UN MODELO NUMÉRICO PARA ANALIZAR LOS MICROMECANISMOS DE DEFORMACIÓN DE FIELTROS DE POLIETILENO

C. González[1], J. LLorca[1], I. Romero[2]

[1]Departamento de Ciencia de Materiales. Universidad Politécnica de Madrid.
E. T. S. de Ingenieros de Caminos. 28040 Madrid

[2]Departamento de Mecánica de Medios Continuos. Universidad Politécnica de Madrid.
E. T. S. de Ingenieros de Caminos. 28040 Madrid

Resumen. Se ha desarrollado un modelo numérico para simular el comportamiento mecánico de fieltros. El material se representa por una red bidimensional de fibras rectas de longitud finita. Las intersecciones de las fibras forman los nodos del modelo. Los nodos adyacentes están conectados entre sí mediante barras que transmiten la carga en la dirección de la fibra. Además, se añadieron elementos de tipo muelle que penalizaron el giro entre dos fibras colindantes. El modelo se aplicó al estudio de los mecanismos de deformación de un fieltro de por fibras de polietileno deformado en tracción. Los resultados de la simulación demostraron que la orientación de las fibras con respecto al eje de aplicación de la carga y su reorientación durante la deformación juegan un papel crucial en la deformación de estos materiales.

Abstract. A model was developed to simulate the mechanical behavior of non-woven felts. The material was represented as a bidimensional network of straight fibres of finite length. The intersections between fibres formed the nodes of the model. Adjacent nodes were connected through bars that transferred load in the fibre direction. Spring elements were also added to penalize the variation of the angle between neighbour fibres. The model was applied to study the deformation mechanism of a non-woven felt made up of polyethylene fibres deformed in tension. The simulation results showed that the initial fibre orientation with respect to the load axis and their reorientation during deformation played a crucial role in the mechanical behaviour of these materials.

1. INTRODUCCIÓN

En el estado actual del desarrollo tecnológico, los materiales con mayor resistencia mecánica se fabrican en forma de fibras de pequeño diámetro [1]. Las fibras no se usan aisladamente sino en forma de telas. Las telas más habituales son los tejidos, donde fibras individuales (o haces de fibras) se entrelazan para formar estructuras bidimensionales o tridimensionales. La fabricación de los tejidos es costosa y – en ocasiones – se sustituye por una alternativa más barata: los fieltros. En los fieltros, las fibras se disponen aleatoriamente en un plano y se unen entre sí en ciertos puntos de anclaje mediante la aplicación de calor o imbricando las fibras mediante el punzonamiento mecánico con agujas [2,3].

Normalmente, las telas se infiltran con una matriz para lograr estanqueidad, mantener las fibras orientadas en las direcciones adecuadas, distribuir las tensiones entre ellas y protegerlas del ataque químico y de la abrasión, dando lugar a un material compuesto tradicional. Sin embargo, la presencia de la matriz no es siempre necesaria y existe muchos ejemplos de la aplicación directa de telas sin infiltrar en elementos estructurales. En este ámbito, los fieltros – que tienen un coste de fabricación muy inferior a los tejidos – se están comenzando a utilizar como textiles ignífugos, geotéxtiles y como elementos de protección frente al impacto de fragmentos [4].

Se han desarrollado algunos modelos para predecir las propiedades mecánicas de los fieltros a partir de las propiedades mecánicas de las fibras, su distribución y orientación espacial, etc. Los esfuerzos más notables en esta dirección se deben a Bais-Singh y Goswami [5] que tratan los fieltros como una sucesión finita de láminas. Las fibras tienen la misma orientación en cada lámina, cuyo comportamiento responde al de una lámina elástica ortótropa, y la deformación del fieltro se puede estudiar a partir de la teoría clásica de los laminados. Kim y Purdeyhimi [6] desarrollaron otro modelo donde las fibras se orientan según funciones de probabilidad obtenidas de imágenes de reales de tejidos. Las fibras de longitud indefinida se anclan de los extremos del tejido y no interaccionan con el resto de fibras del modelo. Finalmente, Termonia [7] desarrolló un modelo computacional más elaborado, que utiliza un esquema de diferencias finitas para obtener la respuesta mecánica en tracción de un tejido de fibras de polietileno ancladas térmicamente. El modelo tiene en cuenta la longitud finita de las fibras, la interacción en los puntos de anclaje, la fractura de las fibras durante la deformación y la decohesión entre las capas del fieltro. Sin embargo, sólo garantiza el equilibrio mecánico de los nodos del modelo según la dirección de aplicación de la carga.

En el presente estudio se ha desarrollado un modelo de elementos finitos bidimensional que garantiza el equilibrio mecánico de los nodos del modelo en las dos direcciones del plano, tiene en cuenta la longitud finita de las fibras y la interacción entre ellas. El modelo se ha aplicado para estudiar la deformación elástica de un fieltro de fibras de polietileno de ultra-alto peso molecular.

2. MODELO GEOMETRICO DEL FIELTRO

El fieltro se ha representado mediante una red formada por la superposición de N fibras rectas de longitud L. Las fibras están homogéneamente distribuidas en una superficie de lados B y H, Figura 1. Los centros geométricos de las fibras se distribuyeron homogéneamente en la superficie del tejido y responden a una distribución aleatoria uniforme. Basta, por tanto, con generar una distribución normalizada de $2N$ números aleatorios. Sin embargo, la distribución de las orientaciones de las fibras obedeció a una función de probabilidad que permite controlar la anisotropía del material. Khun y Grun [8] describieron estadísticamente la orientación de las cadenas de un polímero amorfo tras sufrir una deformación en la dirección de aplicación de la carga dada por λ

$$f(\lambda,\theta)=\frac{\lambda^3}{k(\cos^2\theta+\lambda^3\sin^2\theta)^{3/2}} \qquad (1)$$

donde θ es al ángulo que forma la fibra con una dirección fija del plano (figura 1) y k es una constante que se determina con la condición,

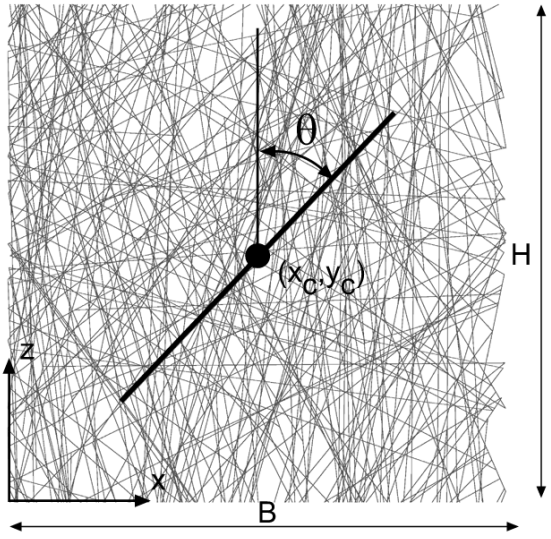


Fig. 1. Red bidimensional que representa el fieltro y definición de la posición de una fibra.

$$\int_{-\pi}^{\pi} f(\lambda,\theta)d\theta=1 \qquad (2)$$

En nuestro caso, λ es un parámetro libre que controla la distribución de las orientaciones de las fibras con respecto a una dirección (λ = 1 corresponde a una distribución aleatoria uniforme). La distribución estadística de N ángulos θ dictada por la ecuación (1) se determinó numéricamente a partir de la función de probabilidad acumulada $F(\lambda,\theta)$,

$$F(\lambda,\theta)=\int_{-\pi}^{\theta} f(\lambda,\theta)d\theta \qquad (3)$$

El valor de cada ángulo θ se obtuvo resolviendo la ecuación

$$F^{-1}(\lambda,\theta)=p \qquad (4)$$

donde p es un número aleatorio comprendido entre 0 y 1. El algoritmo de generación de la red bidimensional es el siguiente: se lanza la fibra i-ésima cuyo centro geométrico (x_c,y_c) y ángulo θ respecto a un eje obedecen a las distribuciones estadísticas descritas más arriba. Se calcula la intersección de esta fibra con el resto de fibras del modelo que ya han sido lanzadas (dependiendo de su posición y orientación la intersección puede no existir), Figura 2, y cada punto de intersección es un nodo del modelo. Dos nodos consecutivos que pertenezcan a una misma fibra se unen mediante una barra, que debe transmitir los esfuerzos en la dirección de la fibra. Los extremos de las fibras que no están conectados son eliminados sistemáticamente del modelo pues no contribuyen al comportamiento mecánico del fieltro.

Posteriormente, se añaden elementos de tipo muelle en la intersección entre dos barras. Estos elementos penalizan la variación del ángulo α (Figura 2) y permiten simular la unión elástica que existe en el anclaje entre las fibras debido al proceso de fabricación del fieltro.

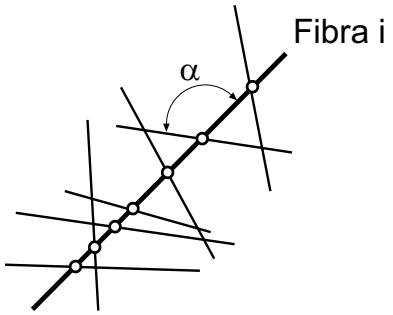


Fig. 2. Intersección de la fibra i-ésima con el resto de fibras del modelo.

3. SIMULACION DE LA DEFORMACION

La deformación se aplicó incrementalmente sobre el fieltro imponiendo a los nodos situados en la base superior ($z = H$) un desplazamiento creciente δ en la dirección z mientras se mantienen fijos los nodos de la base inferior ($z = 0$). La simulación del proceso de deformación requiere determinar la fuerza que transmite cada barra y, como resultado, la fuerza de tracción F necesaria que deformar el tejido una magnitud δ. El algoritmo de cálculo que permite llegar al equilibrio mecánico en los nodos de la retícula se describe a continuación.

3.2 Relaciones cinemáticas de los elementos

La Figura 3 muestra dos elementos de tipo barra en el plano xz en su configuración original y después de deformarse. También se ha dibujado un elemento tipo muelle que coacciona la variación del ángulo α entre las dos barras.

Sean $\mathbf{x}_1^T=(x_1,z_1)$, $\mathbf{x}_2^T=(x_2,z_2)$ y $\mathbf{x}_3^T=(x_3,z_3)$ las coordenadas de los nodos y $\mathbf{p}_1^T=(u_1,w_1)$, $\mathbf{p}_2^T=(u_1,w_1)$ y $\mathbf{p}_3^T=(u_3,w_3)$ sus respectivos desplazamientos. Las coordenadas de los nodos del modelo después de la deformación, $\mathbf{x}'$, se pueden calcular como

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{p} \qquad (5)$$

Sean $\mathbf{e}_1$ y $\mathbf{e}_2$ sendos vectores unitarios referidos a la configuración geométrica deformada y orientados según la dirección longitudinal de las barras 13 y 23 respectivamente. Los vectores $\underline{\mathbf{e}}_1$ y $\underline{\mathbf{e}}_2$ tienen el mismo significado físico pero están referidos a la configuración geométrica sin deformar. La deformación longitudinal de las barras se puede calcular como sigue

$$\varepsilon=\ln\left[\frac{t}{t_0}\right] \qquad (6)$$

donde t_0 y t son las longitudes de la barra en la configuración geométrica inicial y deformada, respectivamente. Además, los ángulos α_0 y α que forman las barras 13 y 23 en la configuración geométrica original y deformada se puede calcular como

$$\cos\alpha_0=\underline{\mathbf{e}}_1\cdot\underline{\mathbf{e}}_2 \quad \cos\alpha=\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2 \qquad (7)$$

3.2 Matriz de rigidez del elemento y de la red

Cada barra puede transmitir una fuerza F en su dirección longitudinal. La relación entre esta fuerza y los correspondientes desplazamientos del elemento se

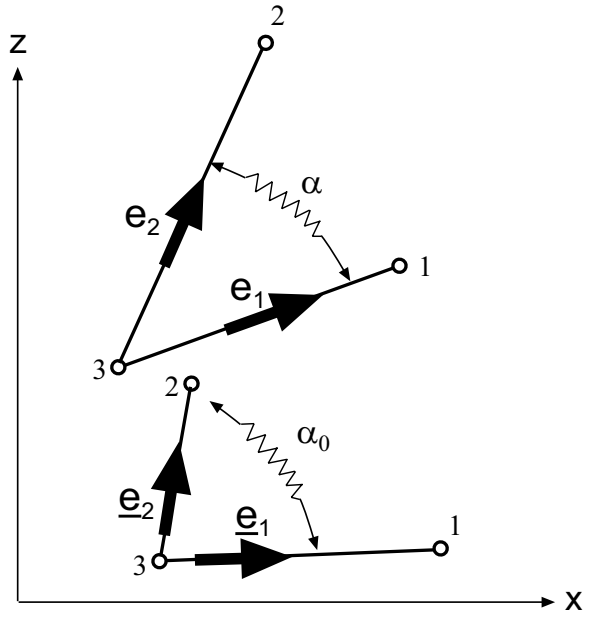


Fig. 3. Elementos barra que transmiten carga en la dirección longitudinal de cada barra y elementos muelle que penalizan la variación del ángulo entre las dos barras.

determinan suponiendo que el material de la barra es elástico, lineal e incompresible con un módulo de elasticidad E. La sección transversal A de la barra en la configuración geométrica deformada es, por tanto,

$$A=A_0\frac{t_0}{t} \qquad (8)$$

donde A_0 es la sección inicial. La fuerza normal transmitida por la barra, F, en función de su longitud se puede calcular como

$$F=\sigma A=EA\varepsilon=EA_0\frac{t_0}{t}\ln\left[\frac{t}{t_0}\right] \qquad (9)$$

Evidentemente, la relación entre la fuerza soportada por una barra y su alargamiento no es lineal y presenta un máximo en la fuerza cuando la longitud de la barra alcanza el valor $t = et_0$. La máxima fuerza transmitida por la barra es

$$F_{max}=\tfrac{1}{e}EA_0 \qquad (10)$$

Los vectores de fuerzas nodales que corresponden a los dos elementos barra dibujados en la Figura 3 se pueden escribir como [9]

$$\begin{aligned}\mathbf{q}_1^{barra}&=EA\varepsilon_1\mathbf{e}_1\\ \mathbf{q}_2^{barra}&=EA\varepsilon_2\mathbf{e}_2\\ \mathbf{q}_3^{barra}&=-(\mathbf{q}_1^{barra}+\mathbf{q}_2^{barra})\end{aligned} \qquad (11)$$

Las fuerzas introducidas por los elementos muelle se pueden calcular suponiendo que la energía elástica del muelle procede de un potencial elástico de la forma

$$W(\alpha-\alpha_0)=\frac{1}{2}K(\alpha-\alpha_0)^2 \qquad (12)$$

donde K es la constante de rigidez del muelle. Diferenciando esta expresión con respecto a los desplazamientos de los tres nodos obtenemos las fuerzas concentradas en los nodos

$$\mathbf{q}_i^{muelle}=W'(\alpha)\frac{\partial\alpha}{\partial\mathbf{x}_i'} \quad (i=1,2,3) \qquad (13)$$

Finalmente, introduciendo en (13) las derivadas del ángulo α (7) con respecto a los desplazamientos nodales llegamos a las siguientes expresiones [10]

$$\begin{aligned}
\mathbf{q}_1^{muelle}&=\frac{K(\alpha-\alpha_0)}{t_1\,\sin\alpha}(\cos\alpha\,\mathbf{e}_1-\mathbf{e}_2)\\
\mathbf{q}_2^{muelle}&=\frac{K(\alpha-\alpha_0)}{t_2\,\sin\alpha}(\cos\alpha\,\mathbf{e}_2-\mathbf{e}_1)\\
\mathbf{q}_3^{muelle}&=-(\mathbf{q}_1^{muelle}+\mathbf{q}_2^{muelle})
\end{aligned} \qquad (14)$$

Una vez conocidas las relaciones entre las fuerzas y los desplazamientos nodales, es inmediato calcular las matrices de rigidez de los elementos barra y muelle sin más que diferenciar los vectores de fuerzas de las ecuaciones (11) y (14) con respecto a los desplazamientos nodales,

$$\mathbf{K}_{barra}=\frac{\partial\mathbf{q}_{barra}}{\partial\mathbf{p}} \text{ y } \mathbf{K}_{muelle}=\frac{\partial\mathbf{q}_{muelle}}{\partial\mathbf{p}} \qquad (15)$$

La matriz de rigidez de toda la estructura que relaciona las fuerzas con los desplazamientos nodales se obtiene ensamblando las matrices de rigidez de todas y cada una de las barras y muelles del modelo. Los coeficientes no nulos de esta matriz se almacenan en forma de vector para minimizar la memoria y el tiempo de cálculo. Los desplazamientos en la situación de equilibrio y las fuerzas transmitidas por cada elemento se obtienen resolviendo el sistema de ecuaciones no lineal teniendo en cuenta las condiciones de contorno impuestas sobre la retícula.

La resolución del sistema de ecuaciones no es un problema trivial porque las grandes deformaciones dan lugar a un problema extremadamente no lineal. Se utilizó el método de Newton-Raphson, que parte de una solución inicial aproximada para el campo de desplazamientos nodales (la solución de equilibrio del incremento anterior), y se acerca a la solución exacta mediante iteraciones sucesivas. En cada una de las iteraciones se necesita invertir la matriz de rigidez de la red. Para ello se utiliza la técnica de la descomposición de la matriz rigidez en los factores LU. Una implementación muy eficiente de este método de resolución de ecuaciones se puede encontrar en la librería de subrutinas SUPERLU [11] que en la actualidad es una de las más utilizadas en mecánica computacional y que permite el cálculo distribuido entre procesadores.

El algoritmo de generación de la retícula descrito en el apartado 1 presenta dos serios inconvenientes. En primer lugar, la matriz de rigidez no tiene una estructura en banda que permita la eficiencia máxima en la resolución del sistema de ecuaciones. Para evitar este inconveniente se renumeraron previamente a cada cálculo los elementos y nodos del modelo. La librería de subrutinas METIS [12] está basada en la teoría de grafos permitiendo lograr que los términos de la matriz de conectividad de la estructura tengan una ordenación en banda. En segundo lugar, existen elementos barra y muelle cuyas con dimensiones son muy dispares dando lugar a una matriz de rigidez mal condicionada. Para solventar dicho inconveniente se colapsaron los nodos del modelo que se encontraban muy próximos entre sí sin desvirtuar la geometría original de la retícula. Los cálculos se llevaron a cabo en una estación de trabajo Compaq ES40 con 4 procesadores y 4Gb de memoria RAM. El código fuente, escrito en FORTRAN, no estaba paralelizado.

4. RESULTADOS

El modelo descrito más arriba se utilizó para calcular la curvas tensión-deformación de un fieltro de fibras de polietileno de ultra-alto peso molecular de longitud constante L = 20 mm, módulo de elasticidad E = 100 GPa y 10 micras de diámetro. Las dimensiones del fieltro eran 50x10 mm^2. La rigidez del muelle entre las fibras fue igual a $K = 10^{-5}EA_0$. Variaciones en el valor de esta constante de un orden de magnitud (por encima y por debajo) no ocasionaron diferencias sustanciales en el comportamiento del fieltro.

Se generaron redes con 300 fibras cuya orientación obedeció a la estadística descrita en la ecuación (1) tomando los valores λ = 1 (distribución isótropa de fibras), λ = 2 (fibras orientadas según el eje z) y λ = 2 (fibras orientadas según el eje x), Figura 1. Cada red estaba formada por unos 5000 nodos, 10000 barras y 20000 muelles.

Tradicionalmente, la comunidad de científicos que estudian las propiedades mecánicas de las telas utilizan el concepto de tensión específica por los problemas

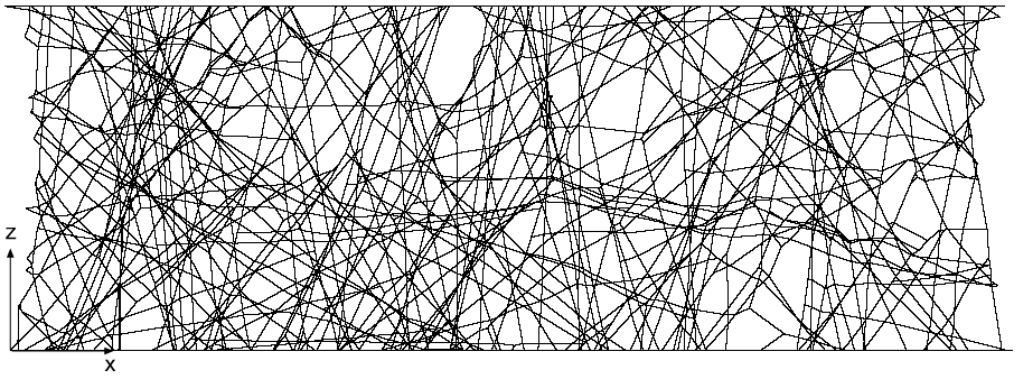


Fig. 5. Retícula del tejido con λ=1 para una deformación del 70%

relacionados con la medida del espesor. La tensión específica, $\tilde{\sigma}$, expresada en g/d (gramos por denier), se puede calcular con la siguiente expresión

$$\tilde{\sigma}(g/d) = \frac{F}{9000B\gamma} \qquad (16)$$

donde F es la fuerza que soporta el tejido, B su anchura y γ el peso específico superficial de tejido. El denier es una unidad de densidad lineal de la fibra que corresponde a la masa en gramos de 9000 metros de fibra. El peso específico del tejido se calculó numéricamente a partir de la longitud de fibra que existía en cada red y la densidad ρ = 980 Kg/m^3 de la fibra de polietileno.

Los resultados de las simulaciones del ensayo de tracción de las tres redes se han dibujado en la Figura 4. Se representaron las curvas tensión específica soportada por el tejido frente a la deformación ingenieril para los distintos valores de λ señalados más arriba. El comportamiento del tejido en todos los casos es claramente no lineal debido a las grandes deformaciones y a la no linealidad del comportamiento de la fibra. Los cálculos se interrumpieron en el instante en el que algunas de las barras alcanzaron la condición de inestabilidad dada por la ecuación (10) e impidieron la convergencia. La Figura 5 muestra la retícula del tejido isótropo en la configuración geométrica deformada hasta un 70%.

Las cargas que soportan las barras de la red presentan una distribución inhomogénea, tal y como se puede observar en la Figura 6 donde se ha dibujado la distribución de tensiones en las barras en los tres tejidos para una deformación ingenieril aplicada igual al 10%. Las cargas se adimensionalizaron con la carga que soportaría una fibra perfectamente alineada según la dirección de aplicación de la carga cuando se somete a la misma deformación. En todos los casos se puede observar que una fracción importante de las barras se encuentra en compresión. El modelo no incluye la posibilidad de pandeo por compresión de las barras. También se observó que existían barras cuya carga adimensionalizada era superior a la unidad. Este fenómeno se debe a un efecto de concentración de las cargas en nodos conectados a tres barras alineadas según la dirección de aplicación de la carga, Figura 5. También se puede observar como fibras que inicialmente eran rectas se curvan como consecuencia de la interacción con las fibras del resto del tejido.

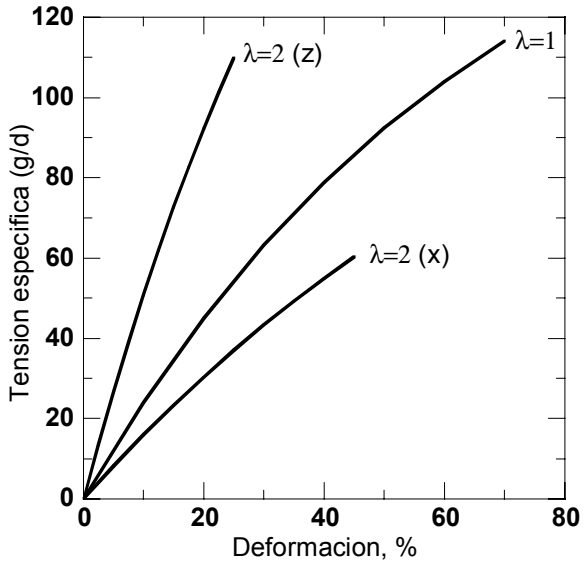


Fig. 4. Curvas tensión específica-deformación de los tejidos.

El efecto de la reorientación de las fibras juega un papel fundamental en los mecanismos de deformación de los tejidos. La figura muestra la evolución de las distribución de las cargas en el tejido con λ = 1 cuando la deformación ingenieril aplicada fue del 10, 40 y 70%. Las tres distribuciones son prácticamente coincidentes cuando la carga adimensional fue inferior a 0.5 (estas fibras se orientan en dirección casi perpendicular a la de solicitación). Sin embargo, el tramo final de la distribución difiere sustancialmente. Este efecto puede achacarse a la rotación de las barras por efecto de la deformación. Una comparación más detallada de la distribución presentada en la Figura 6 para el fieltro con λ = 2 según el eje z arroja indicios sobre la anisotropía generada por efecto de la deformación aplicada.

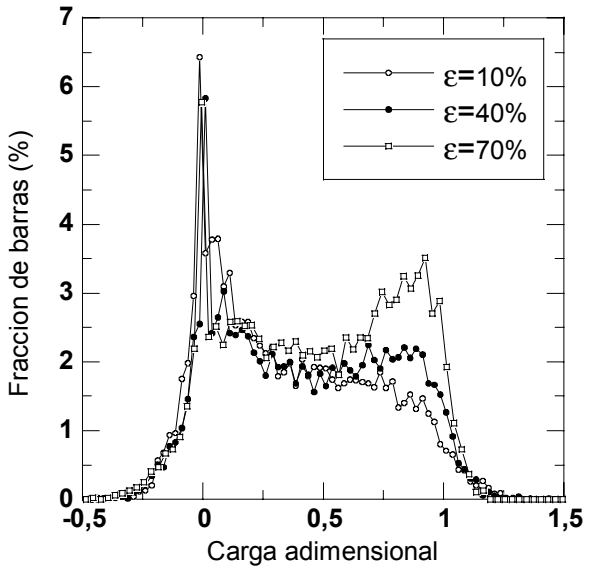


Fig. 6. Distribución de la fuerza transmitida por cada barra en función de la orientación de las fibras.

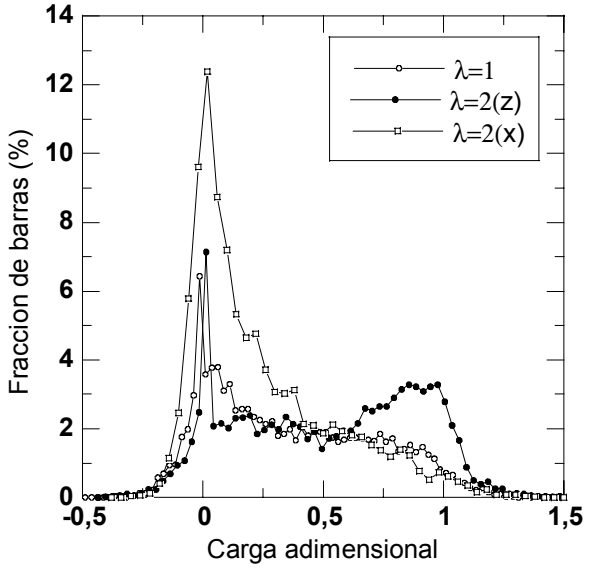


Fig. 7. Distribución de la fuerza transmitida por cada barra en función de la deformación del tejido.

5. CONCLUSIONES

Se ha desarrollado un modelo numérico para estudiar los micromecanismos de deformación de fieltros. El fieltro se representa por una superposición de fibras de igual longitud homogéneamente dispuestas sobre una superficie rectangular. La intersección de cada fibra con el resto permite generar una red de nodos y elementos. El equilibrio mecánico de la retícula se resolvió mediante el método de Newton-Raphson. El modelo se utilizó para estudiar las curvas tensión-deformación de fieltros en los que la orientación de sus fibras respondía a una cierta función de probabilidad. Los resultados mostraron que la disposición de las fibras juega un papel crucial en los mecanismos de deformación de este tipo de materiales.

Agradecimientos

Esta investigación ha sido financiada por el MCyT dentro del marco del proyecto MAT2000-1334.

6. REFERENCIAS

[1] M. Elices y J. LLorca (Eds.), *Fiber Fracture*, Elsevier (2002).

[2] K.K. Chawla, en *Fibrous materials*, Cambridge Solid State Series (1998).

[3] S.B. Warner, en *Fiber Science*, Prentice Hall State Series (1995).

[4] F. Gálvez, S. Chocron, A. Pintor, V. Sánchez-Gálvez., *Anales de Mecánica de Fractura,* **19,** 147-152 (2002).

[5] S. Bais-Singh y B.C. Goswami, *Textile Research Journal,* (1997).

[6] H.S. Kim y B. Pourdeyhimi, *Journal of textile and apparel. Technology and management,* **1,** 1-7 (2001).

[7] Y. Termonia, *Chemical Enginnering Science,* **52,** 3003-3009 (1997).

[8] W. Khun y F. Grun, *Kolloid Z.,* **101,** 248 (1947).

[9] M. A. Crisfield, *Non-linear Finite Element Analysis of Solids and Structures*, John Wiley & Sons (1991).

[10] C. González, J. Llorca, I. Romero, manuscrito en preparación.

[11] J. Demel, J. Gilbert y X. Li, Universidad de California, Berkeley (1999).

[12] G. Karypis y V.Kumar, Universidad de Minessota (1998).