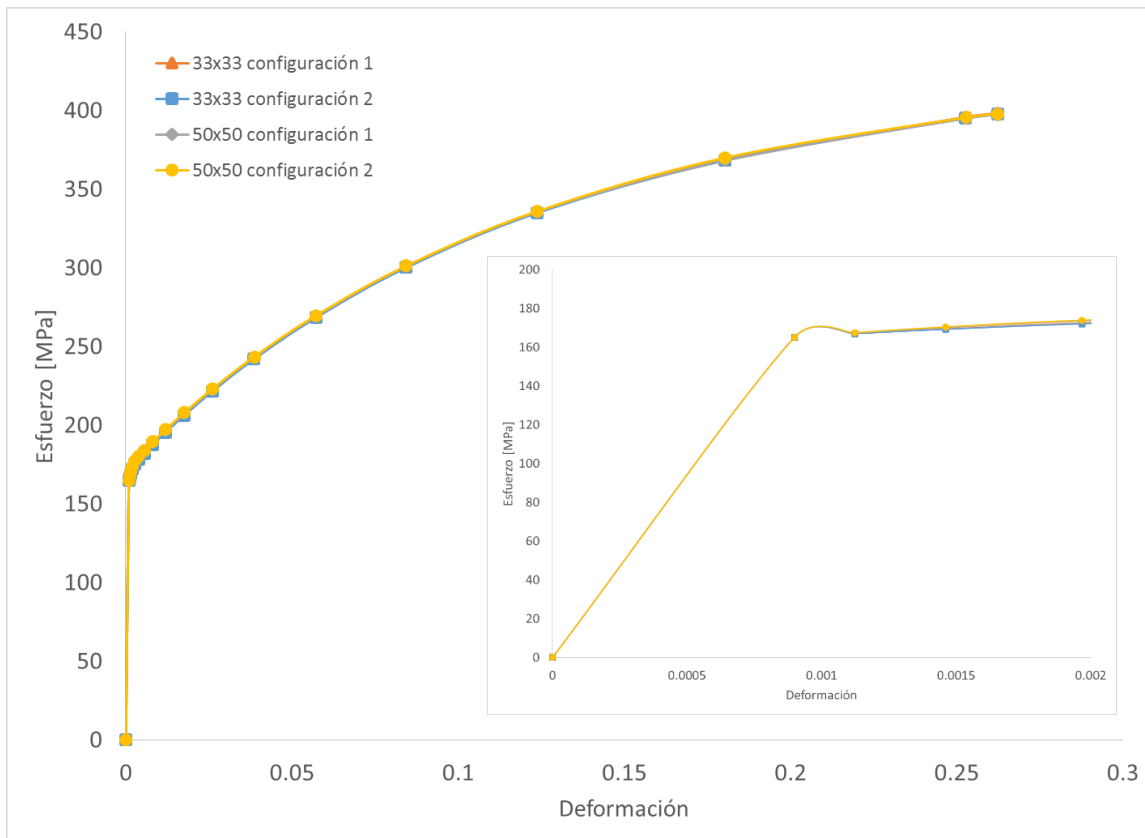


Figura 46. Curvas esfuerzo-deformación para el compuesto ensayado con carga perpendicular a la orientación de los precipitados

Al comparar la Figura 45 y Figura 46 se puede observar que el comportamiento del compuesto como un todo, matriz y precipitado, se mantiene siempre constante independientemente de la longitud de arista o de la orientación del desplazamiento aplicado. El esfuerzo de fluencia σ_y , el esfuerzo final, el módulo de Young E y la deformación máxima ε son prácticamente las mismas para los escenarios analizados.

De ABAQUS se obtuvo directamente el esfuerzo de Von Mises y la deformación equivalente para las cuatro situaciones analizadas. En la Figura 47 y Figura 48 se presentan los contornos de esfuerzos de Von Mises para las microestructuras de 33 y 50 micras de la arista respectivamente.

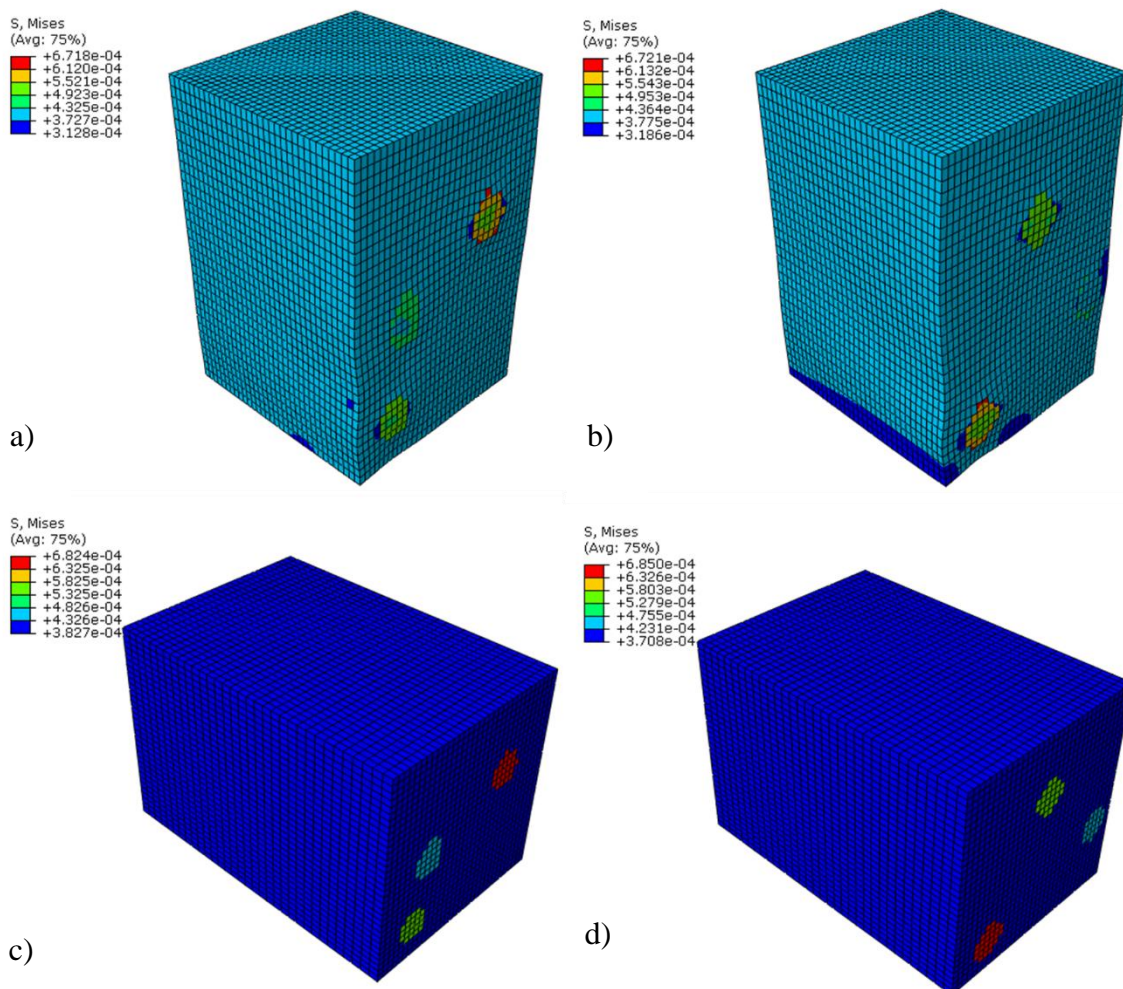


Figura 47. Contornos de esfuerzo de Von Mises para la microestructura de 33 micras de arista con carga paralela y perpendicular a los precipitados. a) la primera configuración sometida a carga perpendicular, b) la segunda configuración sometida a carga perpendicular, c) la primera configuración sometida a carga paralela y d) la segunda configuración sometida a carga paralela. Las unidades de esfuerzo son $\frac{N}{\mu m^2}$.

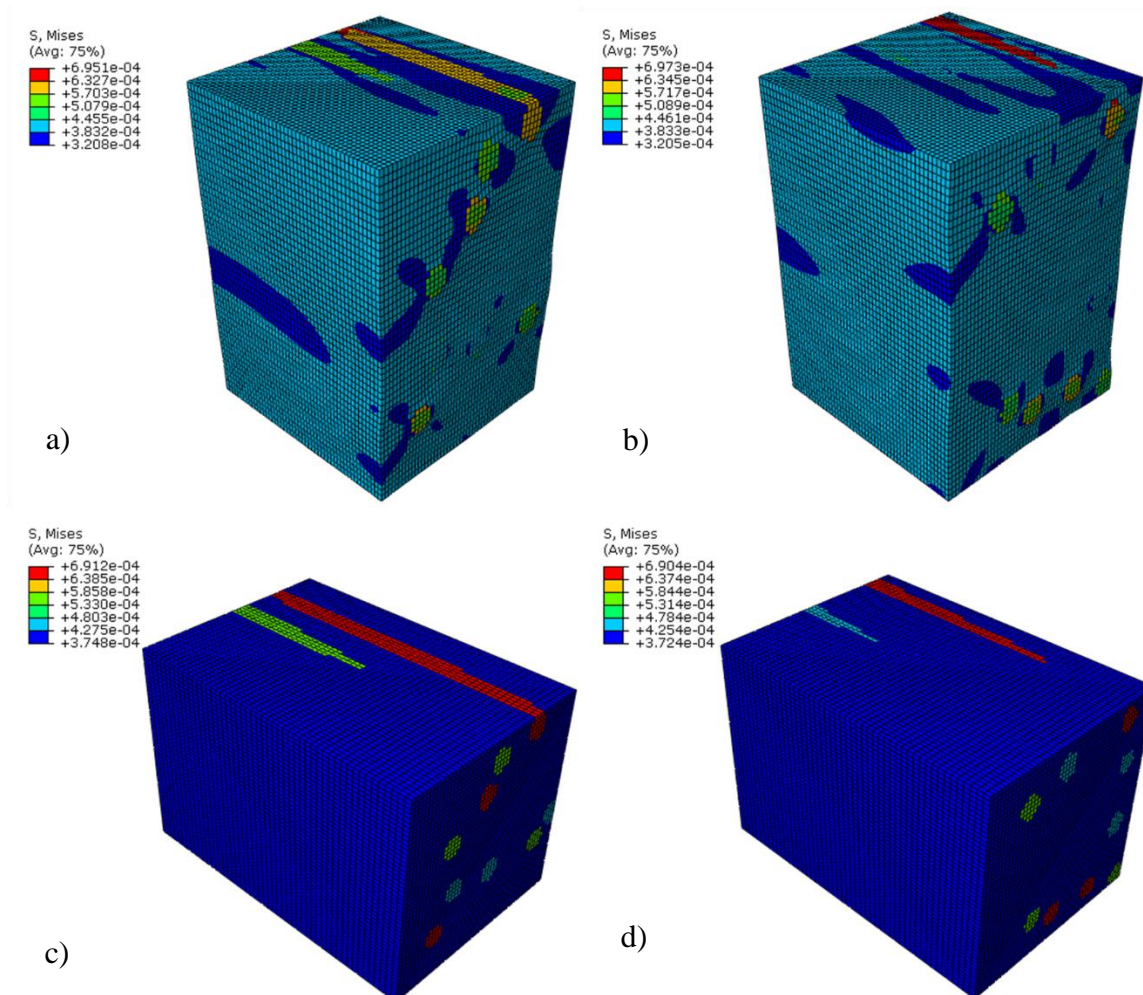


Figura 48. Contorno de esfuerzo de Von Misses para la microestructura de 50 micras de arista con carga paralela y perpendicular a los precipitados. a) la primera configuración sometida a carga perpendicular, b) la segunda configuración sometida a carga perpendicular, c) la primera configuración sometida a carga paralela y d) la segunda configuración sometida a carga paralela. Las unidades de esfuerzo son $\frac{N}{\mu m^2}$.

Es visible en la Figura 47 y Figura 48 que aunque el nivel de esfuerzos en las partes c) y d) es mayor en la matriz, ésta actúa de manera que distribuye el esfuerzo en los precipitados, y por esta razón posee un nivel de esfuerzos constante (razón por la que se muestra de un solo color) comparada con las partes a) y b) donde sí se pueden notar zonas localizadas de esfuerzo mayor.

De ABAQUS se obtuvo también la deformación equivalente o efectiva (PEEQ) que corresponde a la deformación plástica efectiva en la curva esfuerzo-deformación. En la Figura 49 se presentan los contornos de deformación equivalente (PEEQ), dada por la ecuación (9), de la microestructura de 33 micras de arista.

$$\bar{\varepsilon} = \left[\frac{2}{3} (\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \varepsilon_3^2) \right]^{1/2} \quad (9)$$

Donde ε_1 , ε_2 y ε_3 son las deformaciones principales (Dieter, 1986).

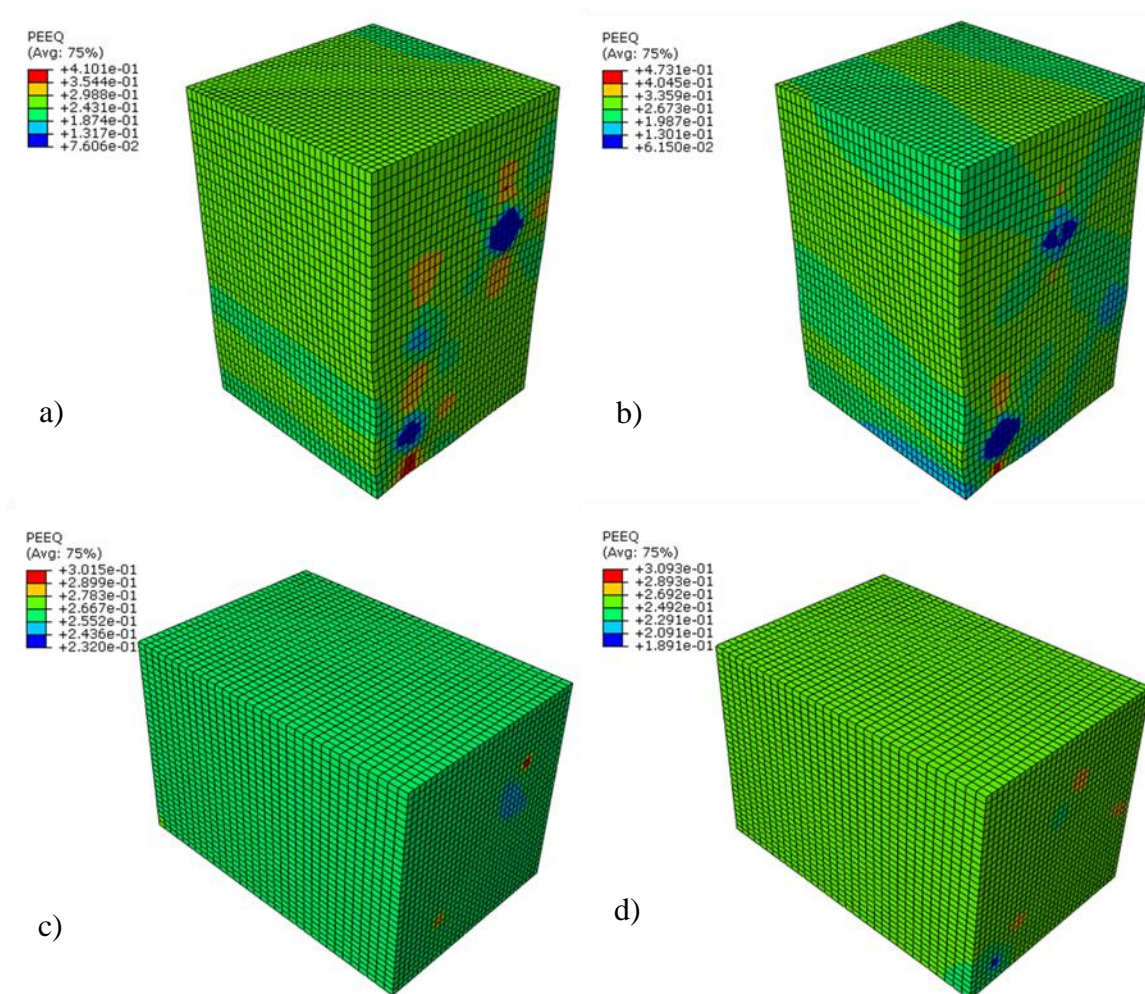


Figura 49. Contornos de deformación equivalente (PEEQ) para la microestructura de 33 micras de arista con carga paralela y perpendicular a los precipitados. a) la primera configuración sometida a carga perpendicular, b) la segunda configuración sometida a carga perpendicular, c) la primera configuración sometida a carga paralela y d) la segunda configuración sometida a carga paralela.

En la Figura 50 se presentan los contornos de deformación equivalente (PEEQ) de la microestructura de 50 micras de arista.

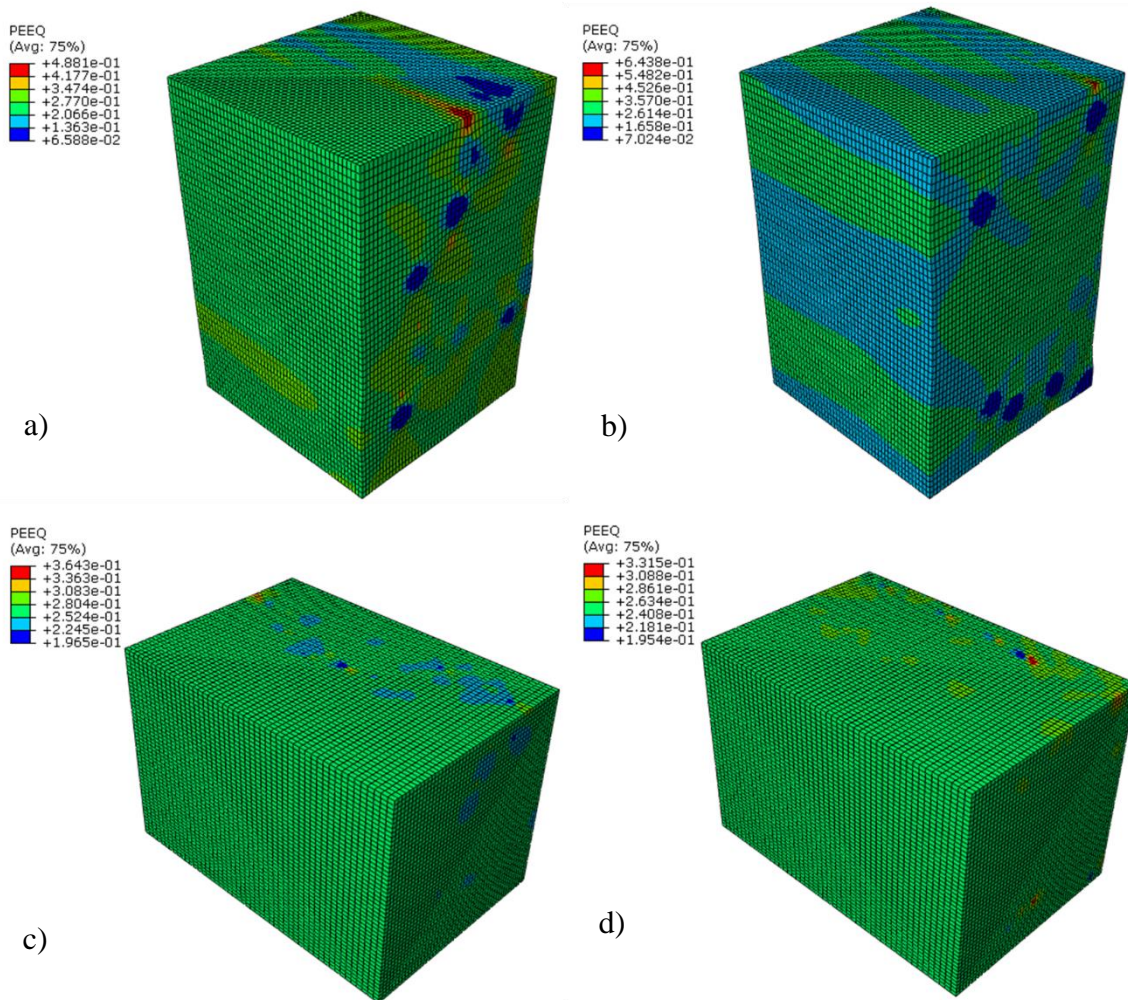


Figura 50. Contornos de deformación equivalente (PEEQ) para la microestructura de 50 micras de arista con carga paralela y perpendicular a los precipitados. a) la primera configuración sometida a carga perpendicular, b) la segunda configuración sometida a carga perpendicular, c) la primera configuración sometida a carga paralela y d) la segunda configuración sometida a carga paralela.

Es visible en la Figura 49 y Figura 50 que la deformación plástica efectiva es mayor para las partes a) y b), y además es mayor para la microestructura de 50 micras de arista que para la de 33 micras. Esto se debe a la distribución del precipitado en la matriz, ya que su posición tiene una gran influencia al momento de reforzar el agregado en general. Por otro lado las partes c) y d) poseen niveles de deformación sumamente parecidos entre ellas,

lo que sugiere que la alineación de los precipitados con la orientación de la fuerza tiene un efecto positivo ya que son los precipitados los que absorben la mayor energía y hacen que el compuesto tenga mayor resistencia. Al igual que en el caso del esfuerzo de Von Mises, la deformación plástica de la matriz es constante cuando la carga es paralela, lo cual difiere del caso perpendicular donde existen zonas de mayor deformación localizadas en la matriz.

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Después de haber realizado las simulaciones y haber obtenido los resultados mostrados previamente, estas son las conclusiones y recomendaciones más importante de este proyecto de investigación.

Conclusiones

1. Dado que el código DREAM3D genera archivos de extensión “.inp” que utiliza ABAQUS, la contribución del presente trabajo fue lograr el acoplamiento entre los códigos a través de la imposición de las adecuadas condiciones de contorno.
2. El comportamiento del compuesto es prácticamente parecido al de la matriz para todos los casos simulados, aunque los precipitados se comporten de manera distinta y en ciertos casos tengan niveles de esfuerzo sumamente altos como se muestra en la Figura 40. Esto se debe a que el porcentaje de precipitado analizado en todos los escenarios es del 30% comparado con el 70% de la matriz.
3. El modelo de endurecimiento basado en dislocaciones concuerda con los resultados obtenidos de la simulación de todos los escenarios, lo cual es visible en la Figura 40. Esto realza aún más la importancia de este modelo y corrobora que su postulación tiene buenas bases y es aplicable.
4. Para una dirección de carga paralela a la orientación de los precipitados, los que presentan un comportamiento esfuerzo-deformación más elevado y consecuentemente mayor energía de absorción, son aquellos que pertenecían a la dirección de deslizamiento [111], tal como se muestra en la Figura 41.
5. El comportamiento de la matriz fue prácticamente constante e independiente del tipo de desplazamiento aplicado y de la longitud de arista del cubo analizado, por lo que se concluye que el diámetro de grano de la matriz, aunque parte del modelo constitutivo utilizado, no es un factor importante al momento de dictar las propiedades finales del compuesto. Es importante recordar que el diámetro del precipitado fue fijado en 16 micras, mientras que el diámetro de grano de la matriz depende de la longitud de arista ensayada. Al aplicar una carga paralela a la orientación de los precipitados se observa que la matriz fluye de una manera más

- suave que en su contraparte. Este comportamiento se muestra en la ampliación de la Figura 44.
6. El comportamiento del compuesto como un todo no resultó influenciado ni por la longitud de la arista ni por la orientación del desplazamiento aplicado. Las propiedades mecánicas del compuesto (límite elástico, esfuerzo máximo, módulo de Young y deformación máxima) no fueron alteradas y se mantuvieron constantes para todos los escenarios ensayados. Este fenómeno es visible en la Figura 45 y Figura 46.
 7. En iguales condiciones de aplicación de carga (carga paralela o carga perpendicular a la dirección del eje axial de los precipitados) se observa que la aplicación de una carga paralela es la que provoca niveles de esfuerzos de Von Misses más altos en todas las fases del compuesto, así como una menor deformación efectiva ya que los precipitados actúan como refuerzos. La matriz en esta situación distribuye de mejor manera el esfuerzo provocado por la presencia de los precipitados como es mostrado en las partes c) y d) de la Figura 47 y Figura 48 y posee niveles de deformación plástica más constantes como se observa en las partes c) y d) de la Figura 49 y Figura 50.

En el caso de aplicación de la carga perpendicular se evidencia zonas localizadas de esfuerzos (ver las partes a) y b) de la Figura 47 y Figura 48) y de deformación (ver partes a) y b) de la Figura 49 y Figura 50) alrededor de los precipitados.

Recomendaciones

1. Se recomienda que en futuras investigaciones se varíe la fracción volumétrica del compuesto (matriz y precipitado) para documentar la influencia de cada uno de sus micro-constituyentes en las propiedades del material.
2. Se recomienda probar la influencia de la morfología de las fases para estudiar su influencia en el comportamiento mecánico del compuesto.
3. Se recomienda mejorar el poder computacional actual del Departamento de Ingeniería Mecánica para seguir realizando proyectos de investigación contundentes y de gran impacto en esta área.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Achayra, A., & Beaudoin, A. J. (2000). Grain-size effect in viscoplastic polycrystals at moderate strains. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*(10), 2213–2230. doi:10.1016/S0022-5096(00)00013-2
- Ashby, M. F. (1970). The deformation of plastically non-homogeneous materials. *21*(170).
- Beer, F. P., Jhonston, R., Dewolf, J. T., & Mazurek, D. F. (2009). *Mecánica de Materiales*. McGraw-Hill.
- Benedetti, I., & Barbe, F. (2014). Modelling Polycrystalline Materials: An Overview of. *5*(1).
- Black, J. T., & Kosher, R. A. (2008). *Materials & Processes in Manufacturing*. Jhon Willwy & Sons.
- Bonifaz, A. E. (2000). Modelo elastoplastico de estructuras bifasicas policristalinas.
- Bonifaz, E. (2015). Finite Element Modeling to Simulate the Elasto-Plastic Behavior of Polycrystalline in 718.
- Budynas, R. G., & Nisbett, J. K. (s.f.). *Shigle's Mechanical Engineerign Design*. 2006: McGraw-Hill.
- Buessler, P. (s.f.). Modelling of mechanical properties and local deformation of high strength multi-phase steels.
- Cailletaud, G., Forest, S., Jeulin, D., Feyel, F., Galliet, I., Mounoury, V., & Quilici, S. (2003). Some elements of microstructural mechanics. *27*(3).
- Callister, W. D., & Rethwishc, D. G. (2009). *Materials Science and Engineering an Introduction*.
- Dieter, G. E. (1986). *Mechanical Metallurgy*. McGraw-Hill Book Company.

- Dingley, D. J., & McLEAn, D. (1967). Components of the flow stress of iron. *15*(5), 885-901.
- Dunne, F., & Petrinic, N. (2005). *Introduction to Computational Plasticity*. OXFORD University Press.
- Estrin, Y. (1998). Dislocation theory based constitutive modelling: foundations and applications. *80-81*, 33-39.
- Estrin, Y., & Mecking, H. (1984). A unified phenomenological description of work hardening and creep based on. *32*(1), 57-70.
- Groeber, M. A., & Jackson, M. A. (2014). DREAM.3D: A Digital Representation Environment for the Analysis of Microstructure in 3D. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*. doi:10.1186/2193-9772-3-5
- Meakin, J. D., & Petch, N. J. (1974). Strain-hardening of polycrystals: the a-brasses. *29*(5). doi:10.1080/14786437408226599
- Mecking, H., & Kocks, U. F. (1981). Kinetics of flow and strain-hardening. *29*(11), 1865-1875. doi:10.1016/0001-6160(81)90112-7
- Narutany, T., & Takamura, J. (1991). Grain-size strengthening in terms of dislocation density measured by resistivity. *39*(8), 2037-2049. doi:10.1016/0956-7151(91)90173-X
- Reed, R. C. (2006). *The Superalloys Fundamentals and Applications*. Cambridge University Press.
- Simonovski, I., & Clzelj, L. (2012). *Grain-scale modeling approaches for polycrystalline aggregates, in Polycrystalline Materials — Theoretical and Practical Aspects*. Obtenido de <http://www.intechopen.com/books/polycrystalline-materials-theoretical-and-practical-aspects/grain-scale-modelling-approaches-for-polycrystalline-aggregates>

ANEXO A: UNIÓN DE LOS ARCHIVOS GENERADOS POR DREAM3D

```
*Heading
Cylinder50_abq
** Job name : Cylinder50_abq
** Generated by : DREAM3DLib Version 5.1.759.20580e6
** Preprint, echo = NO, model = NO, history = NO, contact = NO
**
** -----Geometry-----
**
** *Include, Input = Cylinder50_abq_nodes.inp
** *Include, Input = Cylinder50_abq_elems.inp
** *Include, Input = Cylinder50_abq_elset.inp
** *Include, Input = Cylinder50_abq_ph.inp
** *Include, Input = datos_cara1
** *Include, Input = datos_cara2
** *Include, Input = datos_cara3
** *Include, Input = datos_cara4
** *Include, Input = datos_cara5
** *Include, Input = datos_cara6
**
** -----
**
```

ANEXO B: ARCHIVO GENERAL

<pre> *HEADING **----- ---- **Modelo caras libres **Desplazamiento hasta 15 um (30% de Lo). Lo=50 um. **----- ---- *RESTART, WRITE, FREQUENCY=1 *INCLUDE,INPUT=Cylinder50_abq.inp *NODE,NSET=DUMMY 500000,30.,30. *ELSET, ELSET=SELECCIONADOS 66950,91600,86000,53800 **----- **Propiedades **----- *Solid Section, elset=MATRIX, material=MATRIX_MAT 1., *MATERIAL,NAME=MATRIX_MAT *ELASTIC 207e-3,0.26 *PLASTIC 0.00016437,0 0.000166629,0.001 0.000168829,0.002 0.000170982,0.003 0.000173095,0.004 0.000175175,0.005 0.000177225,0.006 0.000179248,0.007 0.000181247,0.008 0.000183222,0.009 0.000185175,0.01 0.000203676,0.02 0.000220573,0.03 0.000236076,0.04 0.000250323,0.05 0.000263424,0.06 0.000275477,0.07 0.000286569,0.08 0.000296777,0.09 0.000306174,0.1 0.000314825,0.11 0.000322792,0.12 0.000330128,0.13 0.000336886,0.14 0.000343112,0.15 0.000348848,0.16 0.000354134,0.17 0.000359007,0.18 </pre>	<pre> 0.000363499,0.19 0.000367641,0.2 0.000371462,0.21 0.000374987,0.22 0.00037824,0.23 0.000381244,0.24 0.000384017,0.25 0.00038658,0.26 0.000388947,0.27 0.000391137,0.28 0.000393162,0.29 0.000395035,0.3 0.00039677,0.31 0.000398378,0.32 0.000399868,0.33 **----- ** Section: Grain2 *Solid Section, elset=DIR111, material=DIR111_MAT 1., *MATERIAL,NAME=DIR111_MAT *ELASTIC 294e-3,0.26 *PLASTIC 0.000320483,0 0.000324446,0.001 0.000328236,0.002 0.0003319,0.003 0.000335465,0.004 0.000338948,0.005 0.000342363,0.006 0.000345718,0.007 0.000349019,0.008 0.000352272,0.009 0.000355481,0.01 0.000385577,0.02 0.000412767,0.03 0.000437536,0.04 0.000460162,0.05 0.000480858,0.06 0.000499801,0.07 0.000517149,0.08 0.000533041,0.09 0.000547606,0.1 0.000560958,0.11 0.000573203,0.12 0.000584435,0.13 0.000594742,0.14 0.000604203,0.15 0.000612891,0.16 0.000620873,0.17 0.00062821,0.18 </pre>
--	---

```

0.000634956,0.19
0.000641162,0.2
0.000646875,0.21
0.000652137,0.22
0.000656986,0.23
0.000661459,0.24
0.000665587,0.25
0.000669401,0.26
0.000672926,0.27
0.000676188,0.28
0.00067921,0.29
0.000682011,0.3
0.000684612,0.31
0.000687028,0.32
0.000689277,0.33
** -----
** Section: Grain3
*Solid      Section,      elset=DIR100,
material=DIR100_MAT
1.,
*MATERIAL,NAME=DIR100_MAT
*ELASTIC
125e-3,0.26
*PLASTIC
0.000305402,0
0.000306999,0.001
0.000308528,0.002
0.000310005,0.003
0.000311442,0.004
0.000312847,0.005
0.000314223,0.006
0.000315575,0.007
0.000316906,0.008
0.000318217,0.009
0.00031951,0.01
0.000331649,0.02
0.000342635,0.03
0.000352665,0.04
0.000361849,0.05
0.00037027,0.06
0.000377997,0.07
0.000385091,0.08
0.000391606,0.09
0.000397592,0.1
0.000403092,0.11
0.000408149,0.12
0.000412799,0.13
0.000417077,0.14
0.000421013,0.15
0.000424636,0.16
0.000427973,0.17
0.000431047,0.18
0.00043388,0.19
0.000436492,0.2
0.000438902,0.21
0.000441126,0.22
0.000443181,0.23
0.00044508,0.24
0.000446836,0.25
0.000448462,0.26
0.000449967,0.27
0.000451363,0.28
0.000452658,0.29
0.000453861,0.3
0.000454979,0.31
0.000456019,0.32
0.000456989,0.33
** -----
** Section: Grain4
*Solid      Section,      elset=DIR110,
material=DIR110_MAT
1.,
*MATERIAL,NAME=DIR110_MAT
*ELASTIC
220e-3,0.26
*PLASTIC
0.000313266,0
0.000316025,0.001
0.000318664,0.002
0.000321215,0.003
0.000323696,0.004
0.000326121,0.005
0.000328497,0.006
0.000330832,0.007
0.000333129,0.008
0.000335392,0.009
0.000337625,0.01
0.000358585,0.02
0.000377568,0.03
0.000394912,0.04
0.000410806,0.05
0.000425392,0.06
0.000438788,0.07
0.000451097,0.08
0.000462411,0.09
0.000472815,0.1
0.000482385,0.11
0.00049119,0.12
0.000499294,0.13
0.000506756,0.14
0.000513627,0.15
0.000519958,0.16
0.000525793,0.17
0.000531172,0.18
0.000536135,0.19
0.000540714,0.2
0.000544942,0.21
0.000548848,0.22
0.000552459,0.23
0.000555798,0.24

```

```
0.000558889,0.25
0.000561751,0.26
0.000564404,0.27
0.000566865,0.28
0.00056915,0.29
0.000571273,0.3
0.000573248,0.31
0.000575087,0.32
0.000576801,0.33
** -----
** -----
**Imposiciones de desplazamiento
**EQUATION
2
CARA2,2,1.0,500000,2,-1.0
**-----Step 1
*STEP,INC=200,NLGEOM
*STATIC
0.003,1.0,1.E-7,0.3
*CONTROLS,PARAMETERS=FIELD,FIELD
=DISPLACEMENT
5.E-1,1.0,1.E-1,,,1.E-4
*BOUNDARY
CARA5,XSYMM
CARA1,YSYMM
CARA6,ZSYMM
DUMMY,2,2,15
*NODE PRINT,NSET=DUMMY,FREQ=1
U2,RF2
*EL PRINT,ELSET=SELECCIONADOS,
FREQ=1,SUMMARY=NO,POSITION=CENT
ROIDAL
E22,S22
*OUTPUT,FIELD,FREQ=1,VARIABLE=ALL
*ELEMENT OUTPUT,ELSET=cube
*OUTPUT,HISTORY,FREQ=1,VARIABLE=
ALL
*EL FILE
COORD
*ENDSTEP
```