



**UNIVERSIDAD DE ALMERÍA**  
ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR Y  
FACULTAD DE CIENCIAS EXPERIMENTALES.

**ELASTICIDAD DE GELES COLOIDALES MEDIANTE LA  
APLICACIÓN DE ELEMENTOS FINITOS.**

**PROYECTO FIN DE CARRERA DE INGENIERÍA DE MATERIALES  
MODALIDAD: TRABAJO DE INVESTIGACIÓN**

DEPARTAMENTO: QUÍMICA Y FÍSICA.  
AUTOR: D. ANTONIO ALVARO MELERO  
DIRECTOR: D. ANTONIO M. PUERTAS LÓPEZ

Almería, junio de 2014.

# **ELASTICIDAD DE GELES COLOIDALE MEDIANTE LA APLICACIÓN DE ELEMENTOS FINITOS.**

Memoria presentada por D. ANTONIO ALVARO MELERO para la defensa del Proyecto Fin de Carrera de Ingeniería de Materiales en la Modalidad de Trabajo de Investigación en la Escuela Politécnica Superior y Facultad de Ciencias Experimentales de la Universidad de Almería.

Almería, Junio de 2014

Fdo.: Antonio Alvaro Melero

Con el Vº Bº del Director del Proyecto:

Fdo.: Antonio M. Puertas López  
Departamento de Química y Física.

Universidad de Almería

## **AGRADECIMIENTOS**

A mi Familia y en especial a mis padres por el apoyo y paciencia que han tenido. Así como, a mi tutor de Proyecto, D. Antonio M. Puertas López por toda su dedicación y generosidad, así como al Dr. Joseba Albizuri por la ayuda desinteresada.

## INDICE

1. OBJETIVOS. ....	1
2. INTRODUCCIÓN. ....	2
2. 1 ANTECEDENTES. ....	5
2. 1. 1. SIMULACIÓN COMPUTACIONAL. ....	5
2. 1. 2. INTRODUCCIÓN A LOS ELEMENTOS FINITOS. ....	5
2. 1. 2. 1. Historia del método de los Elementos Finitos. ....	11
2. 1. 2. 2. Conceptos generales del método. ....	13
2. 1. 2. 3. Criterios de convergencia. ....	17
2. 1. 2. 4. Campo de deformaciones. ....	18
2. 1. 2. 5. Deformaciones unitarias. ....	20
2. 1. 2. 6. Estado de tensiones. Ecuación constitutiva. ....	22
2. 1. 2. 7. Ecuación de equilibrio de un elemento. ....	23
2. 1. 2. 8. Energía potencial total. ....	29
2. 1. 2. 9. Ecuación de equilibrio del conjunto. ....	31
2. 1. 2. 10. Condiciones de ligadura. ....	33
2. 1. 3. SISTEMAS COLOIDALES. ....	33
2. 1. 3. 1. Introducción. ....	33
2. 1. 3. 2. Movimiento de una partícula Coloidal. ....	39
2. 1. 3. 3. Geles y vidrios. ....	41
2. 1. 3. 4. Fuerzas entre partículas Coloidales. ....	43
2. 1. 3. 5. Simulaciones de sistemas Coloidales. ....	50
2. 1. 3. 6. Ahorro de tiempo de computación. ....	53
2. 1. 3. 7. Unidades reducidas. ....	55
2. 1. 3. 8. Diagrama de Fases. ....	58
2. 2. MOTIVACIÓN Y JUSTIFICACIÓN. ....	63

3. MATERIALES Y METODOS. ....	64
3. 1. MODELOS REALIZADOS EN ELEMENTOS FINITOS: ANSYS. ....	65
3. 2. MODELOS REALIZADOS CON DINÁMICA MOLECULAR. ....	76
4. RESULTADOS Y CONCLUSIONES. ....	80
4. 1. SIMULACIONES DE DINÁMICA MOLECULAR. ....	80
4. 2. SIMULACIONES DE ELEMENTOS FINITOS. ....	89
4. 2. 1. SIMULACIÓN MEDIANTE EL MODELO DE 11 NODOS EN 2D. ....	89
4. 2. 2. SIMULACIÓN MEDIANTE EL MODELO DE 1000 NODOS EN 3D. ....	92
4. 2. 3. SIMULACIÓN MEDIANTE EL MODELO DE 9000 NODOS EN 2D. ....	98
4. 2. 3. 1. Fuerzas volumétricas continuas. Configuración 01. ....	102
4. 2. 3. 2. Fuerzas volumétricas instantáneas. Configuración 01. ....	111
4. 2. 3. 3. Fuerzas volumétricas instantáneas- continuas. Configuración 04. .	115
4. 3. COMPARATIVA ENTRE MD Y MEF. ....	117
5. CONCLUSIONES. ....	119
6. BIBLIOGRAFIA. ....	121
7. ANEXOS. ....	123
7. 1. CÓDIGO PARA LAS SIMULACIONES CON DINÁMICA MOLECULAR. ...	123
7. 2. CÓDIGO PARA LAS SIMULACIONES EN ELEMENTOS FINITOS. ....	139
7. 2. 1. SIMULACIÓN PARA EL MODELO DE 1000 NODOS. ....	139
7. 2. 2. SIMULACIÓN PARA EL MODELO DE 9000 NODOS. ....	149
7. 3. CÓDIGO PARA LA INTERFASE MEDIANTE DINÁMICA MOLECULAR. ..	176



## 1. OBJETIVOS.

El objetivo de este Proyecto es estudiar el **COMPORTAMIENTO MECÁNICO** de un material viscoelástico compuesto por partículas coloidales, sobre el que se aplican una serie de fuerzas volumétricas, con el objeto de conocer el efecto que producen.

El sistema a estudiar es un Gel Coloidal, compuesto por partículas sólidas, que sienten entre sí una interacción atractiva suficientemente intensa como para que todo el sistema se comporte como un sólido. En nuestro caso, se aplicará una fuerza volumétrica que representa el peso del Gel y tratamos de reproducir el colapso de geles observados experimentalmente.

Este Proyecto abordara la resolución del problema mediante dos modalidades, una es la **Teoría de Elemento Finitos** y la otra es la simulación mediante **Dinámica Molecular**.

El estudio mediante la Teoría de Elementos Finitos, es el objetivo principal del presente Proyecto, y se va a llevar a cabo utilizando la herramienta comercial ANSYS, muy conocida para resolver cálculos estructurales de ingeniería. En este caso, sin embargo, el material a estudiar es muy heterogéneo y tiene un comportamiento viscoelástico, lo que lo sitúa fuera del rango de materiales con los que trabajan los paquetes comerciales.

Los resultados obtenidos mediante el método de los elementos finitos se compararán con los obtenidos mediante las simulaciones de dinámica molecular, y validar así la bondad del método. Para ello seguiremos una serie de pasos:

- Realización de Simulaciones de Dinámica Molecular, con el objeto de conocer el comportamiento del sistema que se desea reproducir.
- Búsqueda del elemento Finito, cuyas características puedan reflejar el comportamiento obtenido del sistema coloidal.
- Comparación de las dos modalidades, donde obtendremos las conclusiones



correspondientes, para decidir si la teoría de Elementos Finitos, puede simular el comportamiento de la Dinámica Molecular.



## 2. INTRODUCCIÓN.

Se presenta la memoria del Proyecto Fin de Carrera de ingeniería de Materiales, que se ha realizado en el Departamento de Química y Física, en la Escuela Politécnica Superior y Facultad de Ciencia Experimentales, de la Universidad de Almería, en la modalidad de **Trabajo de investigación**.

Este Proyecto se basa principalmente en “Simular el comportamiento de los Geles, mediante la Teoría de los Elementos Finitos”. Se utilizarán dos modelos para estudiar este comportamiento; en uno de ellos se simulará mediante dinámica molecular un sistema compuesto por partículas con una interacción atractiva entre ellas, mientras en el otro, los enlaces entre partículas se sustituyen por un elemento lineal, y se estudia el comportamiento global del sistema mediante la técnica de elementos finitos.

En el presente Proyecto vamos a estudiar con detalle geles coloidales sometidos a una fuerza volumétrica (que representa su propio peso). Como se explicará más adelante, un gel coloidal es un sólido amorfo formado por agregación (reversible o irreversiblemente) de partículas coloidales, que tiene un comportamiento viscoelástico. El comportamiento del sistema viene, por tanto, determinado por el enlace entre las partículas que lo componen, y que debe ser suficientemente intenso para que el sistema sea realmente sólido. Los geles coloidales entran dentro de la categoría de “materia blanda”, es decir, que sus módulos elásticos son muy bajos. Ésto provoca, además, que sean inestables a largo plazo y que se colapsen bajo su propio peso. Éste es el problema particular (la compresión de geles por una fuerza volumétrica) en el que centraremos nuestro estudio mediante las dos técnicas ya mencionadas.

El trabajo realizado sigue las fases que se detallan a continuación:

La primera fase es generar un modelo mediante Dinámica Molecular, donde se aplican distintos conceptos adquiridos durante la carrera de Ingeniería de Materiales. Se crea el modelo mediante un código de programación, donde las partículas interaccionan con el



potencial de Asakura Oosawa, que se explicara en detalle a lo largo de este Proyecto, que simula una mezcla de coloide con polímero no absorbente. Los estados estudiados en esta investigación, tienen una fracción volumétrica del 40%, siendo el resto solvente. Sobre las partículas que se encuentran alojadas en una caja cúbica, se aplicara una serie de esfuerzos mecánicos, para estudiar el comportamiento resultante.

La segunda fase, consiste en generar un modelo, mediante la aplicación de la Teoría de Elementos Finitos. El modelo estará formado por elementos del mismo tipo y con materiales diferentes para simular el comportamiento de los enlaces entre las partículas coloidales que conforman el gel. Se aplicará una serie de fuerzas volumétricas, cuyos resultados se analizarán con detenimiento.

A la hora de seleccionar el elemento que satisficiera las características deseadas, tuvimos un duro trabajo y tras muchas investigaciones y conversaciones; (en Foros, con expertos en la materia que se dedican al análisis de elementos finitos en empresas con alto prestigio como puede ser: ITP, S.A., con distintos profesores de Universidad,...) se estudiaron las diversas sugerencias. Se crearon distintos modelos considerando los consejos enviados y tras analizar todos los resultados, sacamos como conclusión que muchas de las recomendaciones no eran validas, excepto la línea de investigación enviada por un profesor de la Universidad del País Vasco. Nos recomendó varios elementos, los cuales, se analizaron con sumo detalle, llegando a la conclusión que no cumplían totalmente nuestras expectativas, pero nos ayudaron a entender el comportamiento de los modelos. Utilizamos finalmente uno de los elementos esquemáticos recomendados, puesto que poseía las características principales.

La última fase consiste en comparar dichos modelos y verificar si es posible aplicar la teoría de Elementos Finitos para simular los sistemas BLANDOS y mas concretamente los geles coloidales.



## **2. 1. ANTECEDENTES.**

### **2. 1. 1. SIMULACIÓN COMPUTACIONAL.**

A lo largo de la historia, la evolución de la Ciencia se basaba en dos métodos clásicos: la realización de ensayos experimentales y la generación de modelos teóricos. La diferencia de ambos métodos consiste en la posibilidad de obtener mediciones de las propiedades de un modelo real expresado de forma numérica (ensayo experimental), mientras que para el modelo teórico, los resultados obtenidos son a través de ecuaciones matemáticas correctamente validadas.

El análisis de este Proyecto de investigación, se basará en el desarrollo de modelos teóricos, mediante la utilización del ordenador, donde se generarán distintos sistemas de partículas con el objeto de analizar los resultados obtenidos.

### **2. 1. 2. INTRODUCCIÓN A LOS ELEMENTOS FINITOS.**

Las propiedades mecánicas de los materiales son las características inherentes que permiten diferenciar un material de otro, en base a las fuerzas externas que se aplican. Estas propiedades tienen mucha importancia en la elección de un determinado material desde el punto de vista técnico.

Algunas de las propiedades principales son la Resistencia, Plasticidad y Elasticidad, que se detallan a continuación.

- *Resistencia* se refiere a la propiedad que presentan los materiales para soportar las fuerzas aplicadas, oponiéndose al cambio de forma y a la separación, es decir a la destrucción por acción de fuerzas o cargas.
- *Plasticidad*, es la capacidad de un material a deformarse ante la acción de una carga, permaneciendo la deformación al retirarse la misma, es decir es una



deformación permanente e irreversible.

- *Elasticidad* es la propiedad que presentan los materiales de volver a su estado inicial cuando se aplica una fuerza sobre él. La deformación causada ante la acción de una fuerza o carga no es permanente, volviendo el material a su forma original al retirarse la carga.

El punto que delimita el rango de fuerzas externas que producen una respuesta elástica del material, y donde comienza la zona plástica, se denomina límite elástico, y su determinación es crucial para muchas aplicaciones en Ciencia e Ingeniería de Materiales, y se realiza mediante ensayos especialmente diseñados.

Los ensayos de materiales se realizan con diversos objetivos:

1. La caracterización de materiales.
2. Control de calidad, al principio, durante y al final del proceso. Permite conocer si el material sigue poseyendo las propiedades exigidas.
3. Determinación de fallos en servicio, permitiendo también analizar las causas de los fallos.

El ensayo de tracción es el más importante para determinar las propiedades mecánicas de cualquier material. Los datos obtenidos se pueden utilizar para comparar distintos materiales entre sí y saber las condiciones de carga que puede soportar una determinada pieza. Se realiza con probetas de dimensiones normalizadas, que se someten a esfuerzos de tracción progresivamente crecientes, en dirección longitudinal, hasta producir su rotura.

Durante el ensayo se mide el alargamiento  $\Delta L$  de la probeta debido a la fuerza de tracción  $F$  obteniéndose el diagrama  $F-\Delta L$ . La forma del diagrama depende del material a ensayar. Para poder comparar los resultados obtenidos con probetas de distintos tamaños se



usa el diagrama tensión-deformación, siendo:

Tensión  $\sigma$  = Fuerza aplicada a la probeta por unidad de sección.

$$[T] = \frac{N}{m^2} = Pa$$

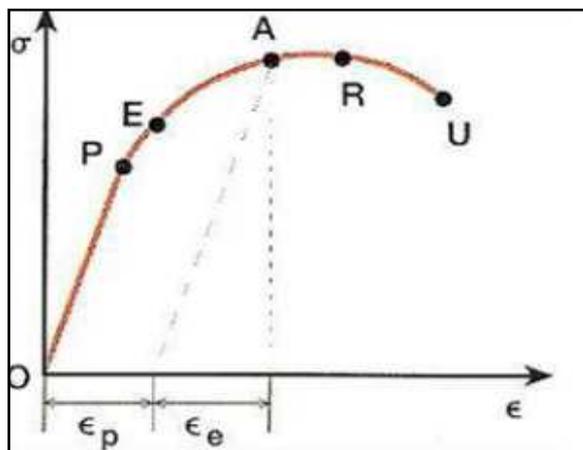
Deformación o alargamiento unitario  $\epsilon$ , cociente entre el alargamiento  $\Delta L$  experimentado por la probeta y su longitud inicial.

$$\epsilon = \frac{L_f - L_0}{L_0} = \frac{\Delta L}{L_0}$$

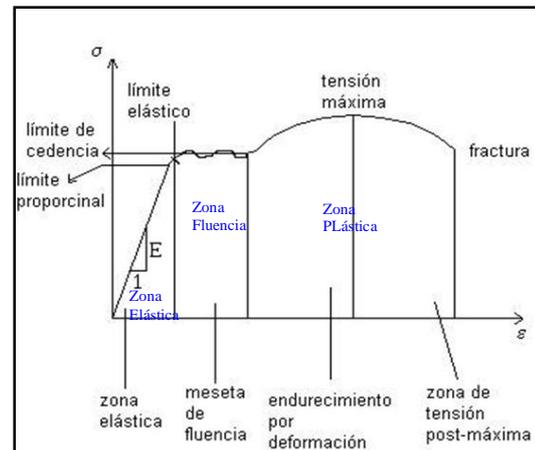
En función del tipo de comportamiento mecánico que posea el material, se podrá clasificar típicamente en dos categorías: materiales frágiles o materiales dúctiles.

A continuación se presentan dos diagramas tensión-deformación, para un material frágil y otro dúctil, indicando las principales características de cada uno de los diagramas.

### MATERIAL FRÁGIL



### MATERIAL DÚCTIL



### MATERIAL FRÁGIL.

Se caracteriza por tener dos zonas importantes a señalar, la zona elástica y la plástica.



- ZONA ELÁSTICA (OE). DEFORMACIONES ELÁSTICAS. Las deformaciones son pequeñas. Cuando el esfuerzo cesa la probeta recupera su estado inicial.

En esta zona se distinguen las distintas zonas:

- Zona proporcional (OP). Hay una relación lineal entre tensión  $\sigma$  y deformación  $\varepsilon$ .  
$$\sigma = E \cdot \varepsilon \rightarrow E = \text{módulo de Young o módulo de elasticidad lineal (N/m}^2\text{)}$$
- Zona no proporcional (PE). No hay relación de proporcionalidad entre tensión y deformación, pero si se detiene el ensayo, la probeta sigue recuperando su longitud inicial.

- ZONA PLÁSTICA (EU). ALARGAMIENTOS PERMANENTES. Los alargamientos son grandes y cuando cesa la fuerza, la deformación permanece. Si el ensayo se detiene en el punto A, la probeta recupera la deformación elástica ( $\varepsilon_e$ ), persistiendo al final una deformación remanente o plástica ( $\varepsilon_p$ ). Si reiniciamos ahora el ensayo, la nueva curva de tracción es semejante, pero la zona elástica se hace mayor. Con esta operación se consigue un endurecimiento del material por deformación.

En esta zona se distinguen las distintas partes:

- Zona de deformación plástica uniforme (ER) con pequeños incrementos de carga se consiguen alargamientos mayores que en la región elástica. La fuerza máxima dividida entre la sección inicial de la probeta determina la resistencia a la tracción ( $\sigma_R$ ), punto en el que finaliza la zona plástica de deformación uniforme.
- Zona de estricción o de deformación elástica localizada (RU). La deformación se localiza en una determinada zona de la probeta, la tensión disminuye y la probeta termina por romper en esa zona.

## **MATERIAL DÚCTIL.**

Para estos materiales se pueden distinguir tres partes importantes a señalar, zona elástica, zonas de fluencia y zona plástica.



- ZONA ELÁSTICA.

La zona elástica tiene el mismo comportamiento que el comentado anteriormente.

- ZONA DE FLUENCIA.

Al valor de la tensión aplicada cuando comienza a producir la fluencia se le conoce como límite de fluencia. Este fenómeno tiene lugar en la zona de transición entre las deformaciones elásticas y plásticas y se caracteriza por un rápido incremento de la deformación sin aumento apreciable de la carga aplicada.

- ZONA PLÁSTICA.

Pasada la parte del comportamiento elástico y de fluencia, se observa en los materiales dúctiles una zona de deformación plástica, donde se reconocen los estados:

- Endurecimiento por deformación. Zona en donde el material retoma tensión para seguir deformándose; va hasta el punto de tensión máxima, llamado por algunos tensión o resistencia última por ser el último punto útil del gráfico.
- Zona de tensión post-máxima. En éste último tramo el material se va poniendo menos tenso hasta el momento de la fractura.

Además del ensayo de tracción descrito en detalle anteriormente, existen otros tipos de ensayos, para obtener las propiedades del material, como pueden ser:

- ENSAYO DE DUREZA → Permite conocer la dureza del material, la cual se define como la resistencia que opone un material a la penetración de otro mas duro que él. Cuanto mayor es la penetración, mas blando es el material. El valor obtenido dependerá del ensayo realizado, pudiendo usarse los métodos de dureza:
  - DUREZA BRINELL, el penetrador utilizado para el ensayo es una bola de acero.
  - DUREZA VICKERS, en este caso el penetrador es una pirámide.



- DUREZA ROCKWELL, define la magnitud del esfuerzo de contacto, como un número arbitrario, que es inversamente proporcional a la penetración del penetrador.
- ENSAYO DE COMPRESIÓN → estudia el comportamiento de un material sometido a un esfuerzo de compresión, progresivamente creciente, hasta conseguir la rotura o el aplastamiento, según la clase de material.
- ENSAYO DE RESILIENCIA → consiste en evaluar la resistencia del material frente a impactos y la sensibilidad de los metales a las entallas. Se puede hacer uso de dos tipos de probetas; las de Izod (posee tres entallas) o las de Charpy (solo posee una entalla).
- ENSAYO DE FLEXIÓN → el objetivo es determinar la curva carga-desplazamiento y la distribución de deformaciones y de tensiones, al estar el prototipo sometido a una flexión.
- ENSAYO DE TORSIÓN → se utiliza una barra sujeta rígidamente en un extremo y sometida en el otro extremo a un par  $T (=F \cdot d)$  aplicado en un plano perpendicular al eje. El objetivo de este ensayo es obtener la información directamente del comportamiento a cortadura del material.

Nuestro material debido a su complejidad, no es ni un material frágil ni dúctil, ya que, posee otro tipo de comportamiento, como se mostrará mas adelante.



### 2. 1. 2. 1. HISTORIA DEL MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS.

Aunque el nombre del Método de Elementos Finitos, MEF, se ha establecido recientemente, el concepto se ha usado desde hace varios siglos. El empleo de métodos de discretizado espacial y temporal y la aproximación numérica para encontrar soluciones a problemas ingenieriles o físicos es conocido desde hace mucho tiempo. El concepto de 'elementos finitos' parte de esa idea.

Para encontrar casos de este tipo de cálculos podríamos remontarnos a la época de la construcción de las pirámides Egipcias. Los egipcios empleaban métodos de discretizado para determinar el volumen de las pirámides. Arquímedes (287-212 a.C.) empleaba el mismo método para calcular el volumen de todo tipo de sólidos o la superficie de áreas.

El desarrollo de los elementos finitos tal y como se conocen hoy en día es en el cálculo estructural, fundamentalmente en el campo aeroespacial. En los años 40 Courant propone la utilización de funciones polinómicas para la formulación de problemas elásticos en subregiones triangulares, como un método especial del método variacional de Rayleigh-Ritz para aproximar soluciones. Fueron Turner, Clough, Martín y Topp quienes presentaron el MEF en la forma aceptada hoy en día. En su trabajo introdujeron la aplicación de elementos finitos simples (barras y placas triangulares con cargas en su plano) al análisis de estructuras aeronáuticas, utilizando los conceptos de discretizado y funciones de forma.

Las ecuaciones de los EF pueden obtenerse utilizando un método de aproximación de pesos residuales, tal como el método de Galerkin o el de mínimos cuadrados. Esta visión del problema difundió un gran interés entre los matemáticos para la solución de ecuaciones diferenciales lineales y no lineales mediante el MEF.

Hoy en día el MEF está considerado como una de las herramientas más potentes y probadas para la solución de problemas de ingeniería y ciencia aplicada.



Actualmente el método se encuentra en una fase de gran expansión, siendo ampliamente utilizado en la industria. Los ordenadores han aportado el medio eficaz de resolver la multitud de ecuaciones que se plantean en el MEF. Actualmente ya se concibe la conexión inteligente entre las técnicas de análisis estructural, las técnicas de diseño (CAD) y las técnicas de fabricación.

El MEF permite realizar un modelo matemático de cálculo del sistema real, más fácil y económico de modificar que un prototipo. Sin embargo no deja de ser un método aproximado de cálculo. Los prototipos, por lo tanto, siguen siendo necesarios, pero en menor número, ya que el primero puede acercarse bastante más al diseño óptimo.

Al efectuar una clasificación de las estructuras usadas en el MEF, suelen dividirse en discretas o reticulares y continuas. Las primeras son aquellas que están formadas por un ensamblaje de elementos claramente diferenciados unos de otros y unidos en una serie de puntos concretos, de tal manera que el sistema total tiene forma de malla o retícula. La característica fundamental de las estructuras discretas es que su deformación puede definirse de manera exacta mediante un número finito de parámetros, es decir, se pueden contabilizar, como por ejemplo las deformaciones de los puntos de unión de unos elementos y otros. De esta manera el equilibrio de toda la estructura puede representarse mediante las ecuaciones de equilibrio en las direcciones de dichas deformaciones.

Las estructuras continuas son muy frecuentes en ingeniería, como por ejemplo: bastidores de máquinas, carrocerías de vehículos, losas de cimentación de edificios, vasijas de reactores, elementos de máquinas (bielas, poleas, carcasas...), y para su análisis es necesario disponer de un método que tenga en cuenta su naturaleza continua.

Nuestra modalidad de investigación se basa en las estructuras discretas.



## 2. 1. 2. 2. CONCEPTOS GENERALES DEL MÉTODO.

En una estructura discreta, su deformación viene definida por un número finito de parámetros (deformaciones y/o giros), que juntos conforman el vector de deformaciones  $\Delta$ , y la estructura tiene tantas formas de deformarse como términos tenga dicho vector. Un medio continuo tiene infinitas formas posibles de deformarse, independientes unas de otras, ya que cada punto puede desplazarse manteniendo fijos cualquier número finito de los puntos restantes, por grande que sea este último. Como consecuencia, la configuración deformada de la estructura no puede venir dada por un vector finito  $\Delta$ , sino que es una función vectorial  $\mathbf{u}$ , que indica cuáles son las deformaciones de cualquier punto, y que tiene tres componentes escalares:

$$\mathbf{u} = \begin{Bmatrix} u(x, y, z) \\ v(x, y, z) \\ w(x, y, z) \end{Bmatrix}$$

Esta función es la solución de la ecuación diferencial que gobierna el problema y si éste está bien planteado, cumplirá las condiciones de contorno impuestas, pero en principio no puede asegurarse que esta función “ $\mathbf{u}$ ”, tenga una expresión analítica manejable, ni siquiera que pueda calcularse. Por lo tanto, la función “ $\mathbf{u}$ ” no podrá conocerse en general.

Para resolver este problema, el Método de los Elementos Finitos recurre a la hipótesis de discretización, que se basa en lo siguiente:

- El modelo se divide por medio de líneas o superficies imaginarias en una serie de regiones contiguas y disjuntas entre sí, de formas geométricas sencillas y normalizadas, llamadas elementos finitos.

Los elementos finitos se unen entre sí en un número finito de puntos, llamados nudos.

- Los desplazamientos de los nudos son las incógnitas básicas del problema, y éstos determinan unívocamente la configuración deformada de la estructura. Sólo estos



desplazamientos nodales se consideran independientes.

- El desplazamiento de un punto cualquiera, viene determinado por los desplazamientos de los nudos del elemento al que pertenece el punto. Para ello se definen para cada elemento, unas funciones de interpolación que permiten calcular el valor de cualquier desplazamiento interior por interpolación de los desplazamientos nodales. Estas funciones de interpolación serán de tal naturaleza que se garantice la compatibilidad de deformaciones necesaria en los contornos de unión entre los elementos.
- Las funciones de interpolación y los desplazamientos nodales definen unívocamente el estado de deformaciones unitarias en el interior del elemento. Éstas, mediante las ecuaciones constitutivas del material definen el estado de tensiones en el elemento y por supuesto en sus bordes.
- Para cada elemento, existe un sistema de fuerzas concentradas en los nudos, que equilibran a las tensiones existentes en el contorno del elemento, y a las fuerzas exteriores que se aplican a los elementos.

Los dos aspectos más importantes de esta hipótesis, sobre los que hay que hacer hincapié son:

- La función solución del problema “ $u$ ” es aproximada de forma independiente en cada elemento. Para una estructura discretizada en varios elementos, pueden utilizarse funciones de interpolación distintas para cada uno de ellos, a juicio del analista, aunque deben cumplirse ciertas condiciones de compatibilidad en las fronteras entre los elementos.
- La función solución es aproximada dentro de cada elemento, apoyándose en un número finito (y pequeño) de parámetros, que son los valores de dicha función en los nudos que configuran el elemento y a veces sus derivadas.

Esta hipótesis de discretización es el pilar básico del MEF, por lo que se suele decir de éste, que es un método discretizante, de parámetros distribuidos. La aproximación indicada se conoce como la formulación en desplazamiento.

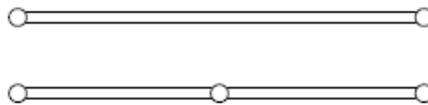


Claramente se han introducido algunas aproximaciones. En primer lugar no es siempre fácil asegurar que las funciones de interpolación elegidas cumplieran el requerimiento de continuidad de desplazamientos entre elementos adyacentes, por lo que puede violarse la condición de compatibilidad en las fronteras entre unos y otros. En segundo lugar al concentrar las cargas equivalentes en los nudos, las condiciones de equilibrio se cumplirán solamente en ellos, y no en las fronteras entre elementos generalmente.

El proceso de discretización descrito tiene una justificación intuitiva, pero lo que de hecho se sugiere es la minimización de la energía potencial total del sistema, para un campo de deformaciones definido por el tipo de elementos utilizado en la discretización.

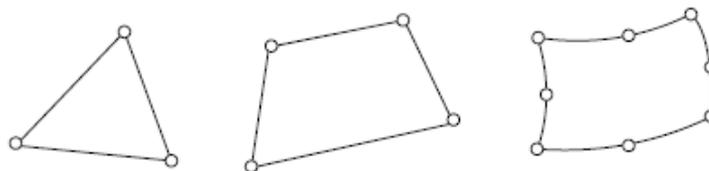
Con independencia de que más adelante se estudien en detalle, se representan a continuación algunos de los elementos más importantes.

#### - Elasticidad unidimensional



**Elementos para elasticidad unidimensional.**

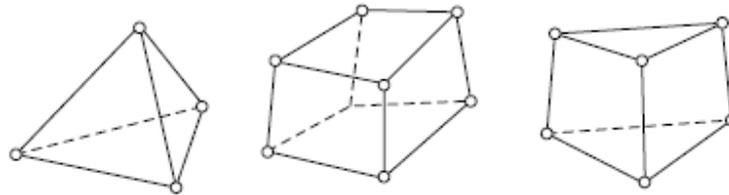
#### - Elasticidad bidimensional



**Elementos para elasticidad bidimensional.**

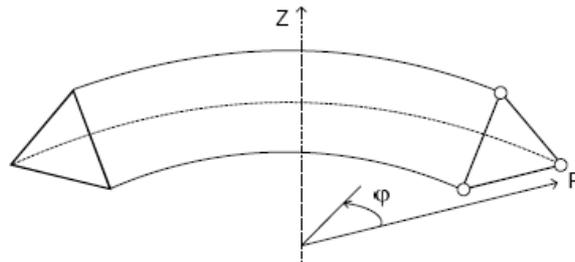


- Elasticidad tridimensional



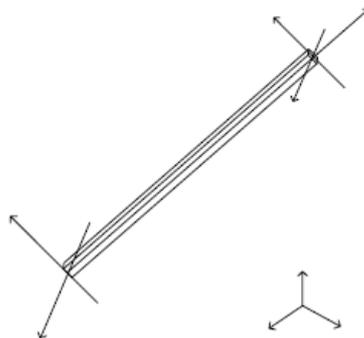
**Elementos para elasticidad tridimensional.**

- Elasticidad con simetría de revolución



**Elemento axisimétrico.**

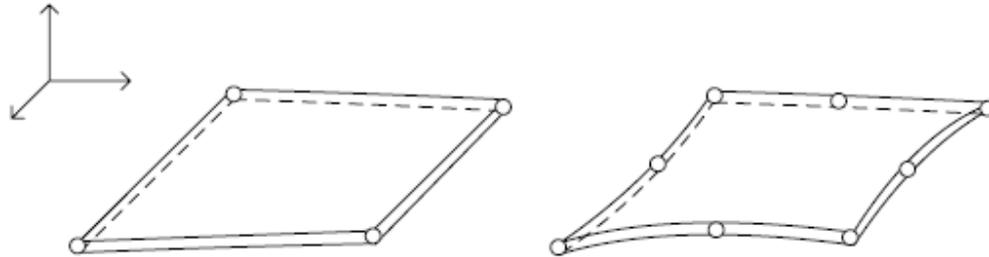
- Vigas



**Elemento viga.**

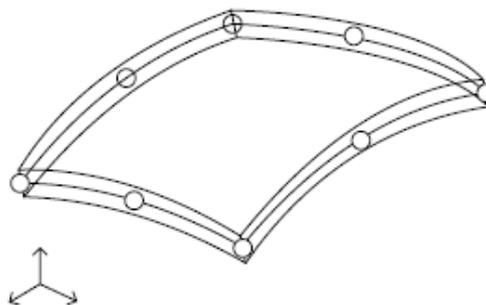


- Flexión de placas planas.



**Elementos placa plana.**

- Cáscaras laminares curvas.



**Elemento cáscara curva.**

### 2. 1. 2. 3. CRITERIOS DE CONVERGENCIA.

Antes de estudiar los criterios para garantizar la convergencia en el MEF es necesario definir dicho concepto, en el ámbito del MEF. Se dice que un análisis por el MEF es convergente si al disminuir el tamaño de los elementos, y por lo tanto aumentar el número de nudos y de elementos, la solución obtenida tiende hacia la solución exacta.

Hay que indicar que en el análisis por el MEF, se introducen, además de la hipótesis de discretización, otras aproximaciones, que son fuentes de error en la solución: integración



numérica, errores de redondeo por aritmética finita... El concepto de convergencia aquí analizado se refiere solamente a la hipótesis de discretización, prescindiendo de los otros errores, que deben ser estudiados aparte, y cuyo valor debe en todo caso acotarse.

Se aplican distintos criterios, que deben de cumplir las funciones de interpolación. Éstas deben ser tales que cumplan:

- Cuando se tenga movimiento de sólido rígido, no aparezcan tensiones en el elemento, es decir, las funciones de interpolación deben ser capaces de representar los desplazamientos como sólido rígido, sin que se puedan producir tensiones en los elementos.
- Si se tiene un estado de tensión constante, este estado tensional se debe de alcanzar en el elemento. A medida que los elementos se hacen más pequeños, el estado de tensiones que hay en ellos se acerca al estado uniforme de tensiones. Este criterio lo que exige es que los elementos sean capaces de representar dicho estado de tensión constante.
- Las deformaciones unitarias que se produzcan en las uniones entre elementos deben ser finitas, es decir, debe existir continuidad de desplazamientos en la unión entre elementos, aunque puede haber discontinuidad en las deformaciones unitarias, por lo tanto también en las tensiones.

#### 2. 1. 2. 4. CAMPO DE DEFORMACIONES.

El campo de deformaciones en un punto cualquiera del dominio está definido por un vector “**u**” que tiene tantas componentes como deformaciones existen en el dominio.

Para el caso de un problema espacial es:

$$\mathbf{u} = \begin{Bmatrix} u(x, y, z) \\ v(x, y, z) \\ w(x, y, z) \end{Bmatrix}$$



Si se considera un elemento finito cualquiera, el campo de deformaciones en su interior se aproxima, haciendo uso de la hipótesis de interpolación, como un promedio ponderado de las deformaciones en cada uno de los “n” nudos del elemento, siendo los factores de ponderación las funciones de interpolación:

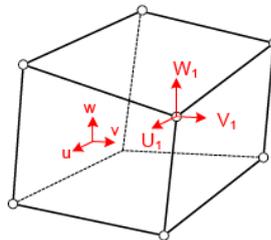
$$u = \sum N_i U_i \qquad v = \sum N_i V_i \qquad w = \sum N_i W_i$$

Esta interpolación puede expresarse en forma matricial:

$$\mathbf{u} = \mathbf{N} \delta^e$$

Donde:  $\delta^e$  es el vector de todas las deformaciones nodales del elemento, de la siguiente figura:

$$\delta^e = [U_1 \quad V_1 \quad W_1 \quad U_2 \quad V_2 \quad W_2 \quad \dots \quad U_n \quad V_n \quad W_n]^T$$



**Figura que muestra las deformaciones en un elemento finito.**

La matriz de funciones de interpolación  $\mathbf{N}$  tiene tres filas y tantas columnas como grados de libertad haya entre todos los nudos del elemento. La estructura de esta matriz siempre es del tipo:

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 & \dots & \dots & N_n & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & \dots & \dots & 0 & N_n & 0 \\ 0 & 0 & N_1 & \dots & \dots & 0 & 0 & N_n \end{bmatrix}$$



### 2. 1. 2. 5. DEFORMACIONES UNITARIAS.

Las deformaciones unitarias,  $\epsilon$ , en un punto cualquiera del elemento, con la suposición de pequeñas deformaciones, son:

$$\epsilon = \begin{Bmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \epsilon_z \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial w}{\partial z} \\ \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \end{Bmatrix}$$

Se pueden poner en la forma matricial siguiente:

$$\epsilon = \begin{Bmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \epsilon_z \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ v \\ w \end{Bmatrix} = \partial \mathbf{u}$$



En esta expresión se identifica el operador matricial  $\partial$ , que permite pasar de las deformaciones de un punto “ $\mathbf{u}$ ” a las deformaciones unitarias “ $\boldsymbol{\varepsilon}$ ”. Este operador tiene tantas filas como deformaciones unitarias haya en el problema y tantas columnas como componentes tenga el campo de desplazamientos “ $\mathbf{u}$ ”.

Sustituyendo las deformaciones “ $\mathbf{u}$ ” en función de las deformaciones nodales, mediante las funciones de interpolación, se obtiene:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \partial \mathbf{u} = \partial \mathbf{N} \boldsymbol{\delta}^e$$

En esta relación se identifica la matriz  $\mathbf{B}$ :

$$\mathbf{B} = \partial \mathbf{N}$$

Tal que se cumple que:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B} \boldsymbol{\delta}^e$$

Esta matriz “ $\mathbf{B}$ ” relaciona las deformaciones de los nudos del elemento “ $\boldsymbol{\delta}^e$ ” con las deformaciones unitarias en un punto interior cualquiera del elemento. Por lo tanto “ $\mathbf{B}$ ” representa el campo de deformaciones unitarias que se supone existe en el interior del elemento finito, como consecuencia de la hipótesis de interpolación de deformaciones efectuada y juega un papel fundamental en el método de los elementos finitos.

Dada la estructura de la matriz “ $\mathbf{N}$ ”, la matriz “ $\mathbf{B}$ ” se puede poner siempre en la forma:

$$\mathbf{B} = \partial \mathbf{N} = \partial \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 & \dots & \dots & N_n & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & \dots & \dots & 0 & N_n & 0 \\ 0 & 0 & N_1 & \dots & \dots & 0 & 0 & N_n \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{B} = [\mathbf{B}_1 \quad \mathbf{B}_2 \quad \dots \quad \mathbf{B}_n]$$



Cada una de las matrices “ $\mathbf{B}_i$ ” tiene la forma siguiente:

$$\mathbf{B}_i = \partial \begin{bmatrix} N_i & 0 & 0 \\ 0 & N_i & 0 \\ 0 & 0 & N_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_i}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_i}{\partial z} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} & \frac{\partial N_i}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_i}{\partial z} & \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N_i}{\partial x} \end{bmatrix}$$

Aunque el valor de “ $\mathbf{B}$ ” se ha obtenido para el caso de elasticidad tridimensional, su valor en función de “ $\partial$ ” y “ $\mathbf{N}$ ” es totalmente general para otros tipos de problemas de elasticidad, como flexión de placas, problemas de revolución, etc.

### 2. 1. 2. 6. ESTADO DE TENSIONES. ECUACIÓN CONSTITUTIVA.

Las tensiones en un punto cualquiera del dominio están definidas por el tensor de tensiones en dicho punto, cuya expresión general es:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{Bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \end{Bmatrix}$$



Asimismo se conoce la ecuación constitutiva del material que forma el dominio, y que relaciona las tensiones con las deformaciones unitarias. Para el caso más sencillo de un material elástico lineal esta ecuación constitutiva se puede poner en la forma:

$$\sigma = \mathbf{D}(\varepsilon - \varepsilon_0) + \sigma_0$$

Siendo:

-  $\mathbf{D}$  la matriz elástica, que para un material elástico lineal es constante y depende de sólo dos parámetros: el módulo de elasticidad  $E$  y el módulo de Poisson  $\nu$ .

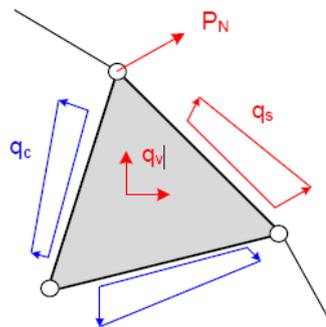
-  $\varepsilon_0$  el vector de las deformaciones unitarias iniciales existentes en el material en el punto considerado, que deben ser conocidas. Las más habituales son las debidas a las temperaturas, aunque pueden incluirse en ellas las debidas a los errores de forma, etc.

-  $\sigma_0$  las tensiones iniciales presentes en el material, que normalmente son tensiones residuales debidas a procesos anteriores sobre el material (p.e. tratamiento térmico) y que por lo tanto son conocidas.

Las expresiones particulares de la matriz elástica “ $\mathbf{D}$ ” y de los vectores “ $\varepsilon_0$ ” y “ $\sigma_0$ ” dependen del tipo de problema considerado y serán estudiadas en cada caso particular.

### 2. 1. 2. 7. ECUACIÓN DE EQUILIBRIO DE UN ELEMENTO.

Una vez que han quedado establecidas las expresiones que relacionan los desplazamientos, las deformaciones unitarias y las tensiones, en función de los desplazamientos de los nudos, se está ya en condiciones de calcular las ecuaciones de equilibrio de un elemento finito. Si se considera un elemento finito cualquiera, las fuerzas que actúan sobre él, en el caso más general, son las que se muestran en la siguiente imagen.



- Fuerzas exteriores de volumen aplicadas en el interior del elemento “ $q_v$ ”, que son en general variables dentro del elemento, y tienen tantas componentes como desplazamientos haya en cada punto.

- Fuerzas exteriores de superficie aplicadas en el contorno libre del elemento “ $q_s$ ”, que son en general variables a lo largo del contorno, y tienen tantas componentes como desplazamientos tenga cada punto del contorno. Al contorno sobre el que actúan las fuerzas de superficie se le denomina “ $s$ ”.

- Fuerzas interiores “ $q_c$ ”, aplicadas en la superficie del contorno de unión del elemento con los elementos vecinos, que son desconocidas. A dicho contorno de unión se le denomina “ $c$ ”.

- Fuerzas exteriores puntuales aplicadas sobre los nudos del elemento  $P_N^\epsilon$ .

El trabajo virtual que producen todas estas fuerzas se representa mediante la ecuación:

$$\delta W^\epsilon = \int_v \delta \mathbf{u}^T \mathbf{q}_v dv + \int_s \delta \mathbf{u}^T \mathbf{q}_s ds + \int_c \delta \mathbf{u}^T \mathbf{q}_c ds + \delta \delta^{\epsilon T} \mathbf{P}_N^\epsilon$$

Donde “ $\delta \mathbf{u}$ ” es una variación virtual del campo de deformaciones, “ $\mathbf{u}$ ” y “ $\delta \delta^{\epsilon T}$ ” es la variación correspondiente a los grados de libertad de los nudos. Durante estas variaciones, las fuerzas exteriores se mantienen constantes.



Aplicando el principio de los trabajos virtuales se obtiene que para que haya equilibrio, el trabajo virtual de las fuerzas debe ser igual a la variación de la energía elástica “ $U$ ” acumulada en el elemento, para cualquier “ $\delta \mathbf{u}$ ”:

$$\delta W^e = \int_v \delta \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\sigma} dv \equiv \delta U^e$$

Donde “ $\delta \boldsymbol{\varepsilon}$ ” es la variación en las deformaciones unitarias producida por la variación en las deformaciones “ $\delta \mathbf{u}$ ”. Por lo tanto la ecuación de equilibrio del elemento es:

$$\int_v \delta \mathbf{u}^T \mathbf{q}_v dv + \int_s \delta \mathbf{u}^T \mathbf{q}_s ds + \int_o \delta \mathbf{u}^T \mathbf{q}_o ds + \delta \boldsymbol{\delta}^{eT} \mathbf{P}_N^e = \int_v \delta \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\sigma} dv$$

Aplicando la hipótesis de interpolación de deformaciones, la variación virtual del campo de deformaciones es:

$$\delta \mathbf{u} = \mathbf{N} \delta \boldsymbol{\delta}^e$$

La variación de las deformaciones unitarias se relaciona con la variación de las deformaciones nodales a través de la matriz  $\mathbf{B}$ :

$$\delta \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B} \delta \boldsymbol{\delta}^e$$

Sustituyendo las variaciones “ $\delta \mathbf{u}$ ” y “ $\delta \boldsymbol{\varepsilon}$ ”, se obtiene la ecuación de equilibrio aproximada mediante la hipótesis de interpolación de deformaciones:

$$\delta \boldsymbol{\delta}^{eT} \left[ \int_v \mathbf{N}^T \mathbf{q}_v dv + \int_s \mathbf{N}^T \mathbf{q}_s ds + \int_o \mathbf{N}^T \mathbf{q}_o ds + \mathbf{P}_N^e \right] = \delta \boldsymbol{\delta}^{eT} \left[ \int_v \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} dv \right]$$

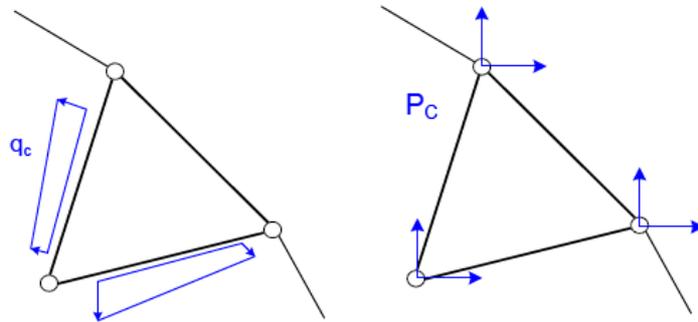
Considerando que esta ecuación se debe cumplir para cualquier variación arbitraria de las deformaciones, se obtiene:

$$\int_v \mathbf{N}^T \mathbf{q}_v dv + \int_s \mathbf{N}^T \mathbf{q}_s ds + \int_o \mathbf{N}^T \mathbf{q}_o ds + \mathbf{P}_N^e = \int_v \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} dv$$



La expresión anterior representa el equilibrio del elemento finito. Antes de seguir desarrollándola, la integral debida a las fuerzas distribuidas “ $\mathbf{q}_c$ ” sobre el contorno de unión (desconocidas) se sustituye por:

$$\int_{\partial} \mathbf{N}^T \mathbf{q}_c ds = \mathbf{P}_c^e$$



**Fuerzas de conexión entre elementos.**

Donde  $\mathbf{P}_c^e$  son unas fuerzas que están aplicadas sobre los nudos del elemento, y que son equivalentes a las fuerzas aplicadas sobre los contornos de unión con los elementos vecinos. Ambas fuerzas producen el mismo trabajo virtual. La ecuación de equilibrio del elemento queda finalmente:

$$\int_v \mathbf{N}^T \mathbf{q}_v dv + \int_s \mathbf{N}^T \mathbf{q}_s ds + \mathbf{P}_c^e + \mathbf{P}_N^e = \int_v \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} dv$$

Sustituyendo en ella el valor de la tensión se obtiene:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_0) + \boldsymbol{\sigma}_0$$

$$\int_v \mathbf{N}^T \mathbf{q}_v dv + \int_s \mathbf{N}^T \mathbf{q}_s ds + \mathbf{P}_c^e + \mathbf{P}_N^e = \int_v \mathbf{B}^T (\mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon}_0 + \boldsymbol{\sigma}_0) dv$$



Sustituyendo a continuación el valor de la deformación unitaria en función de la matriz “**B**” se obtiene:

$$\int_v \mathbf{N}^T \mathbf{q}_v dv + \int_s \mathbf{N}^T \mathbf{q}_s ds + \mathbf{P}_o^\epsilon + \mathbf{P}_N^\epsilon = \int_v \mathbf{B}^T (\mathbf{D}\mathbf{B}\delta^\epsilon - \mathbf{D}\epsilon_0 + \sigma_0) dv$$

Reordenando los distintos términos se llega a:

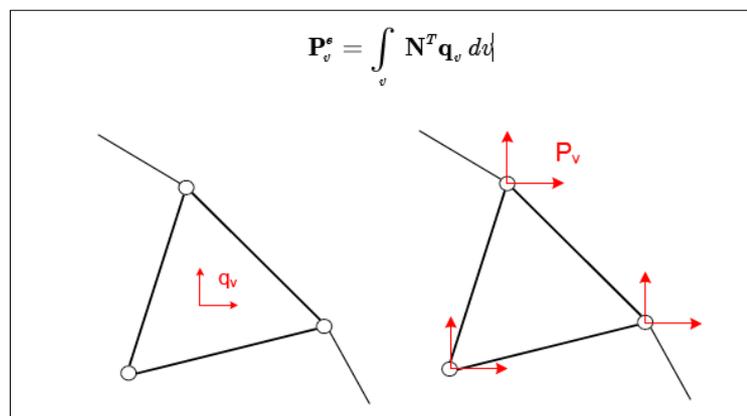
$$\int_v \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dv \delta^\epsilon = \int_v \mathbf{N}^T \mathbf{q}_v dv + \int_s \mathbf{N}^T \mathbf{q}_s ds + \int_v \mathbf{B}^T \mathbf{D} \epsilon_0 dv - \int_v \mathbf{B}^T \sigma_0 dv + \mathbf{P}_o^\epsilon + \mathbf{P}_N^\epsilon$$

Esta es la ecuación final de equilibrio del elemento finito considerado. En ella se identifican los siguientes términos:

- Matriz de rigidez del elemento finito: “**K<sup>ε</sup>**”. Se trata de una matriz cuadrada simétrica de tamaño igual al número de grados de libertad del elemento.

$$\mathbf{K}^\epsilon = \int_v \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dv$$

- Vector de fuerzas nodales:  $P_v^\epsilon$  equivalentes debido a las fuerzas actuantes por unidad de volumen, según se muestra en la siguiente figura.



**Fuerzas nodales equivalentes a las fuerzas de volumen.**



- Vector de fuerzas nodales equivalentes a las fuerzas exteriores de superficie.

$$\mathbf{P}_s^e = \int_s \mathbf{N}^T \mathbf{q}_s ds$$

- Vector de fuerzas nodales equivalentes producidas por las deformaciones iniciales existentes en el material:

$$\mathbf{P}_T^e = \int_v \mathbf{B}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}_0 dv$$

- Vector de fuerzas nodales equivalentes debidas a las tensiones iniciales existentes en el material:

$$\mathbf{P}_b^e = - \int_v \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}_0 dv$$

La ecuación de equilibrio del elemento puede ponerse en forma compacta como:

$$\mathbf{K}^e \boldsymbol{\delta}^e = \mathbf{P}_v^e + \mathbf{P}_s^e + \mathbf{P}_T^e + \mathbf{P}_b^e + \mathbf{P}_c^e + \mathbf{P}_N^e$$

Esta ecuación de equilibrio está referida al sistema de ejes en el que se hayan definido las coordenadas y las deformaciones de los nudos y al que lógicamente también se habrán referido las distintas fuerzas actuantes. En ella son conocidos todos los términos de carga salvo el debido a las fuerzas distribuidas interiores  $\mathbf{P}_c^e$  que se producen en el contorno de unión con los elementos vecinos.



### 2. 1. 2. 8. ENERGÍA POTENCIAL TOTAL.

La densidad de energía elástica acumulada en un punto del elemento es:

$$U_0^e = \int_0^{\epsilon} \boldsymbol{\sigma}^T d\boldsymbol{\epsilon} = \int_0^{\epsilon} (\mathbf{D}\boldsymbol{\epsilon} - \mathbf{D}\boldsymbol{\epsilon}_0 + \boldsymbol{\sigma}_0)^T d\boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_0^T \mathbf{D} \boldsymbol{\epsilon} + \boldsymbol{\sigma}_0^T \boldsymbol{\epsilon}$$

El potencial total acumulado en un elemento finito cualquiera es igual a la suma de la energía elástica acumulada en él más el potencial de las fuerzas exteriores V:

$$\begin{aligned} \Pi^e &= U^e + V^e = \int_v U_0^e dv + V^e \\ \Pi^e &= \frac{1}{2} \int_v \boldsymbol{\epsilon}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\epsilon} dv - \int_v \boldsymbol{\epsilon}_0^T \mathbf{D} \boldsymbol{\epsilon}_0 dv + \int_v \boldsymbol{\epsilon}_0^T \boldsymbol{\sigma}_0 dv \\ &\quad - \int_v \mathbf{u}^T \mathbf{q}_v dv - \int_s \mathbf{u}^T \mathbf{q}_s ds - \int_c \mathbf{u}^T \mathbf{q}_c ds - \boldsymbol{\delta}^{eT} \mathbf{P}_N^e \end{aligned}$$

Sustituyendo las deformaciones unitarias “ $\boldsymbol{\epsilon}$ ” y los desplazamientos “ $\mathbf{u}$ ” en función de las deformaciones nodales mediante las matrices “ $\mathbf{B}$ ” y “ $\mathbf{N}$ ” se obtiene:

$$\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{B} \boldsymbol{\delta}^e$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{N} \boldsymbol{\delta}^e$$

Sustituyendo:

$$\begin{aligned} \Pi^e &= \frac{1}{2} \boldsymbol{\delta}^{eT} \int_v \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dv \boldsymbol{\delta}^e - \boldsymbol{\delta}^{eT} \int_v \mathbf{B}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\epsilon}_0 dv + \boldsymbol{\delta}^{eT} \int_v \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}_0 dv \\ &\quad - \boldsymbol{\delta}^{eT} \int_v \mathbf{N}^T \mathbf{q}_v dv - \boldsymbol{\delta}^{eT} \int_s \mathbf{N}^T \mathbf{q}_s ds - \boldsymbol{\delta}^{eT} \int_c \mathbf{N}^T \mathbf{q}_c ds - \boldsymbol{\delta}^{eT} \mathbf{P}_N^e \end{aligned}$$

En esta expresión se identifican la matriz de rigidez del elemento, así como los distintos vectores de fuerzas nodales equivalentes, con lo que se puede poner en forma más compacta:



$$\Pi^e = \frac{1}{2} \delta^{eT} \mathbf{K}^e \delta^e - \delta^{eT} \mathbf{P}_T^e - \delta^{eT} \mathbf{P}_b^e - \delta^{eT} \mathbf{P}_v^e - \delta^{eT} \mathbf{P}_s^e - \delta^{eT} \mathbf{P}_c^e - \delta^{eT} \mathbf{P}_N^e$$

El potencial total para el medio continuo se obtiene sumando el potencial de cada uno de los elementos que lo forman:

$$\Pi = \sum_e \Pi^e$$

Al sumar el potencial de los distintos elementos, se pueden ir ensamblando la matriz de rigidez y los vectores de fuerzas de los elementos según los distintos grados de libertad de la estructura, para obtener la siguiente expresión:

$$\Pi = \frac{1}{2} \Delta^T \mathbf{K} \Delta - \Delta^T \mathbf{P}_T - \Delta^T \mathbf{P}_b - \delta^T \mathbf{P}_v - \Delta^T \mathbf{P}_s - \Pi_c - \Delta^T \mathbf{P}_N$$

En ella aparece la matriz de rigidez de toda la estructura, y los correspondientes vectores de grados de libertad y fuerzas nodales equivalentes.

El término “ $\Pi_c$ ” corresponde al potencial acumulado en las fronteras de conexión entre los elementos por las fuerzas de conexión “ $\mathbf{q}_c$ ”. Este término es nulo si las funciones de interpolación se eligen con la condición de que no se acumule energía en las fronteras.

El equilibrio de la estructura implica que el potencial total sea estacionario, para cualquier variación de las deformaciones nodales:

$$\delta \Pi = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial \Pi}{\partial \Delta} = 0$$

Se obtiene así la ecuación de equilibrio de toda la estructura, comentada anteriormente.

$$\mathbf{K} \Delta = \mathbf{P}_T + \mathbf{P}_b + \mathbf{P}_v + \mathbf{P}_s + \mathbf{P}_N$$



### 2. 1. 2. 9. ECUACIÓN DE EQUILIBRIO DEL CONJUNTO.

La ecuación de equilibrio obtenida para un elemento puede aplicarse a todos y cada uno de los elementos en que se ha dividido el sistema continuo. De esta manera se garantiza el equilibrio de todos y cada uno de ellos individualmente, apareciendo en dichas ecuaciones las fuerzas de conexión entre unos y otros elementos.

Para obtener la ecuación de equilibrio de toda la estructura es necesario además imponer el equilibrio de las fronteras de unión entre los elementos. En estas fronteras se han introducido las fuerzas de conexión entre los elementos “ $\mathbf{q}_e$ ”, que a su vez han dado lugar a las fuerzas nodales correspondientes “ $\mathbf{P}_c$ ”, y que como se ha visto son energéticamente equivalentes a ellas. Por lo tanto el considerar el equilibrio de las fronteras es equivalente a considerar el equilibrio de los nudos de unión entre los elementos.

Si se plantean conjuntamente las ecuaciones de equilibrio de todos los nudos de unión entre todos los elementos, se obtiene un conjunto de ecuaciones que representa el equilibrio de toda la estructura. Estas ecuaciones se obtienen por ensamblado de las ecuaciones de equilibrio de los distintos elementos finitos que la forman, siendo la siguiente ecuación:

$$\bigcup_e \mathbf{K}^e \delta^e = \bigcup_e \left[ \mathbf{P}_v^e + \mathbf{P}_s^e + \mathbf{P}_T^e + \mathbf{P}_b^e + \mathbf{P}_N^e \right] + \bigcup_e \mathbf{P}_c^e$$

Donde se ha empleado el símbolo “ $e$ ” para indicar el ensamblado de las distintas magnitudes según los grados de libertad de la estructura.

En este proceso de ensamblado se cancelan todas las fuerzas de conexión entre unos elementos y los vecinos, pues se trata de fuerzas iguales y de signo contrario:

$$\bigcup_e \mathbf{P}_c^e = 0$$



Al ser el sistema lineal, el término de la izquierda puede ponerse siempre como:

$$\bigcup_e \mathbf{K}^e \delta^e = \mathbf{K} \Delta$$

Siendo:

- “ $\mathbf{K}$ ” es la matriz de rigidez de la estructura completa, obtenida por ensamblaje de las matrices de los distintos elementos según los grados de libertad correspondientes a cada uno.

- “ $\Delta$ ” es el vector de grados de libertad de toda la estructura, que agrupa a los grados de libertad de todos los nudos.

De esta manera, la ecuación de equilibrio del conjunto de la estructura queda:

$$\mathbf{K} \Delta = \mathbf{P}_v + \mathbf{P}_s + \mathbf{P}_T + \mathbf{P}_b + \mathbf{P}_N$$

En esta ecuación:

- $\mathbf{P}_N$  es el vector de fuerzas exteriores actuantes sobre los nudos de unión de los elementos.

- $\mathbf{P}_v$ ,  $\mathbf{P}_s$ ,  $\mathbf{P}_T$ ,  $\mathbf{P}_b$ , son los vectores de fuerzas nodales equivalentes producidos por las fuerzas de volumen, de superficie, las deformaciones iniciales [ $\mathbf{P}_T$ ] y las tensiones iniciales [ $\mathbf{P}_b$ ]. Son todos conocidos y se obtienen por ensamblado de los correspondientes a los distintos elementos, según los nudos y direcciones adecuados. Respecto al vector “ $\mathbf{P}_b$ ” hay que decir que si el estado de tensiones iniciales actuantes sobre la estructura está auto-equilibrado, este vector es nulo.

Esto ocurre normalmente con las tensiones residuales. Sin embargo estas tensiones no están equilibradas si la estructura se obtiene partir de un material con unas tensiones auto-equilibradas y se elimina parte de ese material.



## **2. 1. 2. 10. CONDICIONES DE LIGADURA.**

La ecuación de equilibrio deducida anteriormente representa el equilibrio del conjunto de la estructura, considerando todos los elementos que la forman, así como todas las fuerzas exteriores. Para poderla resolver es necesario imponer las condiciones de ligadura, que indican cómo está sustentada la estructura.

La introducción de estas condiciones de ligadura se efectúa exactamente igual que en el método de rigidez para estructuras reticulares.

## **2. 1. 3. SISTEMAS COLOIDALES.**

### **2. 1. 3. 1. INTRODUCCIÓN.**

En la naturaleza no abundan las sustancias puras. La mayor parte de las sustancias que manejamos son mezclas, algunas de las cuales denominamos disoluciones, en los que distinguimos un disolvente (normalmente el componente en mayor proporción) y uno o varios solutos. En las disoluciones, las moléculas de disolvente y soluto tienen tamaños comparables, formando una mezcla homogénea.

Sin embargo, cuando a un disolvente se añaden partículas o macromoléculas de un tamaño muy superior, las propiedades de la mezcla cambian radicalmente. Es sabido que en una mezcla de arena y agua, la arena (sílice,  $\text{SiO}_2$ ) rápidamente se deposita en el fondo de la mezcla. Sin embargo, pueden prepararse mezclas en las que hasta un 40%, en masa de sílice, permanece durante años dispersa en el agua. En estas mezclas existen partículas mucho mayores de sílice, aunque todavía son de tamaño submicroscópico. Se dice que la mezcla es un coloide.



Los coloides se definen como suspensiones de partículas en un medio molecular. Para que estas suspensiones sean consideradas coloides, las partículas han de tener dimensiones en el intervalo 1 nm - 1  $\mu$ m.

Las disoluciones son sistemas termodinámicamente estables, es decir, sistemas que se encuentran en un estado energético menor que el de los componentes por separado. Además, en la mayor parte de los casos el soluto está constituido por moléculas normales, cuyo tamaño suele ser inferior a **1nm**. Si bien los solutos macromoleculares, como proteínas, polisacáridos, polímeros sintéticos, etc., pueden formar también disoluciones verdaderas, estos sistemas, sin embargo, presentan comportamientos específicos que les confieren ciertas particularidades, lo que hace que más bien se los considere como un tipo especial de “**sistemas dispersos**” o “**sistemas coloidales**”.

Los Sistemas Coloidales están compuestos por, al menos dos fases, una de ellas finamente dividida en pequeñas partículas (fase dispersa, fase discontinua) a las que rodea completamente la otra sustancia (fase dispersante, medio de dispersión, fase continua).

Como ejemplos de la familia de los sistemas dispersos podemos citar los siguientes:

- *Aerosoles*, son dispersiones de finas partículas en un medio de dispersión gaseoso, ejemplos comunes son la niebla y los humos.

- *Emulsiones*, se caracterizan por tener una dispersión de finas gotas de grasa en agua, por ejemplo la leche.

- *Suspensiones coloidales o soles*, se caracterizan por la dispersión de finas partículas sólidas en un medio líquido (aceite o agua), típicos ejemplos son los lodos y las pinturas.

- *Geles*, se crean en las dispersiones de macromoléculas en líquido, como por ejemplo las Gelatinas.

- *Dispersiones sólidas*, son dispersiones de partículas de sílice en una matriz sólida, o dispersiones de oro en vidrio, como por ejemplo: los ópalos, rubís, vidrios coloreados (medievales).



- *Coloides en un coloide*, son dispersiones de haluros de plata en un gel, como son los casos de emulsiones fotográficas.

Como **coloides de asociación** se conocen los agregados que se forman a partir de moléculas de jabón (sales de ácidos grasos de cadena larga) o de detergentes, llamadas en general, sustancias tensioactivas. Estos agregados reciben el nombre de micelas. Las disoluciones de sustancias tensioactivas pueden, por agitación, incorporar aire (gas) atrapado en forma de burbujas, lo cual constituye otra forma de coloides, **las espumas**. En este caso es una sola dimensión siendo el espesor de las películas que separan las burbujas, la que cae en el margen de tamaños coloidales. Algunas sustancias que tienen una estructura molecular rígida pueden formar estructuras muy organizadas que se conocen con el nombre de cristales líquidos. Cuando la sustancia dispersa adopta formas fibrosas (hilos, cabellos, filamentos, flagelos, etc.) el comportamiento es también de tipo coloidal. En este caso, son dos de las tres dimensiones, las que entran en el margen de tamaños coloidales; se puede apreciar algún ejemplo de estos sistemas coloidales, en la siguiente imagen:



Estos ejemplos pueden ser calificados de sistemas coloidales simples, en los que puede hacerse una clara distinción entre la fase dispersa y el medio de dispersión. Hay, sin embargo, otra familia de coloides más complejos, los **Sistemas coloidales reticulares**, en los que esta distinción es prácticamente imposible, ya que ambas fases están constituidas por redes entrelazadas. Sólidos porosos, vidrios compuestos, muchos geles y cremas, son de este tipo. Hay además otros coloides complejos, tal como los denominados **Coloides múltiples**, en los que pueden coexistir tres fases o más, en las que una suele ser el medio de dispersión



y las otras son fases dispersas finamente divididas. Un ejemplo puede ser un sólido poroso impregnado de un vapor condensado en equilibrio con el líquido, estando ambos, líquido y vapor, finamente divididos (rocas bituminosas). De la misma manera puede hablarse de Emulsiones múltiples en las que hay gotas de agua dispersadas en gotas de aceite que a su vez están dispersadas en agua. De interés especial dentro de los coloides múltiples son los denominados Biocoloides: Sangre, tejido óseo, tejido muscular, cartílago, etc.

Las propiedades esenciales de las dispersiones coloidales pueden atribuirse al hecho de que la relación entre la superficie y el volumen de las partículas es muy grande. En una solución verdadera, el sistema consiste de una sola fase, y no hay superficie real de separación entre las partículas moleculares del soluto y del solvente. Las dispersiones coloidales son sistemas de dos fases, y para cada partícula existe una superficie definida de separación.

De acuerdo a las fases que componen el coloide, se pueden distinguir distintos tipos:

Fase Dispersa	Fase Dispersante	Nombre	Ejemplo
Sólido	Líquido	Gel o sol	Gelatina
Sólido	Gas	Aerosol	Humo
Líquido	Líquido	Emulsión	Crema
Líquido	Gas	Aerosol líquido	Niebla
Líquido	Sólido	Emulsión sólida	Manteca
Gas	Sólido	Espuma sólida	Esponja
Gas	Líquido	Espuma líquida	Crema de afeitar
Gas	Gas	Mezcla	Aire

Las dispersiones coloidales encuentran usos en numerosas áreas científicas e industriales. En ambos ámbitos se aprovecha la estabilidad de los sistemas coloidales con el fin de mejorar e incluso encontrar nuevas aplicaciones de determinados materiales, por lo



que el estudio de la estabilidad o inestabilidad de los coloides cobra una importancia fundamental.

Algunas de las áreas industriales en las que regularmente pueden encontrarse sustancias en estado coloidal se señalan a continuación:

**-Productos químicos:** Pinturas, pigmentos, adhesivos, agentes espesantes, lubricantes, catalizadores, adsorbentes, emulsiones fotográficas, papel, tintas de impresión, industria de los productos del petróleo etc.

**-Industria farmacéutica:** Emulsiones, microemulsiones, cremas, materiales absorbentes, etc.

**-Materiales:** Metalurgia, enriquecimiento de minerales, aleaciones, cerámicas, cementos, fibras, alquitrán, etc.

**-Suelos:** Estabilización de suelos, permeabilidad, adsorción, procesos de intercambio iónico, etc.

**-Medio ambiente:** Contaminación atmosférica, aerosoles, espumas, purificación de aguas, lodos, pesticidas, etc.

**-Productos de consumo doméstico:** Leche, mantequilla y demás productos lácteos, bebidas, cosméticos, agentes de limpieza, aditivos alimentarios, etc.

Los sistemas coloidales se pueden clasificar termodinámicamente generando dos grupos: Los Liófilos y Liófilos, que se caracterizan con las siguientes propiedades:

- Coloides Liófilos.

- \* Son termodinámicamente estables.
- \* Sienten atracción por el disolvente.
- \* Se forman espontáneamente.
- \* Si el medio dispersante es agua, obtenemos un coloide Hidrofílico.
- \* Reversible y fácilmente reconstituido.

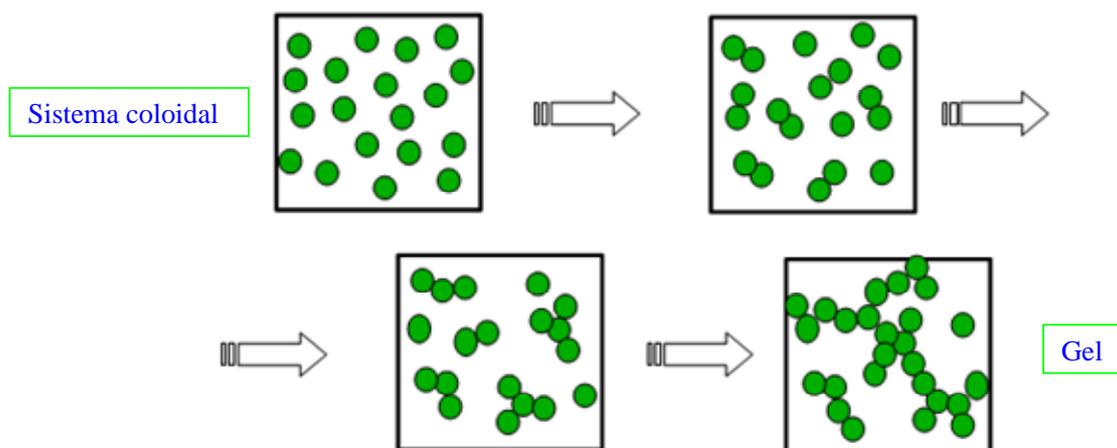


- Coloides liófilos.

- \* Son termodinámicamente inestables.
- \* No sienten atracción por el disolvente.
- \* Inestable e irreversible.
- \* Generalmente compuestos por partículas inorgánicas.
- \* No se forman espontáneamente.

Nuestro caso corresponde a una fase dispersa sólida y una fase dispersante líquida, es decir a un coloide Sol-Gel, ya que contiene el 40% de fase sólida y el resto de fase dispersante.

Un **sol** se caracteriza por tener todas las partículas libres sin unirse en el medio dispersante, mientras que en el **gel** las partículas están unidas unas con otras formando una maraña, teniendo un comportamiento como si fuera un sólido. A continuación se presenta esquemáticamente la transformación de un sistema Coloidal a un Gel.





### 2. 1. 3. 2. MOVIMIENTO DE UNA PARTÍCULA COLOIDAL.

Si una única partícula coloidal en un medio líquido, es lo suficientemente grande como para que se pueda hacer un tratamiento macroscópico de su movimiento, al menos en primera aproximación, el solvente se considera como un fluido continuo, y la partícula coloidal hace de condición de contorno para este fluido. La teoría que hay que utilizar para este análisis es la hidrodinámica, que pasamos a resumir. En hidrodinámica se definen los campos de velocidad  $\mathbf{u}$ , temperatura  $\mathbf{T}$  y presión  $\mathbf{p}$ , que son funciones locales de la posición y del tiempo, y se resuelven las ecuaciones de la hidrodinámica, que son ecuaciones acopladas en derivadas parciales.

Suponiendo que la temperatura y la densidad son constantes, la única ecuación a resolver es, la ecuación de Navier-Stokes:

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}$$

Esta ecuación para la velocidad del fluido,  $\mathbf{u}$ , no es más que la segunda ley de Newton aplicada al fluido.

→ El miembro de la izquierda, es la fuerza de inercial.

→ El miembro de la derecha contiene tres términos:

- El primer término es la fuerza hidroestática,  $-\nabla p$
- El segundo término es la fuerza interna o llamada también fuerza viscosa,  $-\eta \nabla^2 u$
- El tercer término es la fuerza externa, cualquiera que sea, por ejemplo la gravedad, ...,  $\mathbf{f}$ .

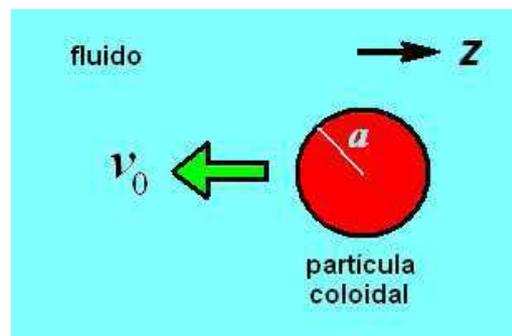


La importancia relativa de los términos de la fuerza de inercia y de la viscosidad genera un parámetro, llamado número de Reynolds,  $Re$ , que es el cociente entre la magnitud de la fuerza inercial y la magnitud de la fuerza viscosa:

$$Re = \frac{\rho v_0 a}{\eta}$$

Donde:

-  $v_0$ , es la velocidad típica (por ejemplo, la velocidad de la partícula lejos de un obstáculo),  $a$  es un parámetro típico que representa la dimensión de la partícula y  $\eta$  la viscosidad. Las condiciones de contorno sobre el campo de velocidades exigen que este se anule sobre cualquier superficie que limite el movimiento del fluido: son las llamadas no-slip boundary conditions.



La partícula va estar afectada por una serie de fuerzas de gravedad, fricción, aleatorias,... Teniendo en cuenta que la dimensión de la partícula y la viscosidad van a ser valores muy pequeños, obtendremos un número de Reynolds pequeño, que aplicado a la ecuación de Navier-stokes, comentada anteriormente, resulta que la fuerza del disolvente es directamente proporcional a la velocidad de la partícula. Por otra parte, las fluctuaciones de densidad en el solvente provocan una fuerza aleatoria que actúa sobre la partícula.

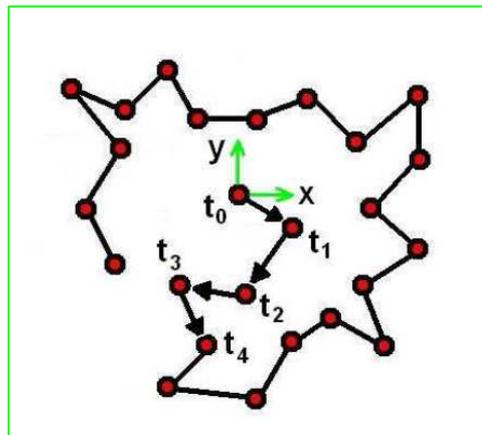


La ecuación del movimiento para una partícula coloidal contiene, por tanto, un término de fricción, uno aleatorio y uno que recoge las fuerzas externas y de interacción con otras partículas:

$$m\mathbf{a} = m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = F(\mathbf{x}) - \beta\mathbf{v} + \eta(t)$$

Esta ecuación se conoce como ecuación de Langevin.

El resultado de esta ecuación es el movimiento Browniano de la partícula, un movimiento errático, que se superpone al movimiento macroscópico descrito por la hidrodinámica, causado por la naturaleza discreta (no continua, como supone la hidrodinámica) del solvente.



### 2. 1. 3. 3. GELES Y VIDRIOS.

Las interacciones entre partículas afectan al movimiento Browniano, ralentizándolo. En determinadas condiciones, el movimiento de las partículas puede verse restringido, desapareciendo la difusión a tiempos largos. En estas condiciones, el sistema es un sólido viscoelástico, ya que conserva su forma y es capaz de soportar esfuerzos externos, siempre



que no superen un determinado límite. Desde el punto de vista estructural, los sólidos pueden ser cristalinos (con orden posicional de largo alcance) o amorfos (sin orden de largo alcance), también conocidos como vidrios o geles, por analogía con la transición sol-gel.

En ciertas condiciones es posible coagular un sol, de modo que se obtiene una masa semirígida gelatinosa que incluye todo el líquido, a este sistema se le llama gel. De acuerdo a las propiedades mecánicas que exhiben, los geles se clasifican dos grandes grupos:

- Los que se caracterizan por tener comportamiento principalmente elástico, un claro ejemplo es la Gelatina.
- Aquellos geles con propiedades principalmente de fluido. Un ejemplo podría ser el ácido silícico conocido como gel de sílice.

Hay pruebas que demuestran la transición de sol a gel y la inversa se realizan gradualmente (en los geles elásticos). Este hecho sugiere que no existe diferencia fundamental en la estructura de un sol y de un gel. Esto proviene en la formación de un gel, donde las partículas en el sol se unen para formar cadenas cortas o filamentos que se entrelazan de modo que la viscosidad del sistema aumenta llegando a un estado semisólido.

En los sistemas coloidales, los geles aparecen cuando entre las partículas coloidales hay una atracción suficientemente atractiva, por ejemplo, la atracción de van der Waals, o de depleción. Mientras que los vidrios se observan cuando la densidad de partículas del sistema es suficientemente alta, los geles se aprecian a bajas densidades y muestran muchas analogías con la transición sol-gel.

En este Proyecto, estudiaremos la respuesta mecánica de un gel coloidal sometido a una fuerza volumétrica, que representa la gravedad. Con ello, pretendemos reproducir la observación experimental de que los geles se comprimen por su propio peso.



### 2. 1. 3. 4. FUERZAS ENTRE PARTÍCULAS COLOIDALES.

Las fuerzas entre las partículas coloidales son debidas a la gran cantidad de superficie que existe en estos sistemas. Esta superficie lleva asociada una energía muchas veces mayor que la energía térmica:  $KT$ , por lo que las interacciones entre partículas coloidales son muy importantes; en particular, debido a estas fuerzas y en ausencia de ningún otro factor, las partículas coloidales pueden mostrar una gran tendencia a la agregación.

Para muchas aplicaciones es conveniente tener un coloide estable, es decir las partículas no se deben de pegar unas con otras (coagulen o floculen) y el coloide se mantenga en la fase Sol indefinidamente.

Las fuerzas entre partículas coloidales se pueden dividir en tres grandes grupos:

- Fuerzas de van der Waals.
- Fuerzas electrostáticas.
- Fuerzas entrópicas.

#### *Fuerzas de Van de Waals.*

Esta fuerza atractiva tiene un origen cuántico, y es debida a la interacción entre los dipolos instantáneos asociados a las nubes electrónicas atómicas. Se da incluso en átomos neutros. Es una fuerza atractiva, que decae como  $1/r^6$ , siendo  $r$  la distancia, excepto a largas distancias, que decae como  $1/r^7$  debido al retardo debido a la velocidad finita de propagación de la interacción. Para dos átomos idénticos con polarizabilidad  $\alpha$  y energía de ionización  $E_i$ , el potencial Van der Waals es:

$$V_{\text{vdW}}(r) = -\frac{3}{4} \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\alpha^2 E_i}{r^6}$$



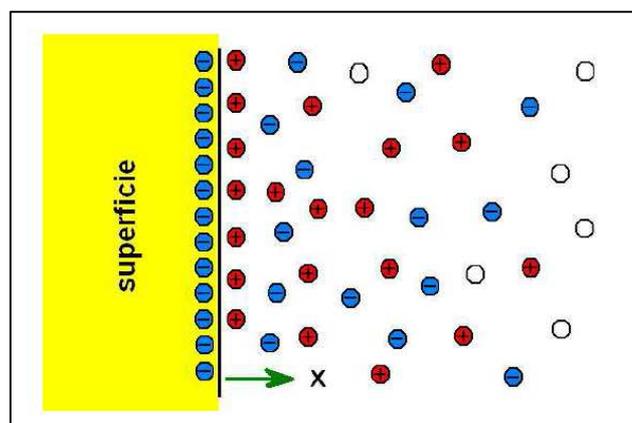
La fuerza de van der Waals entre dos superficies se puede calcular sumando todos los pares de átomos distintos entre los volúmenes de los cuerpos involucrados. Puesto que los volúmenes son grandes (como corresponde a partículas mesoscópicas), la fuerza de van der Waals es grande en magnitud. Supongamos dos cuerpos 1 y 2, de formas arbitrarias, con densidades electrónicas dadas por  $\rho_1(\mathbf{r})$  y  $\rho_2(\mathbf{r})$ . El potencial de interacción será entonces:

$$V_{\text{vdW}} = \int_{V_1} d\mathbf{r} \int_{V_2} d\mathbf{r}' \left( -\frac{C}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^6} \right) \rho_1(\mathbf{r}) \rho_2(\mathbf{r}')$$

### Fuerzas electrostáticas

Cuando las superficies de las partículas coloidales se encuentran cargadas, aparece una fuerza de origen electrostático. Ésta es una situación muy común, puesto que muchas partículas coloidales presentan carga eléctrica. Ahora bien, debido a que el solvente estará disociado en mayor o menor medida, esta carga superficial tenderá a estar apantallada por iones de carga opuesta del solvente, por lo que la interacción de Coulomb (que tendrá un alcance muy grande) queda modificada, y el análisis del problema se complica.

El sistema por lo tanto se puede representar esquemáticamente de la siguiente forma:





El potencial resultante es el introducido por Derjaguin, Landau, Verwey y Overbeek, DLVO, cuya fórmula es:

$$U(H_o) = 4\pi\epsilon \frac{a_1 a_2}{a_1 + a_2} \Psi_{01} \Psi_{02} e^{(-kH_{op})}$$

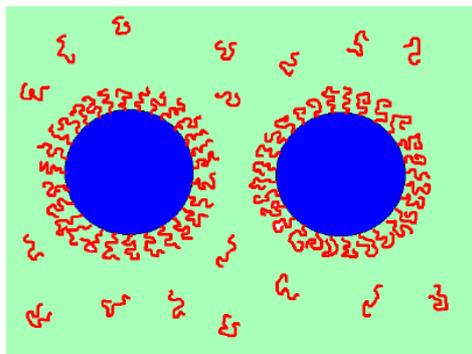
Dónde,  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$ , son los radios de las partículas;  $\Psi$ , el potencial superficial de las partículas;  $\mathbf{K}$ , es la constante de Boltzmann;  $\epsilon$ , es la constante dieléctrica y  $\mathbf{H}_o$  es la distancia entre las superficies.

### Fuerzas entrópicas.

Esta formada por dos tipos de fuerzas. Las estéricas provocan la estabilización de los coloides, mientras que las fuerzas de depleción generan atracción, las cuales se estudiarán en este Proyecto.

### Fuerzas estéricas.

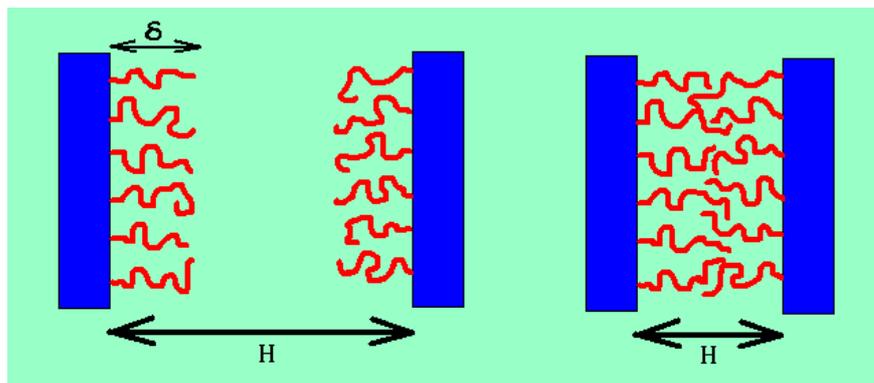
Este mecanismo de estabilización de coloides involucra la presencia de moléculas poliméricas (liofílicas), que se adsorben sobre la superficie de las partículas coloidales y que evitan que éstas floculen.





El efecto de la adsorción de polímero sobre las interacciones entre las partículas coloidales se puede entender como sigue:

La molécula polimérica posee una extensión característica  $\delta$ . Cuando la distancia entre las superficies de las partículas coloidales,  $H > 2\delta$ , no hay interacción o si la hay es muy pequeña. Sin embargo, si  $H < 2\delta$ , las capas de material polimérico adsorbidas se interpenetran, lo que resulta en una interacción repulsiva, de origen entrópico: el reducido espacio limita el movimiento de las moléculas, lo que reduce la entropía y hace a esta configuración menos favorable. Este comportamiento se puede observar en la siguiente imagen.



#### Fuerzas de depleción.

Cuando en un sistema coloidal se añaden macromoléculas de tamaño menor que las partículas coloidales, por ejemplo un polímero, aparece una atracción efectiva entre las partículas coloidales. Cuando dos partículas coloidales se acercan lo suficiente, las macromoléculas no pueden acceder a la región entre ellas, lo que causa un desequilibrio en la presión osmótica, que provoca una atracción efectiva entre las partículas. El primer modelo teórico que se desarrolló para describir este efecto es el de **Asakura Oosawa**, donde se considera que las macromoléculas forman un gas ideal (es decir, son completamente penetrables entre ellas), mientras que la interacción macromolécula-partícula es puramente repulsiva. El origen de la atracción es únicamente entrópico, y sus propiedades vienen dadas



por las características de la macromolécula. Este modelo describe correctamente la interacción real en sistemas coloide-polímero a bajas concentraciones de polímero, y viene dada por la siguiente expresión:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{ij} [U_{HC}(r_{ij}) + U_{AO}(r_{ij})]$$

Donde  $r_{ij}$  es la separación entre la partícula “ $i$ ” y la partícula “ $j$ ”. El término  $U_{HC}$  es un potencial repulsivo a distancias cortas, que puede ser de esferas duras o seguir una ley potencial.

$$\frac{U_{HC}}{KT} = \left(\frac{r_{ij}}{\sigma}\right)^{-n}$$

$$\frac{U_{AO}}{KT} = Q \left[ H(L, r_{ij}) \left[ L^2 \frac{r_{ij}}{\sigma} - \frac{1}{3} \left(\frac{r_{ij}}{\sigma}\right)^3 - A \right] \right]$$

Siendo:  $\sigma$  es el diámetro de la partícula. El potencial atractivo  $U_{AO}$  es el potencial de dos cuerpos debido a Asakura Oosawa:

Si tenemos en cuenta que  $\alpha$  es la relación de tamaños (diámetros) entre un polímero y una partícula, y la fracción de volumen de polímero  $\phi_p$ , y;

$$L = 1 + \alpha$$

$$A = \frac{2L^2}{3}$$

$$Q = \frac{3\phi_p}{2\alpha^2}$$

$$H\left(L, \frac{r_{ij}}{\sigma}\right) = \begin{cases} 1, & \frac{r_{ij}}{\sigma} < L \\ 0, & \frac{r_{ij}}{\sigma} > L \end{cases}$$



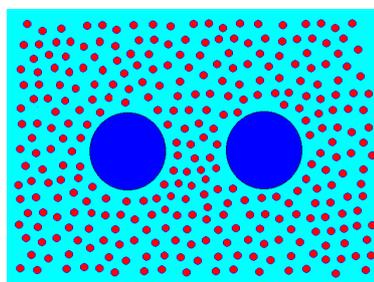
Los parámetros más importantes del potencial son la profundidad del pozo y el alcance de la interacción. La profundidad del pozo de potencial es determinado por la fracción en volumen del polímero,  $\phi_p$ , mientras que el rango está determinado por el diámetro del polímero añadido.

La energía se da en términos de  $KT$ , donde  $K$  es la constante de Boltzmann y  $T$  es la temperatura. Se tiene que tener en cuenta, que la intensidad de la interacción puede controlarse mediante la concentración polimérica, o la temperatura. Experimentalmente, sin embargo, la temperatura no puede modificarse sustancialmente, por lo que se utiliza la concentración de polímero como variable de control.

Las aplicaciones físicas inmediatas de este tipo de potencial son inmensas como por ejemplo la cristalización de proteínas, geles, pinturas y medicamentos.

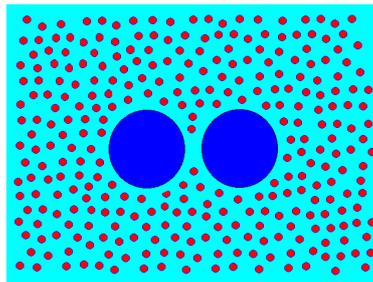
A continuación se presentan distintos casos que se pueden producir, dependiendo de la distancia donde se encuentren las partículas.

- **Distancias grandes:** las partículas (esferas grandes) se encuentran a una distancia suficientemente grande como para que existan muchas esferas pequeñas entre las dos grandes. De manera que el momento que las esferas pequeñas comunican a las grandes en todas las direcciones se compensa y la fuerza total sobre las esferas grandes es cero.

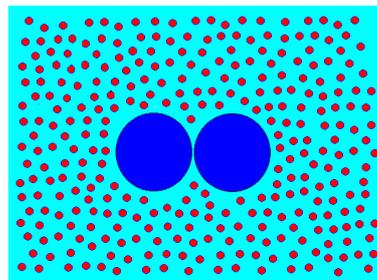




- **Distancias intermedias:** el espacio que existe entre las esferas grandes no caben demasiadas esferas pequeñas. Comienza una descompensación en el momento total transferido a lo largo de la distancia que une las dos esferas grandes.



- **Distancias pequeñas:** no existe espacio suficiente entre las esferas grandes, de manera que las esferas pequeñas no pueden penetrar entre las grandes y aquéllas comunican un momento neto a éstas que produce una atracción efectiva entre las esferas grandes.





### 2. 1. 3. 5. SIMULACIONES DE SISTEMAS COLOIDALES.

Para simular un sistema coloidal, debemos recurrir a la dinámica Browniana. Sin embargo, se ha demostrado sobradamente que si el sistema es suficientemente denso, la dinámica a tiempos largos es equivalente a la que se obtiene mediante dinámica molecular, ya que las colisiones juegan el papel de la fuerza aleatoria característica de la dinámica Browniana. Por tanto, en este Proyecto decidimos utilizar dinámica molecular en vez de la más exacta, pero también más lenta computacionalmente, dinámica Browniana.

La simulación computacional basada en la Dinámica Molecular (MD) es una poderosa herramienta para el estudio de sistemas complejos de la materia.

Esta técnica permite calcular las trayectorias (las diferentes posiciones de las partículas en función del tiempo) de los átomos o partículas que forman la materia y esto nos permite simular el comportamiento microscópico del sistema. A partir de ese conocimiento se pueden obtener los valores de diferentes propiedades macroscópicas (tanto estáticas como dinámicas).

En las simulaciones de MD se asume que la dinámica de las partículas (átomos, moléculas,...) está gobernada por las leyes de la mecánica clásica, es decir el movimiento de las partículas se realiza de acuerdo con las leyes de Newton del movimiento.

Para un sistema aislado de N partículas, la segunda ley de Newton indica:

$$\bar{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = m_i \frac{d^2 \bar{\mathbf{r}}_i}{dt^2}$$

$$\bar{F}_i = -\nabla_i V(\bar{\mathbf{r}}_1, \dots, \bar{\mathbf{r}}_N) = -\frac{\partial V(\bar{\mathbf{r}}_1, \dots, \bar{\mathbf{r}}_N)}{\partial \mathbf{r}_i}$$



En dichas ecuaciones  $\mathbf{m}_i$  y  $\vec{r}_i$  son respectivamente la masa y el vector posición de la partícula.  $\vec{F}_i$  es la fuerza que actúa sobre la partícula  $i$  y  $V_i$  es el potencial.

El potencial total será la suma de diferentes términos:

$$V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \underbrace{\sum_{i>j} V(i, j)}_{\text{Potencial entre 2 partículas.}} + \underbrace{\sum_{i>j>k} V(i, j, k) + \dots}_{\text{Potencial entre 3 partículas (corrección no aditiva)}}$$

Como primera aproximación se puede suponer que las correcciones no aditivas no son muy importantes y se pueden suprimir. El potencial vendrá dado por la expresión:

$$V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i>j} V(i, j) = \sum_{i>j} V(\vec{r}_{ij})$$

$$\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$$

La fuerza que actúa sobre la partícula "i" viene dada por la expresión:

$$\vec{F} = \sum_{i>j} \vec{F}_{ij}$$

$$\vec{F}_{ij} = -\vec{F}_{ji} = -\frac{\partial V_{ij}(\vec{r}_{ij})}{\partial \mathbf{r}_{ij}}$$



La simulación de MD consiste en resolver el sistema de  $N$  ecuaciones diferenciales, teniendo en cuenta que la fuerza viene dada por las ecuaciones  $\vec{F}$  y  $\vec{F}_{ij}$

Una simulación general de MD normalmente consta de tres etapas:

1) La primera etapa es la Iniciación, en esta etapa cada partícula se coloca en un lugar determinado del espacio y se le aplica una velocidad al azar, dependiendo de la temperatura que tenga el sistema. Se deja evolucionar el sistema con el tiempo, renormalizando las velocidades de las partículas para que el momento lineal del sistema sea cero y las velocidades sean consecuentes con la temperatura del sistema.

El propósito de esto último es relajar el sistema eliminando el exceso de energía (se impone al sistema un control de la temperatura).

2) La segunda etapa es la continuación de la primera pero sin renormalizar las velocidades, con el fin de estar seguro que se ha alcanzado el verdadero equilibrio. Durante este proceso se obtiene y conserva la información sobre la historia de las partículas, fundamentalmente sus trayectorias, es decir sus posiciones y velocidades en función del tiempo, ya que a partir de ellas se podrán obtener diferentes propiedades del sistema.

3) La tercera etapa es la obtención de resultados, en ésta se realiza un análisis de las trayectorias para poder determinar algunas de las propiedades dinámicas y estáticas del sistema.

Resumiendo, se puede indicar que las simulaciones de MD consiste en la integración de las ecuaciones de movimiento de Newton para determinar como varía la posición de las partículas en función del tiempo.



### 2. 1. 3. 6. AHORRO DE TIEMPO DE COMPUTACIÓN.

A la hora de calcular la fuerza o la energía, es donde se produce un mayor consumo de tiempo computacional en la simulación de MD.

Si se considera un sistema con interacciones de pares aditivas (como se hace en muchas simulaciones moleculares) tenemos que considerar la contribución de la fuerza de la partícula  $i$  con respecto a todos sus vecinos. Si no truncamos las interacciones, el cálculo de la energía o las fuerzas implica, que para un sistema de  $N$  partículas tenemos que evaluar  $N(N-1)/2$  pares de interacciones. Incluso si truncamos el potencial, aun tendríamos que calcular  $N(N-1)/2$  pares de distancias para describir cuales son las parejas que pueden interactuar. Esto implica que, si no tenemos ningún truco, el tiempo necesario para evaluar la energía es del orden de  $N^2$ . Hay técnicas eficientes para acelerar la evaluación de ambas, tanto interacciones de corto como largo alcance, en las cuales el tiempo de computación es del orden de  $N^{3/2}$ , en lugar de  $N^2$ . Estas técnicas son:

1. Lista Verlet.
2. Lista de Célula (o vinculados)
3. Combinación de Lista Verlet y célula

En este Proyecto se ha utilizado la Lista de Verlet, para reducir el tiempo de cálculo, que explicaremos a continuación.

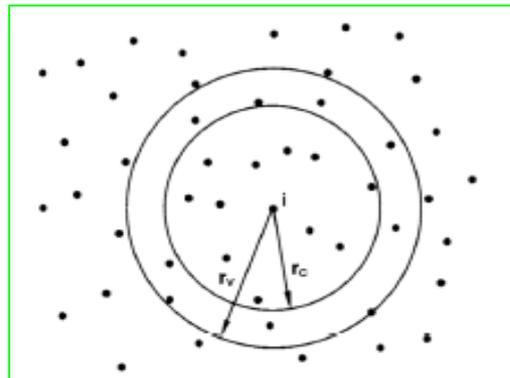
#### *1. Lista Verlet.*

Si se simula un sistema grande y se usa un corte para la interacción que sea mas pequeño que la caja de simulación,  $r_c$ , muchas partículas no contribuyen a la energía de la



partícula  $i$ . Es ventajoso por tanto excluir las partículas que no interactúan para reducir el alto gasto de tiempo en el cálculo de la energía. Verlet desarrolló una técnica de contabilidad, conocida comúnmente como Lista de Verlet o “Lista de vecinos”, la cual se ilustra en la siguiente figura. En este método se introduce un segundo radio de corte  $r_v > r_c$  y antes de calcular las interacciones, se hace una lista (lista Verlet) con todas las partículas dentro del radio  $r_v$ .

En el posterior cálculo de las interacciones, solo las partículas de esta lista son consideradas. Hasta ahora no se ha ahorrado ningún tiempo de CPU, ganaremos tiempo en el siguiente cálculo de las interacciones; si el máximo desplazamiento de las partículas es menor que  $r_v - r_c$ , entonces solo consideramos las partículas de la Lista de Vecinos de la partícula  $i$ . Éste es un cálculo del orden  $N$ . En el momento que una partícula es desplazada una distancia mayor que  $r_v - r_c$  entonces tenemos que actualizar la Lista de vecinos. Esta última operación es del orden  $N^2$ , aunque este paso no se lleva a cabo cada vez que se calcula una interacción.



La imagen representa la lista Verlet: una partícula  $i$  interactúa con las partículas dentro del radio de corte  $r_v$ . Las Listas Verlet contienen todas las partículas dentro de una esfera con radio  $r_v > r_c$ .



### 2. 1. 3. 7. UNIDADES REDUCIDAS.

En las simulaciones a menudo es conveniente expresar las cantidades tales como la fuerza, energía, temperatura, densidad, presión, y similares en unidades reducidas. Esto quiere decir que elegimos un sistema de unidades característico del sistema. Por ejemplo, se pueden tomar como unidades fundamentales la masa de las partículas, su radio y la energía térmica, y expresar todas las otras en función de estas básicas.

Aunque este sistema es muy útil en las simulaciones, es fundamental calcular la equivalencia con las unidades del Sistema Internacional, S.I.

*En nuestro trabajo los valores a considerar son:*

$$\text{Radio} = R = 1.$$

$$\text{Masa} = m = 1$$

$$\text{Velocidad} = V = 2[\text{considerada en la subrutina Thermoestatic}]$$

*Formulas a tener en cuenta:*

$$\text{Energía} = W \cdot d$$

$$\text{Fuerza} = m \cdot a$$

$$\text{Energía cinética} = E_c = \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2$$

$$\text{Energía cinética a partir del teorema de equipartición de la energía. } = E_t = \frac{3}{2} \cdot K \cdot T$$

$$\left. \begin{array}{l} E_c = E_c \\ \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2 = \frac{3}{2} \cdot K \cdot T \\ \frac{1}{2} \cdot 1 \cdot 2^2 = \frac{3}{2} \cdot K \cdot T \end{array} \right\}$$

$$KT = \frac{4}{3} \rightarrow \text{valor a considerar para la energía.}$$

El Teorema de equipartición de la energía, significa que en equilibrio térmico la energía se reparte en partes iguales entre sus varias formas; por ejemplo, la energía cinética promedio en un movimiento de traslación de una molécula debe ser igual a la energía cinética promedio en su movimiento de rotación.



En el S.I, estas magnitudes tienen el valor:

$$K = \text{constante de Boltzmann} = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ [J/K]}$$

$$T = \text{temperatura en kelvin} = 273 + 25 = 298 \text{ [K]}$$

$R = \text{radio en metro} = 10^{-6} \text{ [m]}$ . Éste es un valor típico del radio de partículas coloidales, que nosotros tomamos como unidad de distancia.

A continuación se presentan dos ejemplos de unidades aplicadas en nuestro sistema y obtendremos la equivalencia en el S.I.

**Por ejemplo, para conocer la equivalencia de la fuerza de magnitud:  $F = 0.1$ , en el S.I, se realizaría:**

$$\text{Energía} = W = F \cdot d \rightarrow F = W / d = KT / d = KT / R$$

Se igualan los sistemas para conocer la equivalencia del valor de la fuerza, entre nuestro sistema y el S.I.

$$\text{Sist. unidades a usar} = \text{Sist. Internacional}$$

$$F / (KT/R) = F / (KT/R)$$

$$\text{Se sustituyen valores: } \frac{0.1}{\frac{4/3}{1}} = \frac{F}{\frac{1.38e-23 [J/K] \cdot 298 [K]}{1e-6 [m]}}$$

Para una  $F = 0.1 \rightarrow F [N] = 3.08 \cdot 10^{-16} [N]$ , es el valor que corresponde en el S.I



Por ejemplo, para conocer la equivalencia de la magnitud:  $E = \text{módulo de Young} = 2.5 \cdot 10^4$  en el S.I, el proceso a seguir sería:

$$\text{Las unidades del E} \rightarrow [E] = \frac{[F]}{[S]} = \frac{KT/R}{R^2} = \frac{KT}{R^3}$$

Se igualan los sistemas  $\rightarrow$  *Sist. unidades a usar = Sist. Internacional*

$$\text{Para que sea adimensional} \rightarrow \frac{E}{KT/R^3} = \frac{E}{KT/R^3}$$

$$\text{Para un valor de } E = 2.5 \cdot 10^4 \rightarrow \frac{2.5 \cdot 10^4}{\frac{4/3}{1}} = \frac{E}{\frac{1.38 \cdot 10^{-23} [J/K] \cdot 298 [K]}{1 \cdot 10^{-18} [m^3]}}$$

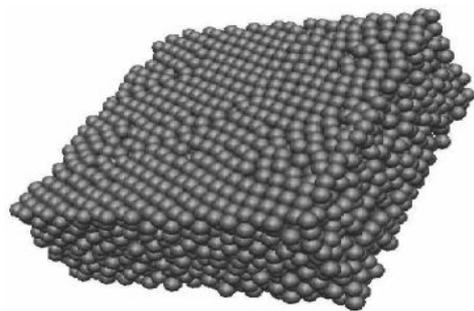
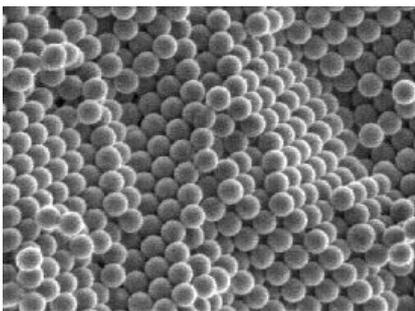
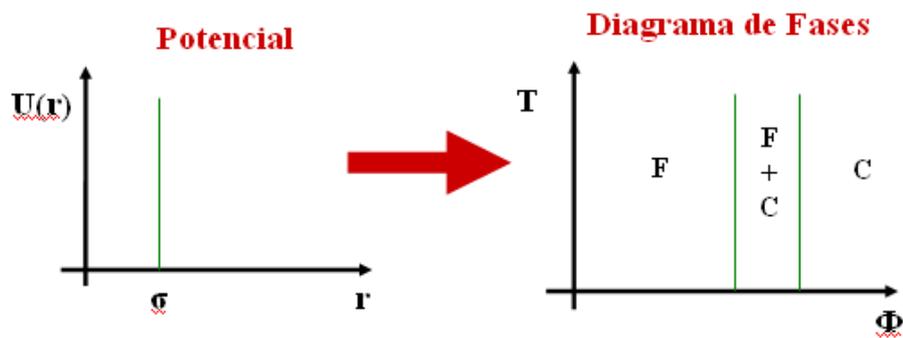
$E = 77.11 \text{ [N/m}^2\text{]} \rightarrow$  es el valor que equivale en el S.I, para el módulo elástico, E utilizado en nuestro sistemas de unidades.

El uso de unidades de reducción tiene su justificación porque cuando trabajamos con unidades reales (SI), nos encontramos con valores numéricos absolutos de las cantidades que estamos calculando (por ejemplo, la energía media de una partícula) mucho menores o mayores que uno. Si multiplicamos varias de esas cantidades usando la multiplicación estándar de punto flotante, nos enfrentamos a un riesgo claro de que, en algún momento, obtengamos un resultado que crea un exceso de capacidad computacional. Por el contrario, en unidades reducidas, casi todas las cantidades de interés son del orden de 1 (por ejemplo, entre  $10^{-3}$  y  $10^3$ ). Por lo tanto, si de repente nos encontramos un número muy grande (o muy pequeño) en nuestras simulaciones (por ejemplo,  $10^{42}$ ), entonces hay una alta probabilidad de que hayamos cometido un error en alguna parte. En otras palabras, las unidades reducidas hacen más fácil detectar errores.



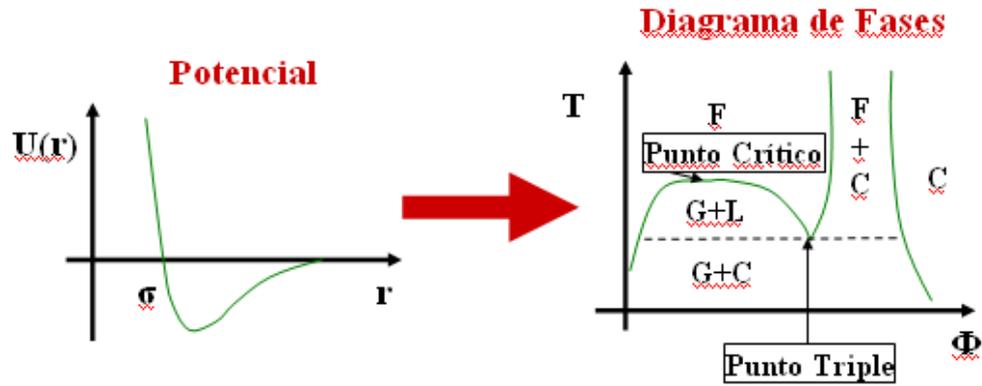
### 2. 1. 3. 8. DIAGRAMA DE FASES.

El caso más sencillo de sistema coloidal en el que podemos estudiar su diagrama de fases es el de esferas duras. En este sistema, todas las partículas son impenetrables, y de igual tamaño. El diagrama de fases está entonces determinado por la entropía del sistema, y presenta únicamente una fase; fluido y una cristal. En las siguientes imágenes se muestran ejemplos de cristales experimentales y de simulaciones.

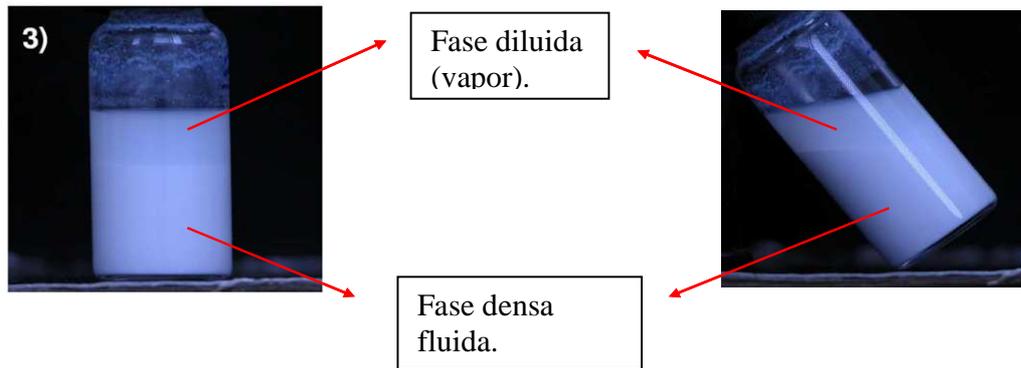




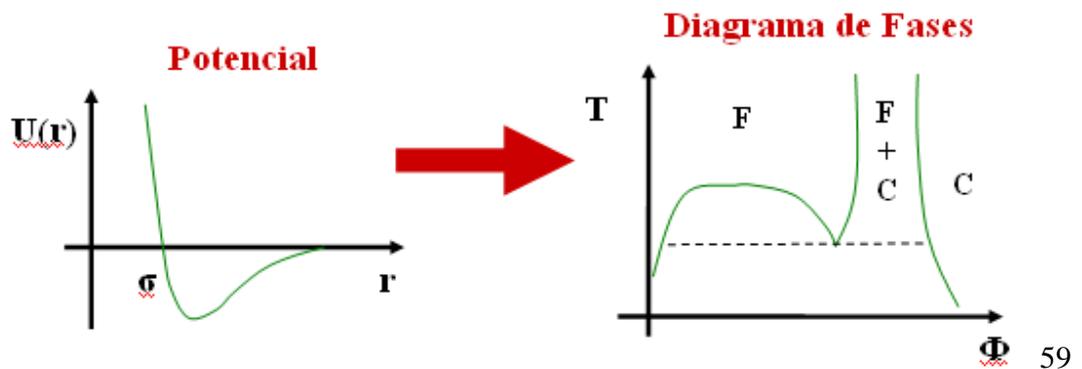
Si las esferas duras, tienen una atracción, se tiene entre ellas el siguiente diagrama de fases, provocando la aparición de una transición gas-líquido (con sus puntos crítico y triple).



Se aprecia la coexistencia de dos fases fluidas con distinta densidad y una fase cristal.

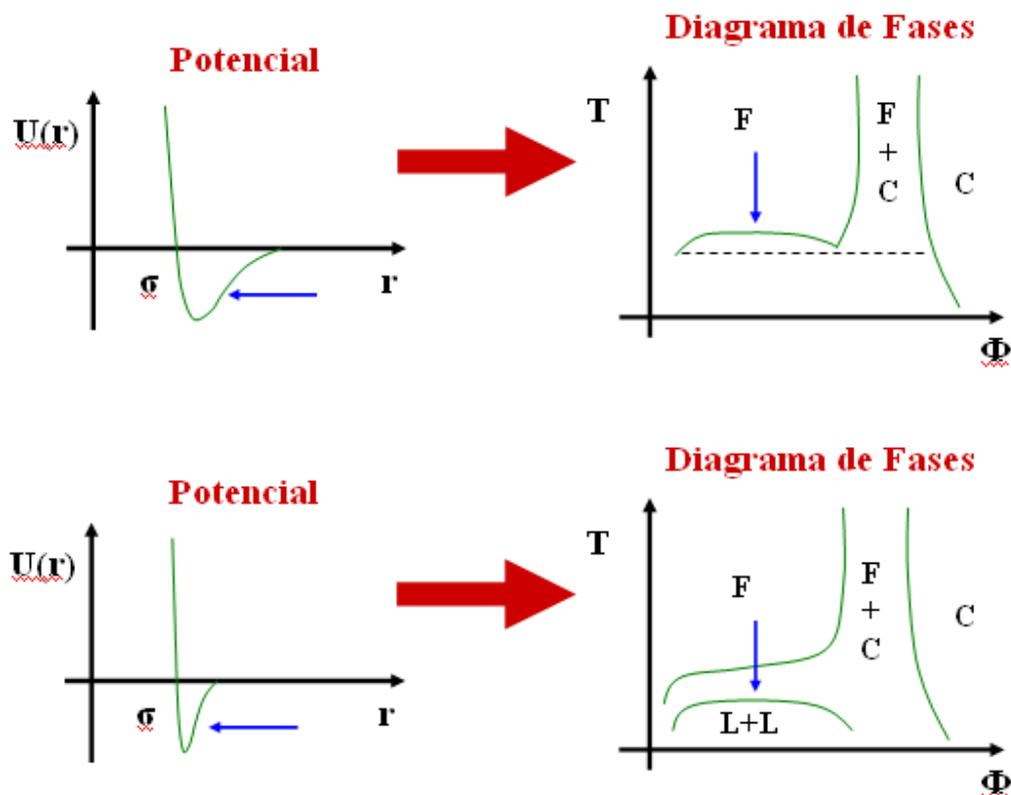


Es interesante estudiar el efecto que tiene el rango de las atracciones en el comportamiento global del diagrama de fases (recordemos que en el caso del potencial de depleción, el rango viene dado por el tamaño del polímero añadido).

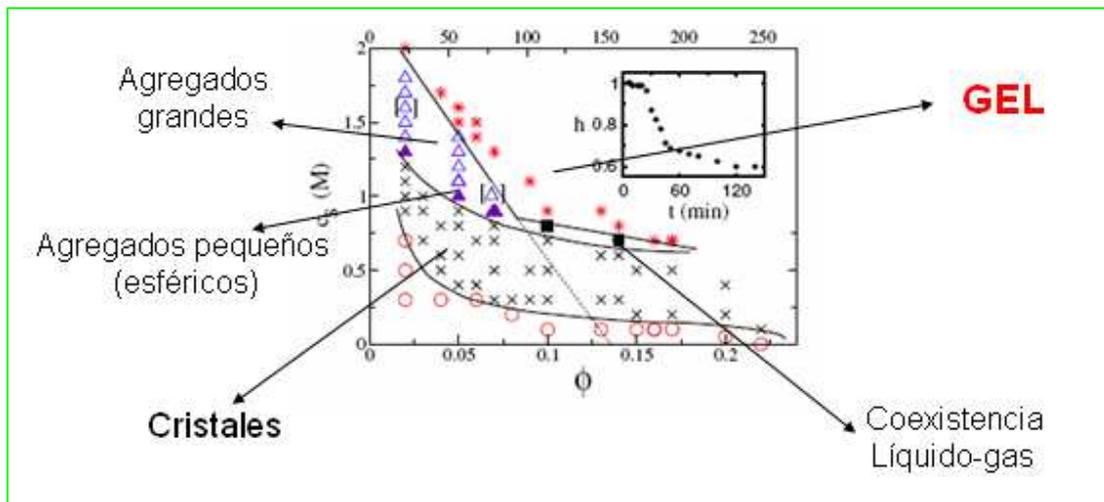
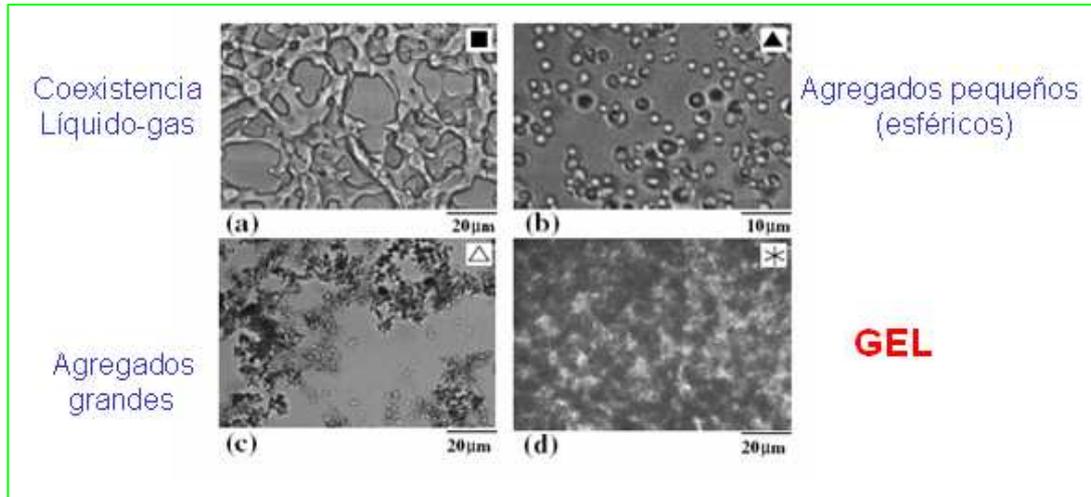




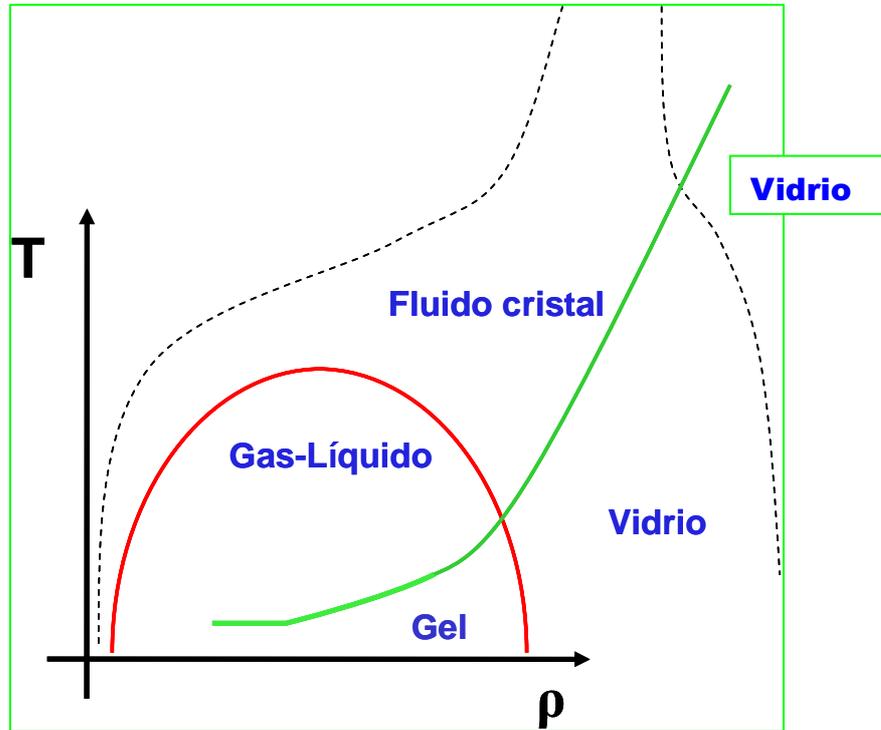
Se observa que en la evolución del diagrama de fases, si se produce una disminución del alcance de la interacción, el punto crítico también disminuye, provocando la desaparición de la transición de las fases, llegando directamente a encontrar que la transición líquido-vapor es metaestable respecto a la cristalización.



En las siguientes imágenes se muestran los diagramas de fases obtenidos experimentalmente en sistemas con atracciones de corto alcance. En ellas se puede ver como aparecen, además de las fases fluido y cristal, de acuerdo con los diagramas de fases presentados anteriormente, unas fases de agregados pequeños, grandes, y geles.



Típicamente, los geles se observan en sistemas con atracciones intensas de corto alcance. Su origen no está todavía completamente claro, pero la hipótesis más aceptada los interpreta como estados en los que el líquido ha sufrido una transición vítrea, y por tanto está fuera de equilibrio, y no permite que el sistema global siga evolucionando hacia una situación con dos fases separadas. La siguiente figura muestra esquemáticamente esta hipótesis.





## 2. 2. MOTIVACIÓN Y JUSTIFICACIÓN.

El motivo de realización de este trabajo de investigación se debe a la existencia cada vez mas generalizada de los geles en nuestra vida cotidiana.

El objetivo es aplicar el MEF a estos sistemas que son muy heterogéneos y donde no se han aplicado hasta el momento. Por un lado, se exige el uso de elementos no lineales y por otro lado la estructura del material hace que el mallado sea muy heterogéneo, lo que conduce a tener modelos con una importante dificultad. Si conseguimos el objetivo de reproducir los resultados de dinámica molecular mediante MEF, a parte de poder obtener diagramas de una forma sencilla de desplazamientos de las partículas, también podremos analizar otro tipo de resultados, así como las distribuciones de las tensiones en cualquier dirección,..., de un modo más sencillo que mediante MD.

Tras realizar distintos estudios mediante el MEF, nos planteamos cambiar la dirección de la investigación, decidiendo estudiar los Geles mediante la Dinámica Molecular. Focalizaremos nuestro estudio en la evolución de la interfase, caracterizada por la quinta partícula más alta, para utilizar el colapso de geles coloidales como banco de pruebas de los modelos aquí desarrollados. Tras comparar y verificar ambas simulaciones se decide si los resultados de MEF pueden ser complementarios a los obtenidos mediante la MD.



### 3. MATERIALES Y MÉTODOS.

En este Proyecto de investigación, se van a utilizar dos métodos: Dinámica Molecular, MD y Elementos Finitos, MEF. Se utilizará el primero de ellos para modular la respuesta de un gel coloidal a una fuerza volumétrica, y se verá la capacidad del segundo de reproducirlo.

Los pasos que seguiremos para obtener nuestros objetivos serán:

#### 1- Configuración de partida de la MD.

Las configuraciones iniciales para la resolución del sistema mediante MEF se han obtenido de las simulaciones de MD, que se describirán más adelante. En ellas, se trabaja con un sistema de 1000 partículas, con condiciones de contorno periódicas en las paredes laterales (que deben implementarse en el MEF, como se describe en el punto siguiente), a una fracción de volumen fija (del 40%), y con la interacción atractiva de Asakura-Oosawa explicada anteriormente. El parámetro  $\phi_s = \phi_p$ , que aparece en la interacción se ha fijado a 0.80, lo que induce una atracción con un mínimo muy intenso de  $16 k_B T$ , donde  $k_B T$  es la energía térmica.

Estos ficheros deben adecuarse al formato de Ansys, que será la aplicación comercial usada en este Proyecto.

#### 2 – Simulación mediante el MEF.

En este paso debemos mallar el sistema, creando elementos lineales entre dos partículas que forman un enlace. Las propiedades mecánicas del elemento deben escogerse cuidadosamente para reproducir el comportamiento encontrado en las simulaciones. Debemos incluir además las condiciones de contorno periódicas y las ligaduras del sistema (nodos empotrados). Como en las simulaciones MD, se considerará



una fuerza volumétrica vertical hacia abajo, y centraremos el estudio en la evolución de la interfase superior, caracterizada por la posición de la quinta partícula más alta.

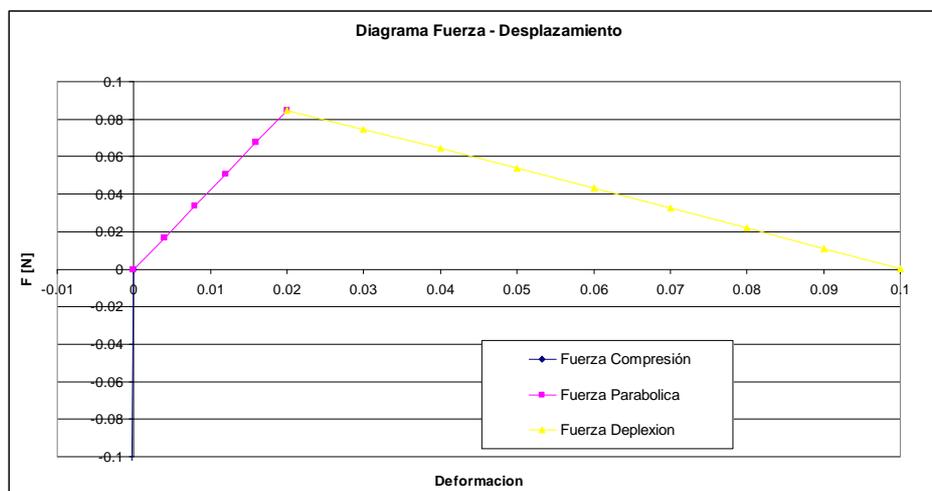
### 3 – Resolución del problema.

Una vez obtenidas los resultados de las dos vías de investigación, se comparan para verificar si el MEF, puede complementar la metodología de MD para los geles.

### 3. 1. MODELOS REALIZADOS EN ELEMENTOS FINITOS: ANSYS.

La idea principal en la aplicación del MEF a geles radica en utilizar las partículas coloidales como nodos del mallado, y las interacciones entre ellas se modelan mediante un elemento, que describa lo más fielmente posible sus propiedades. Estas deben de tener la capacidad de soportar esfuerzos de tracción, ser incomprensible y no oponer resistencia a la flexión.

La curva Tensión-Deformación del material proviene del potencial de interacción entre las partículas de Asakura-Oosawa, comentado anteriormente. Dicha curva presenta tres tramos claramente diferenciados, aunque idealmente debería de existir solamente dos: la zona de compresión y la zona de depleción, pero se hace uso del tramo parabólico, con el objeto de unir ambas curvas.



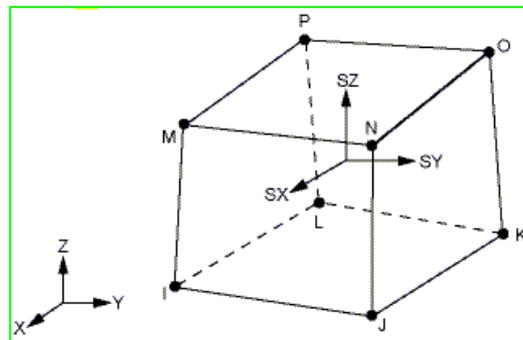


En principio, esta curva debe incluirse como una propiedad del material, de tal manera que las fuerzas que se apliquen en el modelo, generan unos desplazamientos resultantes en base a ella.

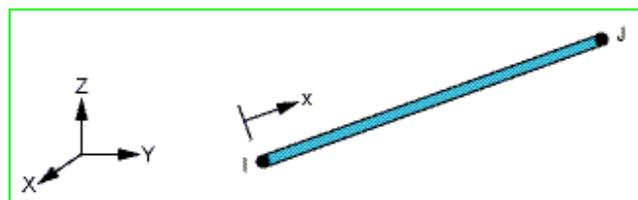
Para conseguir este comportamiento se han analizado distintos elementos de una manera minuciosa y profunda. Se han llegado a estudiar los siguientes elementos: **Solid 45**, **Link 8**, **Link 10**, **Link 11**, **mass 21**, **Link 180** y **Combin 39**, generando los modelos necesarios para justificar que el comportamiento resultante de los elementos no cumplieran con el que esperábamos.

La desestimación de los elementos ha sido por los siguientes motivos:

- **Elemento Solid 45:** elemento típico para modelizar modelos con problemas estructurales en 3D. Nuestro modelo es 3D, pero debe ser modelizado mediante elementos que contengan exclusivamente dos nodos.



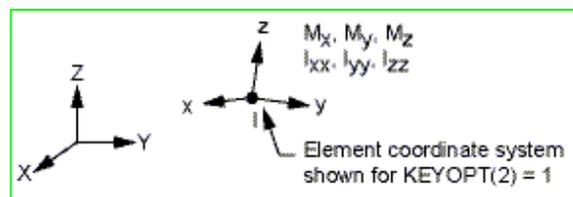
- **Elemento link 8:** contiene tres grados de libertad por cada nodo, lo que permite trabajar en 3D. Soporta esfuerzos de tracción, compresión y no opone resistencia a la flexión.



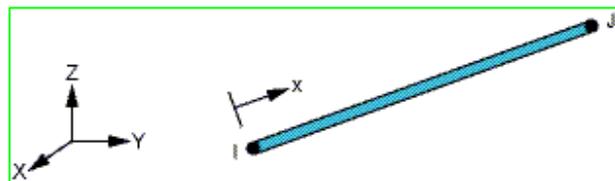


Realizamos varias pruebas con este elemento, entre las que se encontraban un cubo, formado por ocho nodos, de los cuales cuatro tenían restringidos todos sus g.d.l. y en los cuatro restantes se aplicaba una fuerza volumétrica de compresión. Impusimos un pequeño desplazamiento inicial de valor  $1 \cdot 10^{-6}$ , con el objetivo de ayudar a la convergencia y a continuación aplicar la fuerza volumétrica o el desplazamiento deseado. Como las condiciones iniciales de partida no correspondían con la realidad, y tras barajar distintas opciones, decidimos seguir investigando otros elementos.

- **Elemento mass21:** se intentó añadir al elemento “Link8” una masa a cada elemento con sus correspondientes propiedades, por ello se eligió el elemento “mass21”, con el objetivo de eliminar el desplazamiento inicial que estábamos estableciendo, pero se llegó a la conclusión que se iba a duplicar el número de elementos, generando modelos muy pesados de manejar y como consecuencia un aumento importante de tiempo de cálculo.

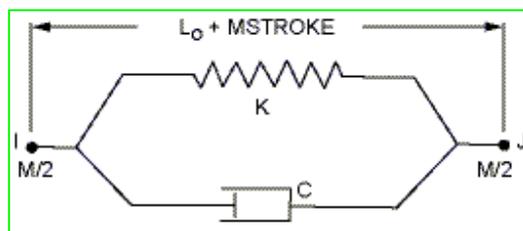


- **Elemento link 10:** contiene tres grados de libertad y no opone resistencia a la flexión. Se descartó puesto que los elementos pueden trabajar bien a esfuerzos de compresión o a tracción, pero esto debe fijarse a priori. En nuestro modelo nos podemos encontrar para el mismo caso elementos con esfuerzos a tracción y otros con esfuerzos a compresión.





- **Elemento link 11:** lo analizamos con el objeto de eliminar el desplazamiento inicial que se aplica al modelo “Link 8” para ayudarle a la convergencia. Este elemento se caracteriza por la ventaja de introducir valores de propiedades, tales como la rigidez, masa, coeficiente de amortiguamiento viscoso, pero resultaba muy complicado de analizar, por lo tanto también se desestimó.



Durante todo este proceso de investigación en la búsqueda del elemento adecuado, en paralelo expusimos el problema en distintos foros, nos pusimos en contacto con expertos en la materia, tales como profesores de distintas Universidades y empresas que utilizan esta herramienta, como puede ser ITP, S.A.

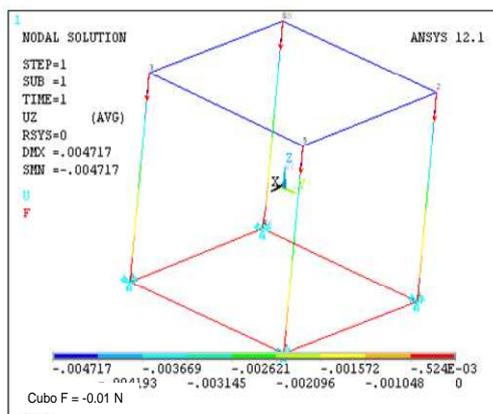
El Dr. Joseba Albizuri del departamento de Ingeniería Mecánica de la Universidad del País Vasco, nos indicó unas pautas a seguir y unos elementos que podrían servir, entre los cuales se encontraban el Combin39 y el Link180.

- **Elemento Combin39:** contiene tres grados de libertad por cada nodo y no opone resistencia a la flexión ni a la torsión. Su principal propiedad es la posibilidad de introducir la parte de la curva del material bajo el comportamiento de tracción y de compresión, pero no la de depleción. Se generaron distintos modelos, donde aplicábamos bien fuerzas volumétricas a compresión o desplazamientos iniciales, para verificar que el modelo seguía la curva del material introducido, pero los resultados obtenidos no eran fieles a dicha curva, concretamente en la zona de depleción y compresión.



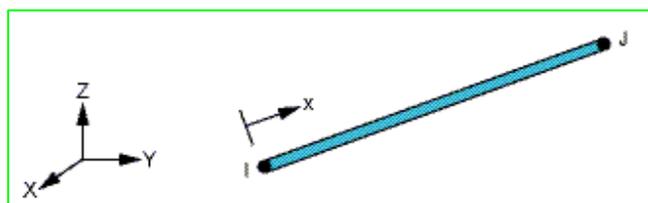
A continuación se presentan los resultados de compresión, obtenidos para el modelo de la figura con el elemento Combin39. El sistema estudiado es un cubo de 8 nodos, con la cara inferior empotrada (desplazamiento nulo) y se aplican una serie de fuerzas volumétricas en la dirección  $-Z$  de la cara superior.

En la tabla se compara el valor del modelo, con la interpolación de la curva del material introducida y se observa que no coincide, lo que conlleva a descartar este elemento.



COMPRESION	ANSYS		INTERPOLACION
	F	D	
cubo_39_F_001C.rst	-0.001	-0.000472	-0.0000025
cubo_39_F_01C.rst	-0.01	-0.004717	-0.000025
cubo_39_F_1C.rst	-1	-0.471698	-0.0025
cubo_39_F_2C.rst	-2	-0.943396	-0.005

- **Elemento Link180:** elemento con tres g.d.l por cada nodo, esta formado por dos nodos y es capaz de soportar esfuerzos axiales de tracción, compresión y no opone resistencia a la flexión. De todos los elementos estudiados viene a ser el más adecuado, pero sigue sin reconocer alguna de las zonas de la curva del material.



Ante la imposibilidad de utilizar la curva exacta para el elemento, decidimos modificar la línea de investigación buscando un elemento sencillo, que de forma efectiva



reprodujera el comportamiento global del Gel. Éste se obtuvo haciendo uso de la metodología de la Dinámica Molecular mediante un código generado en el lenguaje de programación Fortran. Los resultados obtenidos mediante este método serán los que se intentarán reproducir por el MEF.

Se escoge el elemento LINK180, porque es el elemento que más se asemeja al comportamiento que nosotros perseguimos, además fue uno de los que nos recomendó el Dr. Joseba Albizuri.

La principal propiedad de todos los elementos considerados es el módulo elástico, por lo que éste será el parámetro que variaremos para optimizar el acuerdo con las simulaciones de MD. Además, observamos que la respuesta del sistema dependía de la secuencia en la que aplicaban las distintas fuerzas, por lo que se decidió seguir la misma secuencia que en las simulaciones de MD.

El modelo estará basado en el uso de dos materiales, uno prácticamente incomprensible y otro que se pueda deformar. Esta diferencia la realizaremos a través del valor que se asigne al módulo de Young, E, los cuales serán:

- Mat, 1  $\rightarrow E = 2.5 \cdot 10^4$   $\rightarrow$  este valor será variable, para ajustar la curva obtenida a través de la Dinámica Molecular.
- Mat, 2  $\rightarrow E = 1 \cdot 10^{12}$   $\rightarrow$  este material es incomprensible, es decir, no se puede comprimir más, se mantiene fijo.

El mallado se realiza cogiendo los centros de las partículas como nodos, y creando elementos entre cada par de partículas en función de la distancia entre sus centros y siguiendo el siguiente criterio:

- Si la longitud es mayor que 2.2  $\rightarrow$  no se crea ningún elemento.
- Si la longitud es mayor que 2 y menor 2.2  $\rightarrow$  se crea el mat, 1. Elástico lineal
- Si la longitud es menor o igual a 2  $\rightarrow$  se crea el mat, 2. Incomprensible.



Mediante el MEF, se analizarán dos modalidades: una aplicando fuerzas volumétricas instantáneas sobre un modelo y la otra ejecutando fuerzas volumétricas continuas. En este caso se genera el mallado por cada fuerza aplicada, basándonos en las posiciones de las partículas del anterior caso resuelto.

Los modelos tendrán una serie de restricciones, para evitar que se muevan como sólido rígido. Para ello, hay que fijarlo mediante algún nodo, para que el estado de carga considerado sea capaz de llegar a su convergencia.

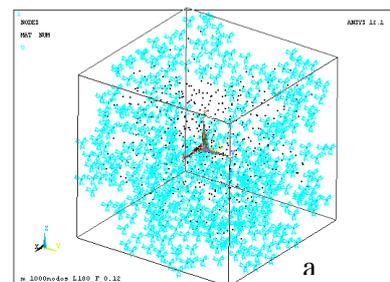
Las partículas de los sistemas se alojan en una especie de caja virtual. El modelo inicial estará formado por 1000 partículas y se imponen restricciones en las caras de la caja. Como se discute a continuación, en nuestro caso se fijarán las partículas de la cara inferior y de las caras laterales. El resto de partículas por su aproximación se pueden ver afectadas, por lo que se decide aplicar las condiciones periódicas al modelo inicial y generar un modelo final de 9000 partículas con las mismas restricciones, sobre el cual, aplicaremos las fuerzas volumétricas y mostraremos los resultados.

### Modelo de 1000 partículas.

Valor del lado del cubo,  $a = 21,95$

Nodos a restringir.

- Base, los nodos entre -8 y -12 en coordenada Z.
- Laterales, los nodos entre 9 y 11, por cada dirección.

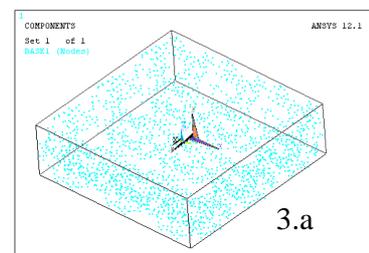


### Modelo de 9000 partículas.

Valor de la arista de la caja:  $3 \cdot a = 3 \cdot 21,95 = 65,85$

Nodos a restringir.

- Base, los nodos entre -8 y -12 en coordenada Z.
- Laterales, los nodos entre 31 y 33, por cada dirección.



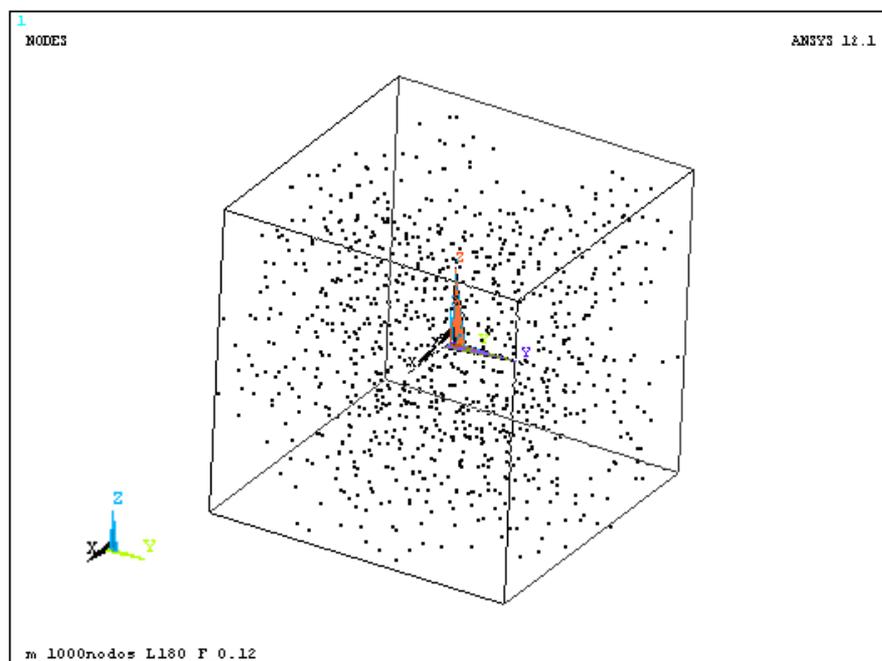


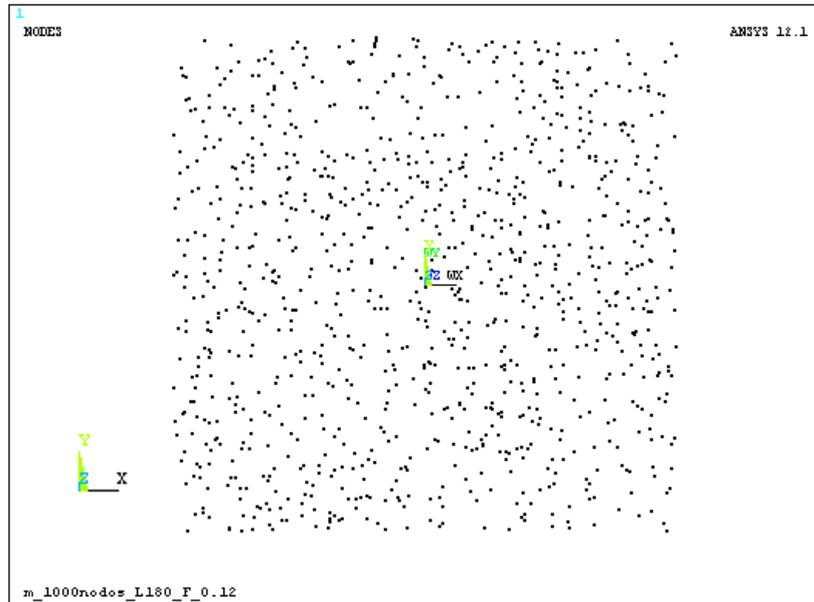
El estado de carga a tener en cuenta del modelo consistirá en aplicar una fuerza volumétrica vertical hacia abajo al resto de nodos que no poseen una restricción, del mismo valor que las aplicadas en las simulaciones de la Dinámica Molecular, que comprimen el sistema.

Según los modelos realizados, se generarán unas macros, es decir, unos códigos de programación de Ansys. De esta forma, se automatiza el proceso de obtención de resultados y se utilizan los mismos criterios de convergencia en todos los casos. Algunas de estas macros se presentan en los apéndices de la presente Memoria.

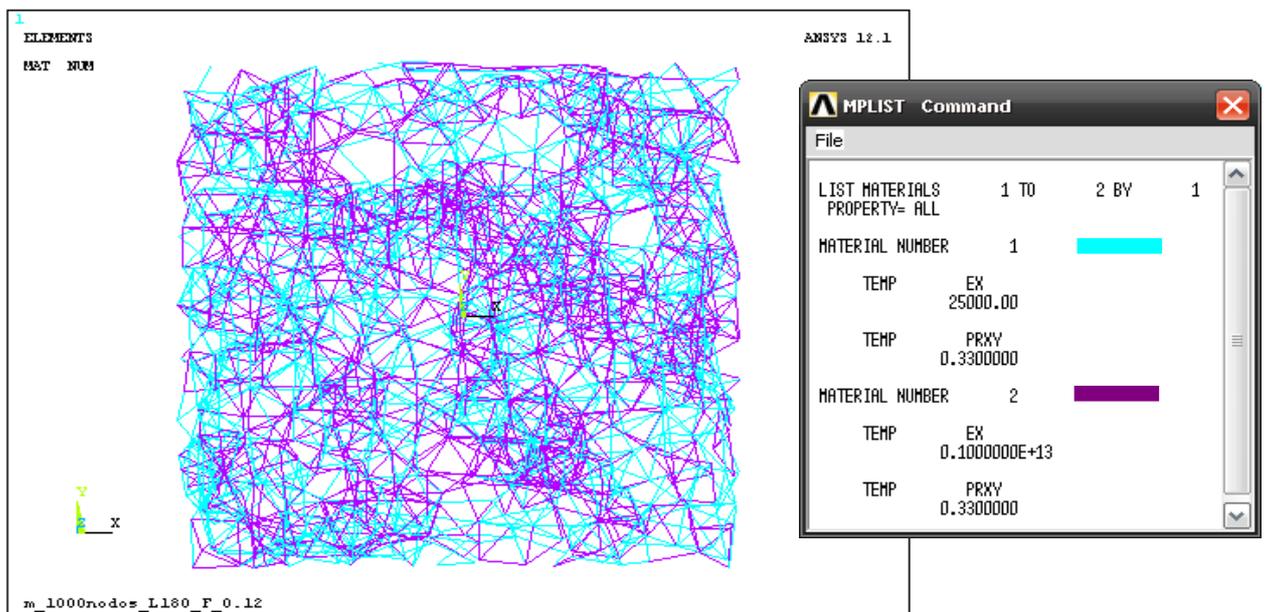
En la siguiente secuencia se presentan los pasos seguidos:

- 1- Lectura del fichero de la posición de los nodos. En este caso de 1000 nodos, para una configuración cualquiera:



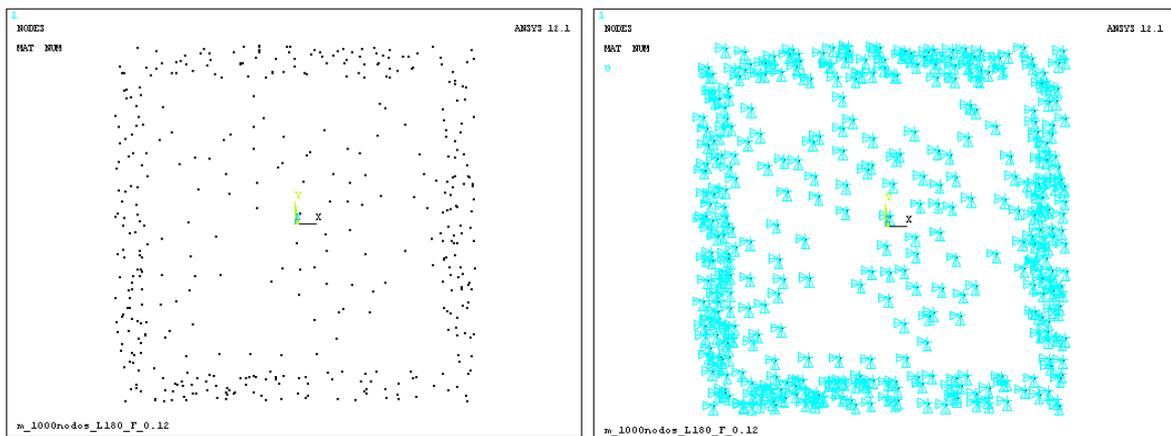


- 2- Se crean los elementos, que dependiendo de su longitud, serán del material 1 o el material 2.

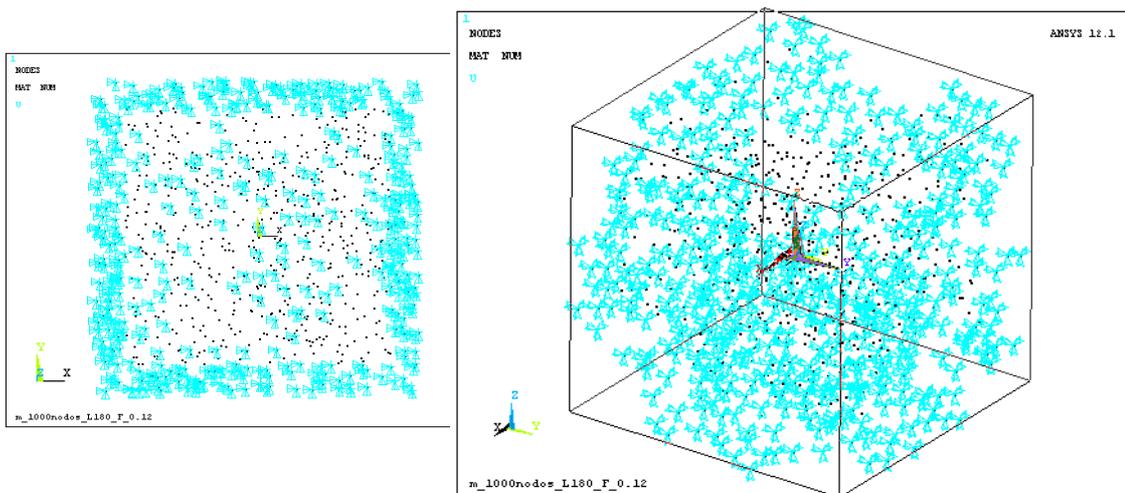


- 3- El siguiente paso es seleccionar los nodos a restringir. Se impondrá la condición de fijar todos sus grados de libertad (g.d.l). Como se ha explicado anteriormente, los nodos estarán ubicados en la base y en las cuatro caras laterales.

Hemos creado un componente para seleccionar los nodos a empotrar denominado: **“base1”**

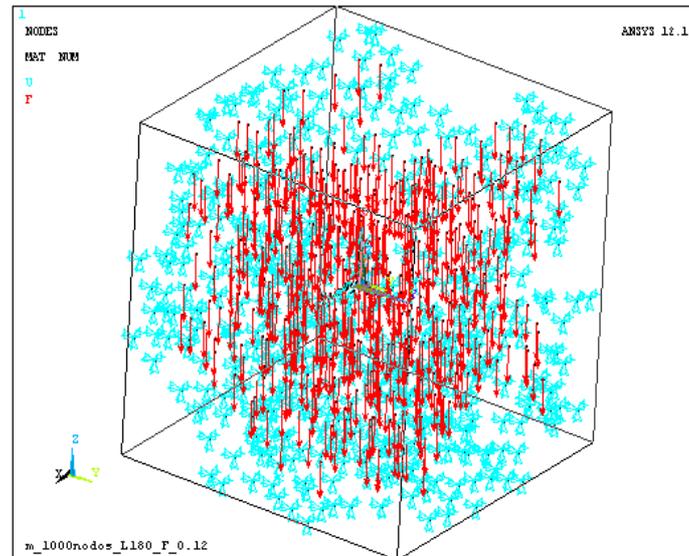


La visualización del modelo con las restricciones, es:





- 4- Por último hay que introducir las fuerzas volumétricas de compresión a los nodos que no contienen ninguna restricción, que en este caso tendrá un valor de  $F = 0.12$ .



Las simulaciones más importantes, son las que redactaremos en este documento, ya que no tendría sentido documentar todas las pruebas realizadas, puesto que muchas de ellas han sido necesarias para descartar esa línea de investigación, por lo que nos centraremos básicamente en tres modelos. Partiremos de un modelo sencillo de 11 nodos, para verificar que el remallado se realizaba correctamente y genera la distinción entre los materiales. Una vez comprobado se traslada al modelo de 1000 partículas con el mismo objetivo, pero con la peculiaridad que los resultados no son adecuados por la cercanía de las restricciones laterales, por lo que se crea un modelo final de 9000 partículas, sobre el cual trabajaremos con los resultados finales.



### 3. 2. MODELOS REALIZADOS CON DINÁMICA MOLECULAR.

Las simulaciones de Dinámica Molecular se plantean en el presente Proyecto como una forma alternativa de estudiar el comportamiento mecánico del sistema, con el que comparar los resultados de MEF. Además, dadas las dificultades para estudiar mediante MEF del problema, la MD se ha utilizado para validar el modelo efectivo propuesto, descrito en la sección anterior.

Se trabaja con un sistema de 1000 partículas, con condiciones de contorno periódicas en las paredes laterales y la cara inferior se consideran impenetrables, con una fracción de volumen fija (del 40%), y con la interacción atractiva de Asakura-Oosawa explicada anteriormente. El parámetro  $\phi_s$ ,  $\phi_p$ , que aparece en la interacción se ha fijado a 0.80, lo que induce una atracción con un mínimo muy intenso de  $16 k_B T$ , donde  $k_B T$  es la energía térmica. Hay que señalar que en el MEF no se tienen en cuenta el efecto de la temperatura y todas las partículas son del mismo tamaño. El alcance de la atracción se ha tomado igual al 10% del tamaño de las partículas, y el paso de tiempo igual a 0.0025, suficientemente pequeño para manejar las fuerzas de interacción y la fuerza externa sin introducir errores en la integración de las ecuaciones de movimiento. En los sistemas polidispersos, es decir con distintos tamaños de partículas, se aplica un valor de 0.1 sobre el radio de la partícula para considerar la anchura de la distribución de tamaños.

El estudio se basará sobre diez configuraciones.

En la simulación de MD se estudian dos modalidades:

- 1- Aplicando cargas instantáneas, se genera un modelo inicial de 1000 partículas sin considerar ninguna fuerza externa y sobre éste se aplican las distintas fuerzas volumétricas, sin considerar los resultados del anterior caso resuelto.
- 2- Aplicando cargas continuas, en este caso se tienen en cuenta las posiciones de las partículas del anterior estado de carga resuelto. Se inicia el proceso aplicando una fuerza volumétrica, se equilibra el sistema, y se toma la posición de la quinta



partícula más alta, que caracteriza la interfase superior. A continuación, se toma la configuración final como configuración inicial para aplicar el siguiente estado de carga.

Las fuerzas volumétricas que se aplican sobre los modelos van desde un valor nulo hasta -0.25, con un incremento constante de -0.01.

Ambas modalidades contienen el mismo código, distinguiéndose las siguientes partes:

- Inicialización, consiste en introducir los inputs, el cálculo del volumen de la caja y la lectura del fichero de posiciones de las partículas.
- El código principal, donde se pasa a leer las subrutinas:
  - **Vecinos**, se calcula la lista de vecinos de cada partícula y se va actualizando según el intervalo de tiempo, calculando previamente la distancia entre cada par de partículas, con el objeto de reducir el tiempo de cálculo.
  - **Inform**, calcula la energía potencial y la energía cinética, así como, el desplazamiento de la quinta partícula más alta en la dirección Z.
  - **Thermostat**, consiste en equilibrar el modelo mediante la temperatura. Esta debe ser constante, y como consecuencia los valores de la energía cinética no serán elevados originando valores de energía potenciales normales. Esto hace que el sistema este en equilibrio.
  - **Motion**, se obtiene la posición y velocidad de las partículas considerando las ecuaciones del movimiento rectilíneo uniformemente acelerado, M.R.U.A, considerando también las restricciones de la base.
  - **Forces**, calcula las fuerzas, para cada una de las partículas.
  - **Save\_pos**, crea un fichero: “**position.dat**” con las posiciones de todas las partículas.



Los inputs que se introducen en el código para poder aplicar la metodología de MD, son:

- $dtp = 2.5d-3$  → Es el paso del tiempo.
- $nmax0 = 1000$  → Es el número de partículas.
- $dphi = 0.4d0$  → Es la fracción volumétrica. El 40% de fase dispersa de partículas, el resto es el medio dispersante, aire, agua,....
- $dq = 0.1d0$  → Alcance de la atracción.
- $ivez = 0$  → Parámetro que se utiliza para inicializar.
- $delta = 0.1d0$  → Anchura del tamaño de la distribución.
- $t = 0d0$  → Tiempo inicial.
- $tfin = 3000$  → Tiempo final
- $phi\_s = 0.80$  → Fija la intensidad de la atracción.
- $F\_ext = -0.15$  → Fuerza exterior que se aplica a las partículas.

Según los modelos utilizados, bien sean con valor de carga instantáneo o continuo, se deben de considerar ficheros de entrada diferentes para el cálculo del modelo, a pesar que la metodología sea la misma. Por ello, se han generado dos códigos diferentes que vienen recogidos en los Anexos del apartado 7.

- Para el caso de carga instantánea, como ya se ha comentado anteriormente, se aplican las fuerzas volumétricas sobre el modelo, sin considerar el anterior resultado.

*Ejemplo de un fichero para una configuración: pos-080-27.dat*

**El código generado se denomina: *pi\_final.f***

- Para el caso de carga continua, se basa en la posición de las partículas del anterior estado de carga resuelto, y sobre ellas se aplica la nueva fuerza volumétrica, así sucesivamente.

*Fichero de entrada: pos-input.dat*

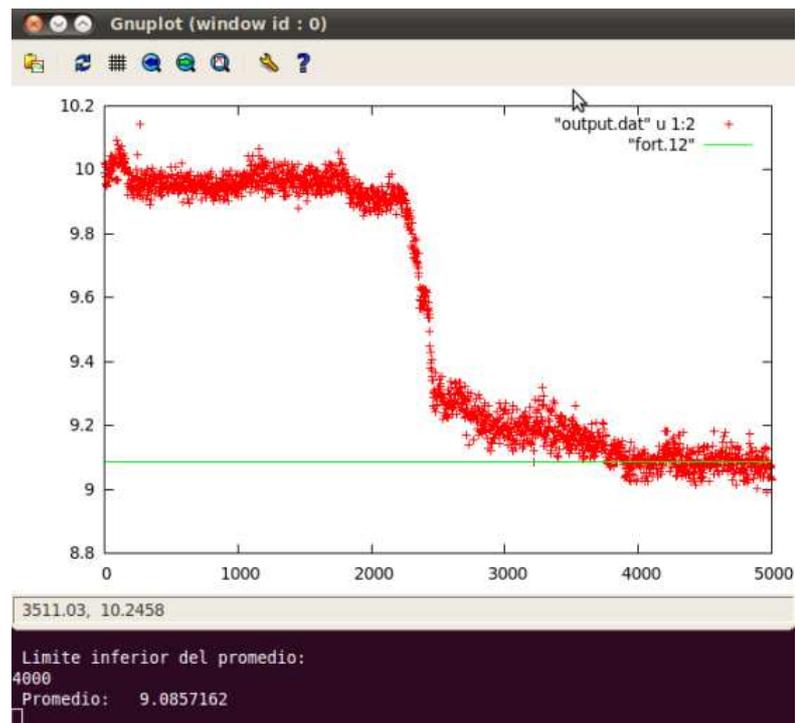
**El código utilizado para este modelo es: *pi\_final\_pos\_input.f***



Para caracterizar la posición de las interfases nos fijaremos en la quinta partícula más alta. Generaremos un código denominado “**analysis**”, el cual volcara una gráfica con la posición de dicha partícula, en función del tiempo, lo que nos permitirá identificar si el sistema ha dejado de comprimirse.

Por ejemplo:

Estudiaremos la configuración p-080-26, aplicando una fuerza volumétrica a compresión de -0.07. A continuación se presenta la gráfica con el desplazamiento de la interfase y cómo se alcanza el valor estacionario a partir del tiempo 4000, que se puede observar mediante la línea verde.



El valor promedio: 9.0857, corresponde a la fuerza volumétrica de valor - 0.07. Éste proceso habría que repetirlo para cada una de las fuerzas y generar una gráfica para esa configuración.

Realizando el mismo proceso para cada una de las configuraciones, se obtienen diez gráficas lo que permite realizar el promedio y disminuir el ruido estadístico.



## 4. RESULTADOS Y CONCLUSIONES.

### 4. 1. SIMULACIONES DE DINÁMICA MOLECULAR.

Las simulaciones de Dinámica Molecular estudian el comportamiento mecánico del sistema, integrando la ecuación del movimiento de cada partícula para ser comparado con las simulaciones de MEF.

Se trabaja con un sistema de 1000 partículas, con condiciones de contorno periódicas en las paredes laterales, con una fracción de volumen fija (del 40%), y con la interacción atractiva de Asakura-Oosawa explicada anteriormente. El parámetro  $\phi_s$ ,  $\phi_p$ , que aparece en la interacción se ha fijado a 0.80, lo que induce una atracción con un mínimo muy intenso de  $16 k_B T$ , donde  $k_B T$  es la energía térmica.

Aplicaremos un abanico de fuerzas volumétricas que van desde el valor 0 a -0.25 sobre cada partícula, con un incremento constante de -0.01 y estudiaremos la evolución de la interfase, que caracterizamos por la coordenada Z de la quinta partícula más alta.

La fuerza a considerar será bien aplicándola en la modalidad de fuerza instantánea o continua.

A continuación se presentan los resultados tanto en valor numérico como gráficos, de las diez configuraciones estudiadas.



MODELO APLICANDO CARGA CONTINUA.

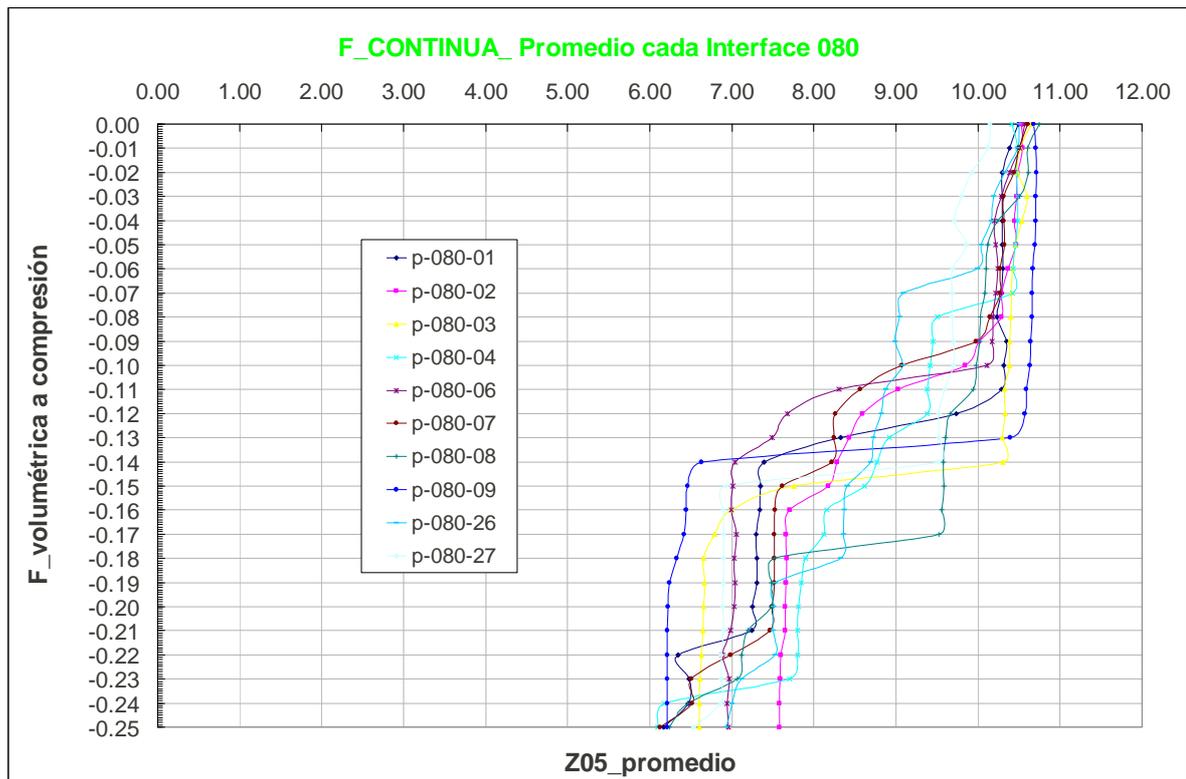
En la siguiente tabla se expresan diez configuraciones estudiadas, donde la primera columna expresa la fuerza volumétrica aplicada a compresión y las sucesivas columnas son los desplazamientos en la dirección Z de la quinta partícula más alta. Las filas **Tpromedio**, indican que a partir de ese tiempo empieza a estabilizarse el desplazamiento de la interfase. La columna **p-080-promd**, expresa para cada valor de fuerzas el desplazamiento promedio de todas las configuraciones, y si sobre éstos datos se resta la posición inicial, se obtiene la última columna, la cual llamamos el desplazamiento promedio, para ese valor de fuerza volumétrica.

DIAGRA. FUERZA CONTINUA - DESPLAZA. PROMEDIO 5 PARTICULA

F	pos-080-Z05promedio. f. CONTINUA										p-080-promd	p-080-promd-F0
	p-080-01	p-080-02	p-080-03	p-080-04	p-080-06	p-080-07	p-080-08	p-080-09	p-080-26	p-080-27		
0	T.promedio = 0	3500	3100	4600	4500	0	0	2000	2000	4000	10.5332	0.0000
	F.promedio = 10.487507	10.530022	10.6482	10.4108	10.5694	10.6072	10.7526	10.6781	10.4990	10.1491		
	T.promedio = 300	4000	2000	3500	4000	2000	4000	1000	2000	3000	10.48	-0.05
-0.01	F.promedio = 10.382342	10.543096	10.5175	10.4810	10.5078	10.5014	10.6072	10.7028	10.4796	10.1204		
	T.promedio = 2000	3000	1000	3000	3000	2000	2000	1000	4000	4000	10.4124	-0.1208
	F.promedio = 10.297880	10.485928	10.4861	10.4640	10.3815	10.4335	10.6196	10.7092	10.3191	9.9271		
-0.03	T.promedio = 0	3000	2500	3000	2000	4000	4000	2000	2000	3000	10.3660	-0.1672
	F.promedio = 10.293081	10.476724	10.6018	10.4780	10.2898	10.3170	10.5112	10.7038	10.1892	9.7990		
-0.04	T.promedio = 0	3000	2000	4600	3000	0	0	4000	1000	4000	10.3079	-0.2253
	F.promedio = 10.294368	10.442465	10.5325	10.4841	10.1978	10.3127	10.2392	10.6998	10.1667	9.7097		
-0.05	T.promedio = 3000	3000	3800	4600	3000	3000	4500	1000	4000	4000	10.2927	-0.2405
	F.promedio = 10.293034	10.465185	10.4592	10.4560	10.2118	10.3255	10.1221	10.6918	10.0426	9.8603		
-0.06	T.promedio = 4000	3000	3000	4000	4000	3000	1000	1000	2000	3000	10.2507	-0.2825
	F.promedio = 10.308916	10.370867	10.4184	10.4285	10.2440	10.2709	10.1012	10.6730	9.9954	9.6953		
-0.07	T.promedio = 3000	4100	0	3000	4000	2000	1000	1000	4000	1000	10.1395	-0.3937
	F.promedio = 10.282726	10.283389	10.4099	10.4177	10.2167	10.2713	10.0816	10.6632	9.0857	9.6829		
-0.08	T.promedio = 3000	3100	0	4700	4000	3000	1000	1000	1000	1000	10.0154	-0.5178
	F.promedio = 10.234482	10.283340	10.4008	9.5023	10.1770	10.1418	10.0337	10.6570	9.0442	9.6793		
-0.09	T.promedio = 3000	4500	0	4600	4200	2500	1000	1000	3500	4000	9.9707	-0.5625
	F.promedio = 10.351919	10.013762	10.3810	9.4488	10.1728	9.9751	10.0235	10.6445	8.9936	9.7020		
-0.1	T.promedio = 3000	4800	2000	4000	3000	4500	2000	4000	3000	1000	9.8529	-0.6803
	F.promedio = 10.313699	9.846666	10.3876	9.4141	10.1096	9.0726	9.9736	10.6297	9.0841	9.6976		
-0.11	T.promedio = 3500	4600	3000	4100	4600	4000	4000	4200	4000	4000	9.4889	-1.0443
	F.promedio = 10.289522	9.022314	10.3238	9.3787	8.3116	8.5660	9.9397	10.5855	8.8742	9.5971		
-0.12	T.promedio = 4900	4200	4000	2000	4000	4000	4000	2000	4000	3000	9.2566	-1.2766
	F.promedio = 9.738712	8.589436	10.3318	9.3793	7.6784	8.2665	9.6667	10.5731	8.8217	9.5205		
-0.13	T.promedio = 3000	4000	3000	4000	2500	3000	2000	4700	4000	3000	8.9945	-1.5387
	F.promedio = 8.326916	8.428370	10.2993	8.9163	7.4900	8.2430	9.6000	10.3946	8.7242	9.5226		
-0.14	T.promedio = 4000	4500	2000	2000	3000	2000	1000	4000	3000	3000	8.4420	-2.0912
	F.promedio = 7.394177	8.284662	10.3021	8.7666	7.0404	8.2200	9.5769	6.6339	8.6861	9.5148		
-0.15	T.promedio = 4000	3500	4300	4000	4300	4150	4850	3500	3000	3000	7.7903	-2.7429
	F.promedio = 7.347528	8.172223	7.7531	8.6143	7.0118	7.6190	9.5892	6.4641	8.4073	6.9241		
-0.16	T.promedio = 4100	3000	4700	4700	3500	4000	3500	2000	4000	3000	7.5984	-2.9348
	F.promedio = 7.343285	7.706511	6.9913	8.1597	6.9922	7.5275	9.5577	6.4422	8.3698	6.8936		
-0.17	T.promedio = 4000	0	3500	4000	2500	0	4600	3500	1000	0	7.5631	-2.9701
	F.promedio = 7.296038	7.662463	6.7863	8.1185	7.0544	7.5219	9.5250	6.4129	8.3594	6.8945		
-0.18	T.promedio = 3100	0	2000	3000	2000	1000	3500	3500	3000	0	7.3155	-3.2177
	F.promedio = 7.303153	7.667702	6.6605	7.9010	7.0331	7.5189	7.5190	6.3258	8.3289	6.8970		
-0.19	T.promedio = 4600	3000	2000	3500	2000	0	2000	4500	4000	3000	7.2171	-3.3161
	F.promedio = 7.305032	7.659983	6.6647	7.8452	7.0371	7.5162	7.4837	6.2375	7.5274	6.8946		
-0.2	T.promedio = 3000	1000	0	2000	1000	0	3000	3000	3000	4000	7.1993	-3.3339
	F.promedio = 7.247140	7.648150	6.6604	7.8077	7.0339	7.4938	7.4832	6.2186	7.5107	6.8894		
-0.21	T.promedio = 4000	4000	0	1000	4200	0	4500	2000	2000	0	7.1604	-3.3728
	F.promedio = 7.240612	7.653990	6.6469	7.8048	6.9833	7.4676	7.1996	6.2162	7.4979	6.8927		
-0.22	T.promedio = 4600	3000	0	2000	4600	4800	4000	2000	3000	4000	6.9967	-3.5365
	F.promedio = 6.349604	7.597073	6.6267	7.7991	6.8841	6.9844	7.1163	6.2104	7.5255	6.8740		
-0.23	T.promedio = 4000	0	0	4000	4200	3000	3000	3500	4400	4000	6.9134	-3.6198
	F.promedio = 6.481443	7.592488	6.6116	7.7053	6.9682	6.5090	7.0671	6.2093	7.1212	6.8683		
-0.24	T.promedio = 2000	0	0	4000	200	0	4700	1000	3000	4100	6.6823	-3.8509
	F.promedio = 6.470063	7.578090	6.6078	6.9432	6.1801	6.5115	6.4590	6.2089	7.0040	6.8604		
-0.25	T.promedio = 4600	3000	0	3500	3500	3000	2000	4000	3000	4500	6.5439	-3.9893
	F.promedio = 6.165505	7.579567	6.6043	6.0954	6.9594	6.1252	6.2359	6.2138	6.9311	6.5287		

## MODELO APLICANDO CARGA CONTINUA

A continuación se representan la posición de la quinta partícula más alta, para las diez configuraciones estudiadas mediante MD.



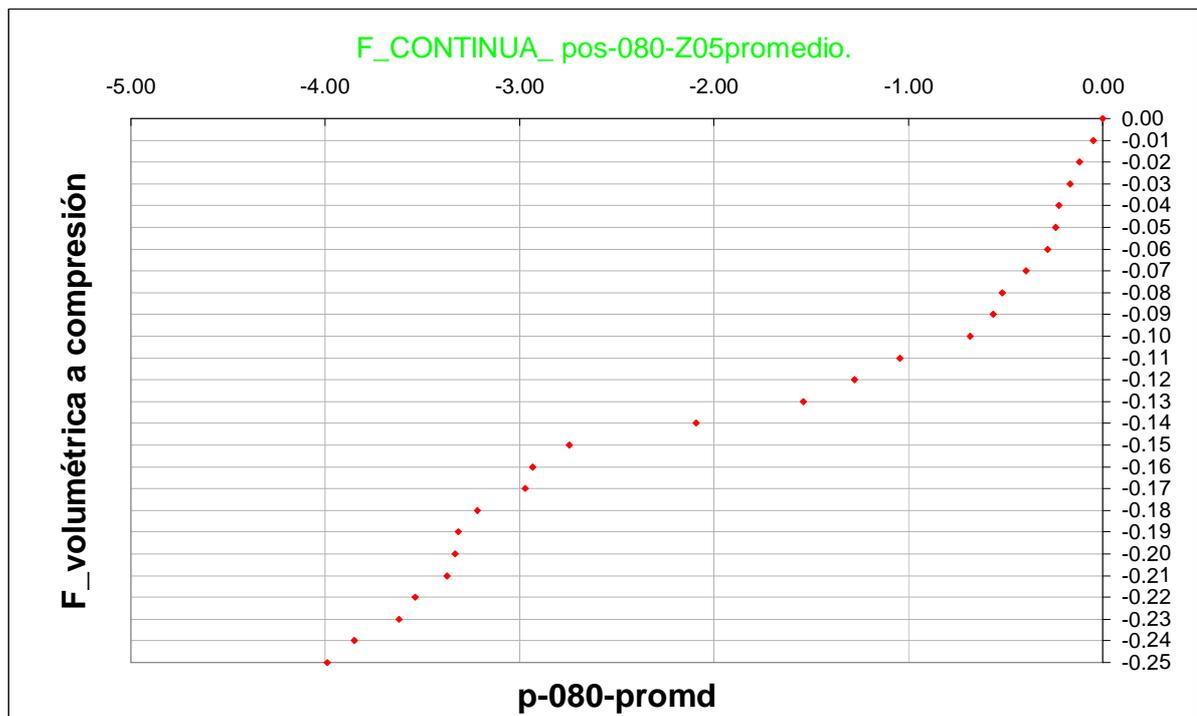
Se observa que muchas de ellas tienen una gran similitud, y se encuentran en el mismo intervalo. Aparece una zona con un salto abrupto de la interfase, lo que podemos interpretar como un comportamiento catastrófico, característico del régimen plástico, similar a la fluencia en los ensayos de tracción, es decir para el incremento ínfimo de la fuerza volumétrica, se produce un desplazamiento grande. Generalmente tras este comportamiento, vuelve a tener un comportamiento lineal.



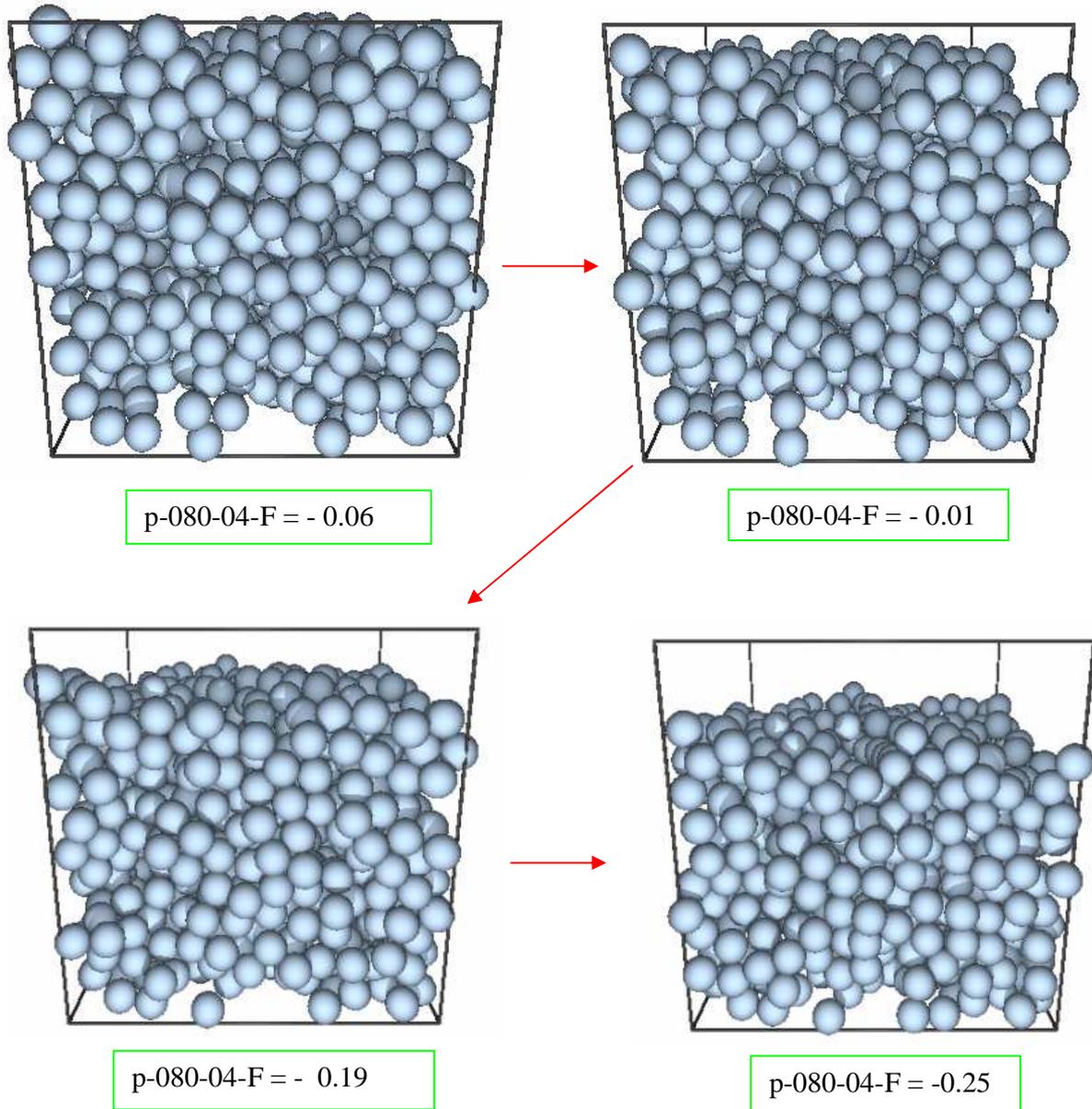
MODELO APLICANDO CARGA CONTINUA.

En esta gráfica se representa el valor promedio del desplazamiento de la interfase de todas las configuraciones para las distintas fuerzas volumétricas a compresión, con el objeto de unificar los resultados.

Podemos observar que contiene tres partes claramente diferenciadas, siendo la primera una zona lineal, hasta que se produce un salto abrupto, debido a la plasticidad del material y termina con un comportamiento lineal.



Algunos sistemas de partículas se muestran a continuación:



Se aprecia como se van estructurando las partículas, por el efecto de la fuerza volumétrica de compresión.



MODELO APLICANDO CARGA INSTANTÁNEAS.

En esta tabla se presentan los valores de desplazamientos obtenidos del modelo inicial, sobre el cual se han aplicado distintos valores de fuerzas volumétricas, es decir la carga se realiza de forma instantánea.

Recordemos que para la modalidad de carga continua, la fuerza volumétrica se aplica en la posición de las partículas del anterior caso resuelto, lo que significa que para cada valor de fuerza tenemos un nuevo modelo de partículas.

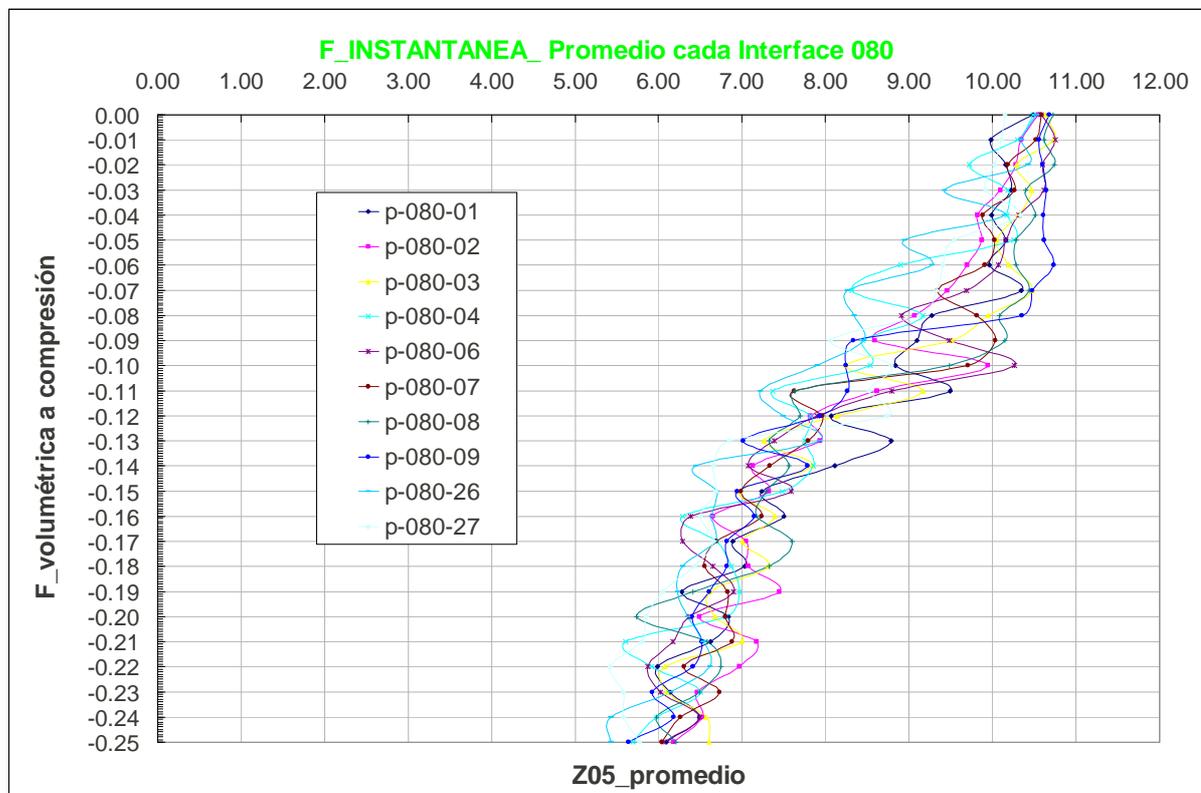
DIAGRA FUERZA - DESPLAZA. PROMEDIO 5 PARTICULA

F	pos-080-205promedio INSTANTANEO										p-080-promd	p-080-promd-F0
	p-080-01	p-080-02	p-080-03	p-080-04	p-080-06	p-080-07	p-080-08	p-080-09	p-080-26	p-080-27		
0	T.promedio = 0 F.promedio = 10.484589	0 10.543963	0 10.6325	0 10.4843	0 10.5795	0 10.5839	0 10.7280	0 10.6810	0 10.5286	0 10.1502	10.5397	0.0000
-0.01	T.promedio = 5000 F.promedio = 9.980178	5000 10.342389	5000 10.7332	5000 10.2993	5000 10.7543	5000 10.5166	5000 10.6192	5000 10.5574	5000 10.3425	5000 10.1037	10.42	-0.11
-0.02	T.promedio = 7000 F.promedio = 10.155588	7000 10.282616	7000 10.2875	7000 9.7262	7000 10.6042	7000 10.1876	7000 10.7466	7000 10.6010	7000 10.4266	7000 10.0274	10.3045	-0.2351
-0.03	T.promedio = 8000 F.promedio = 10.216095	8000 10.099307	8000 10.4716	8000 10.1848	8000 10.6162	8000 10.2619	8000 10.3959	8000 10.6438	8000 9.4198	8000 9.9229	10.2232	-0.3164
-0.04	T.promedio = 9000 F.promedio = 9.989058	9000 9.819202	9000 10.3127	9000 10.1756	9000 10.3176	9000 9.8792	9000 10.5083	9000 10.6099	9000 10.1426	9000 10.3328	10.2087	-0.3310
-0.05	T.promedio = 10000 F.promedio = 10.154087	10000 9.872230	10000 10.0544	10000 10.2529	10000 10.1590	10000 10.0243	10000 10.2791	10000 10.6163	10000 8.9463	10000 9.5343	9.9893	-0.5504
-0.06	T.promedio = 11000 F.promedio = 9.962379	11000 9.700872	11000 10.1941	11000 8.9017	11000 10.0678	11000 9.9130	11000 10.2807	11000 10.7300	11000 9.2728	11000 9.4054	9.8429	-0.6968
-0.07	T.promedio = 12000 F.promedio = 10.345366	12000 9.455448	12000 10.4728	12000 8.3154	12000 9.6923	12000 9.3406	12000 10.4402	12000 10.4811	12000 8.2653	12000 9.3299	9.6138	-0.9258
-0.08	T.promedio = 13000 F.promedio = 9.268933	13000 9.072427	13000 9.9460	13000 9.1670	13000 8.9051	13000 9.8113	13000 10.0915	13000 10.3500	13000 8.3464	13000 9.1203	9.4079	-1.1318
-0.09	T.promedio = 14000 F.promedio = 9.094099	14000 8.588846	14000 9.5081	14000 8.4507	14000 9.4879	14000 10.0383	14000 10.1460	14000 8.3359	14000 8.4542	14000 8.0620	9.0166	-1.5231
-0.1	T.promedio = 15000 F.promedio = 8.840243	15000 9.948611	15000 8.2409	15000 8.5387	15000 10.2670	15000 9.7087	15000 9.4821	15000 8.2418	15000 7.8974	15000 8.7880	8.9954	-1.5443
-0.11	T.promedio = 16000 F.promedio = 9.492056	16000 8.614770	16000 9.1685	16000 7.3688	16000 8.7960	16000 7.6279	16000 7.6382	16000 8.2617	16000 7.2196	16000 8.5211	8.2709	-2.2688
-0.12	T.promedio = 17000 F.promedio = 8.064012	17000 7.824021	17000 8.1364	17000 7.8213	17000 7.9034	17000 7.9578	17000 7.6998	17000 7.9345	17000 7.4917	17000 8.7417	7.9575	-2.5822
-0.13	T.promedio = 18000 F.promedio = 8.785379	18000 7.933544	18000 7.2662	18000 7.7476	18000 7.3844	18000 7.7935	18000 7.3277	18000 7.0116	18000 7.9231	18000 6.8454	7.6019	-2.9378
-0.14	T.promedio = 19000 F.promedio = 8.112645	19000 7.133541	19000 7.8379	19000 7.8536	19000 7.0758	19000 7.3344	19000 7.5601	19000 7.7847	19000 6.4474	19000 6.6578	7.3798	-3.1599
-0.15	T.promedio = 20000 F.promedio = 7.239731	20000 7.321438	20000 6.9670	20000 7.4805	20000 7.5933	20000 6.9854	20000 7.2908	20000 6.9465	20000 6.6969	20000 6.6854	7.1207	-3.4190
-0.16	T.promedio = 21000 F.promedio = 7.501482	21000 6.647440	21000 7.3982	21000 6.2857	21000 6.3808	21000 7.2322	21000 7.1696	21000 7.1449	21000 6.6321	21000 6.4993	6.8892	-3.6505
-0.17	T.promedio = 22000 F.promedio = 6.887896	22000 7.053674	22000 7.0089	22000 6.6934	22000 6.2895	22000 6.6966	22000 7.5978	22000 6.8196	22000 6.6798	22000 6.6566	6.8384	-3.7013
-0.18	T.promedio = 23000 F.promedio = 7.036113	23000 7.079801	23000 7.3123	23000 6.8697	23000 6.6514	23000 6.5499	23000 7.3197	23000 6.8182	23000 6.2905	23000 6.4318	6.8359	-3.7037
-0.19	T.promedio = 24000 F.promedio = 6.276309	24000 7.444027	24000 6.6131	24000 6.9705	24000 6.8955	24000 6.8317	24000 6.4086	24000 6.6075	24000 6.2235	24000 6.0511	6.6322	-3.9075
-0.2	T.promedio = 25000 F.promedio = 6.834103	25000 6.492430	25000 6.6796	25000 6.8082	25000 6.3713	25000 6.8047	25000 5.7389	25000 6.4055	25000 6.3469	25000 5.8569	6.4339	-4.1058
-0.21	T.promedio = 26000 F.promedio = 6.627657	26000 7.174419	26000 6.9932	26000 5.6087	26000 6.1765	26000 6.8833	26000 6.5838	26000 6.5141	26000 6.5363	26000 5.7971	6.4895	-4.0501
-0.22	T.promedio = 27000 F.promedio = 5.983429	27000 6.967813	27000 6.0721	27000 5.9143	27000 5.8705	27000 6.3023	27000 6.7500	27000 6.4162	27000 6.6197	27000 5.4226	6.2319	-4.3078
-0.23	T.promedio = 28000 F.promedio = 6.136624	28000 6.460671	28000 6.1047	28000 6.4978	28000 6.0252	28000 6.7298	28000 6.4920	28000 5.9230	28000 6.1371	28000 5.5827	6.2090	-4.3307
-0.24	T.promedio = 29000 F.promedio = 6.491464	29000 6.523134	29000 6.5691	29000 5.9741	29000 6.4953	29000 6.2626	29000 5.9737	29000 6.1808	29000 5.4261	29000 5.5834	6.1480	-4.3917
-0.25	T.promedio = 30000 F.promedio = 6.094111	30000 6.183282	30000 6.6108	30000 5.6901	30000 6.0620	30000 6.0406	30000 6.2056	30000 5.6402	30000 5.4332	30000 5.7734	5.9733	-4.5663



MODELO APLICANDO CARGA INSTANTÁNEAS.

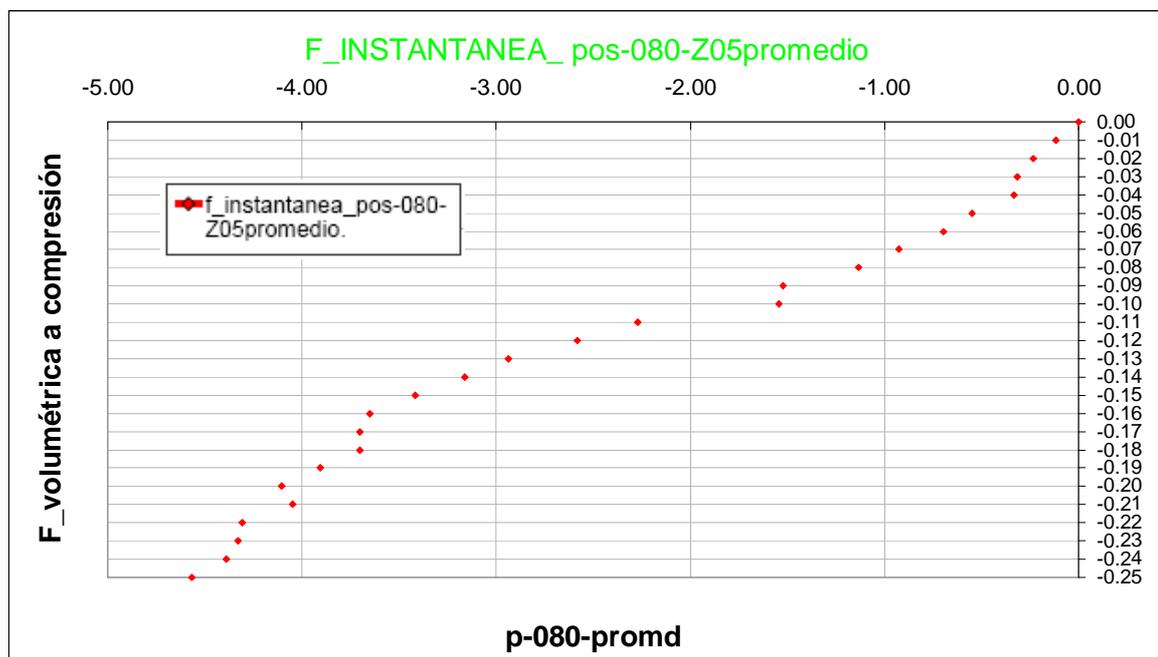
En la siguiente gráfica se representan la posición de la quinta partícula más alta, para las diez configuraciones estudiadas. Al igual que en el caso anterior, las partículas posee un tramo con un comportamiento abrupto, sin ser tan pronunciado.





## MODELO APLICANDO CARGA INSTANTÁNEAS.

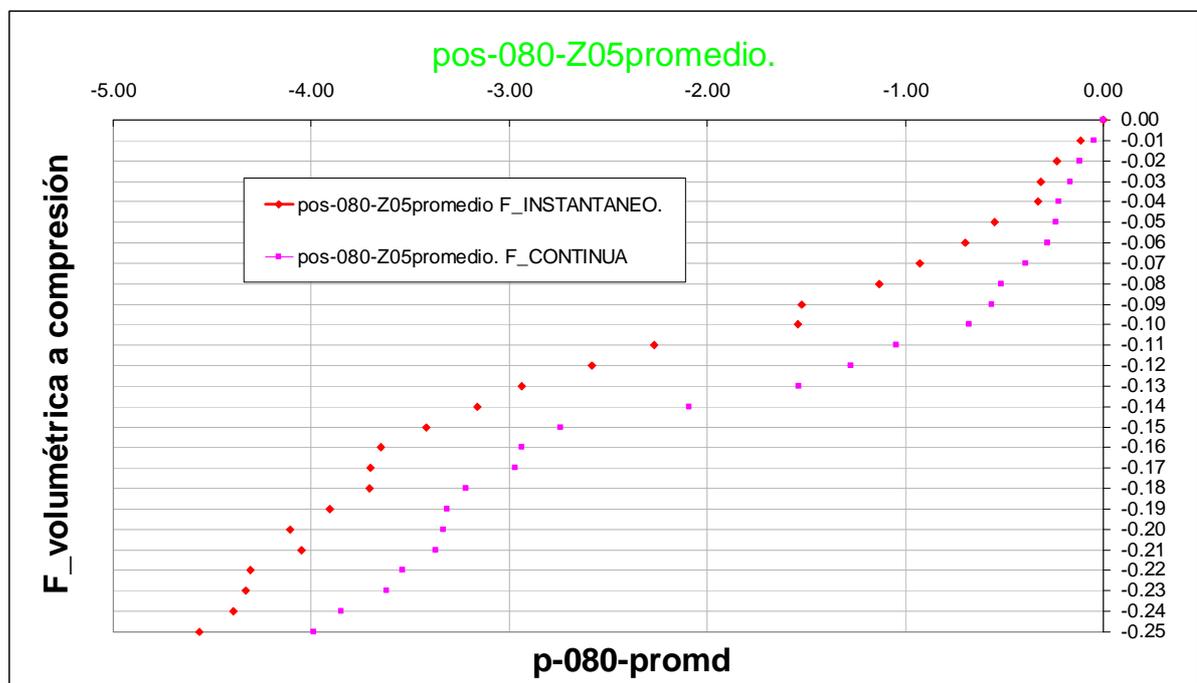
La gráfica siguiente muestra la fuerza volumétrica a compresión y el desplazamiento promedio de la quinta partícula en la dirección Z de todas las configuraciones, siendo las columnas F y **p-080-promd-F0**, respectivamente.



Se distinguen tres zonas; la primera parte tiene un comportamiento lineal, mientras que la siguiente se caracteriza por que tiene comportamiento plástico, con un salto en la deformación, aunque de menor magnitud que en el caso de fuerza continua, y finaliza con un comportamiento lineal.



Posicionando ambas curvas en la misma gráfica, vemos que guardan mucha similitud en los comportamientos de sus zonas. Hay que distinguir que para el mismo valor de fuerza volumétrica, el desplazamiento de la quinta partícula es mayor en la modalidad de fuerza instantánea. El origen de esta diferencia no está claro, pero se aleja del motivo principal del Proyecto, por lo que decidimos no profundizar en ello.



A la hora de comparar con la metodología de Elementos Finitos, se debe de considerar la modalidad de carga aplicada correspondiente.



## 4. 2. SIMULACIONES DE ELEMENTOS FINITOS.

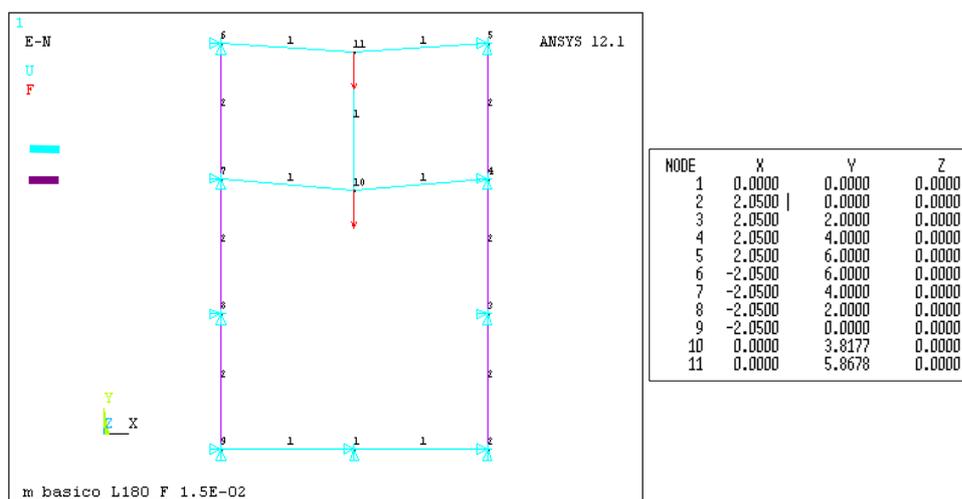
### 4. 2. 1. SIMULACIÓN MEDIANTE EL MODELO DE 11 NODOS EN 2D.

Vamos a comenzar el estudio del sistema mediante el MEF, con un caso mucho más sencillo. El modelo esta formado tan solo de 11 nodos, de los cuales 9 están empotrados todos los g.d.l y en los nodos 10 y 11 se aplica una fuerza vertical, provocando una deformación. La nueva posición se considera a la hora de resolver el siguiente estado de carga remallando al principio de cada carga, generando así un nuevo modelo.

Recordemos, además, que usamos el elemento Link180, que es un elemento que se caracteriza por tener comportamientos a tracción y a compresión y no opone impedimentos a la flexión. El objetivo de este modelo es que sea capaz de medir la distancia entre las partículas y volver a mallar, para cada una de las fuerzas volumétricas, dependiendo del valor de la distancia entre las partículas. La condición que se establece cada vez que se malla, es la comentada anteriormente:

- Si la longitud es mayor que 2.2 → no se crea ningún elemento.
- Si la longitud es mayor que 2 y menor 2.2 → se crea el mat, 1.  $E=1 \cdot 10^4$  Elástico lineal.
- Si la longitud es menor o igual a 2 → se crea el mat, 2.  $E=1 \cdot 10^{12}$  Incompresible.

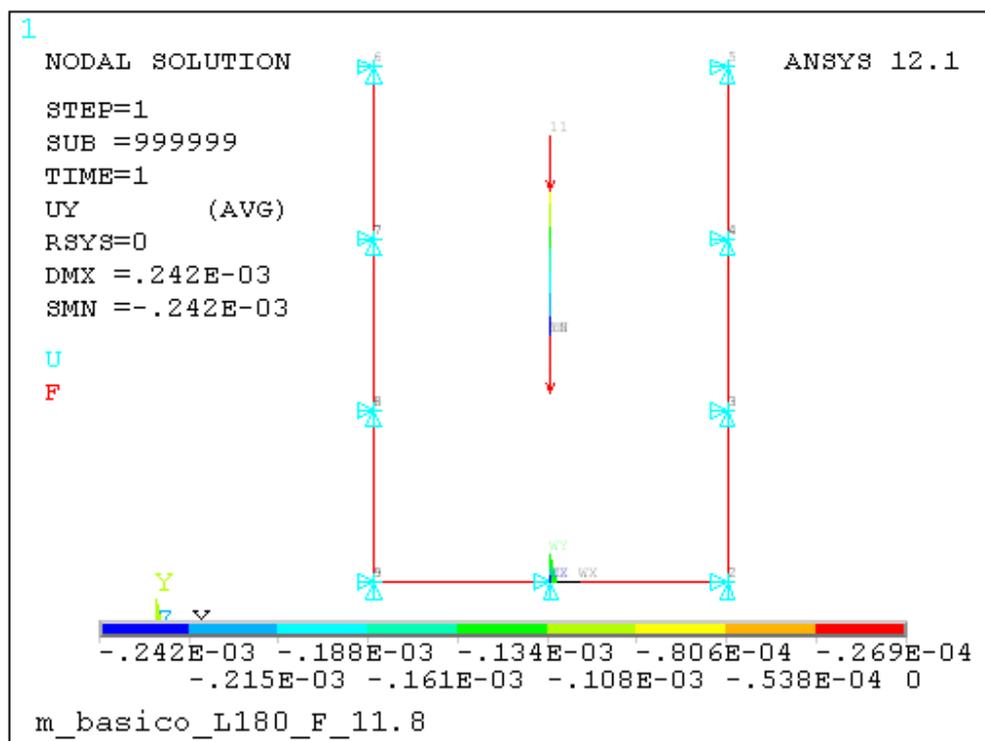
El modelo a utilizar por tanto, es el siguiente, donde se muestran sus coordenadas y los materiales que se usan, dependiendo de la longitud del elemento.





El remallado en cada paso de fuerza es fundamental, creándose nuevos elementos o eliminándose otros (ruptura de los enlaces). Con los resultados de los desplazamientos del nodo 11 se crea una gráfica, en función de la fuerza aplicada.

Dada la simplicidad del modelo, puede darse la situación que se presenta en la siguiente figura:

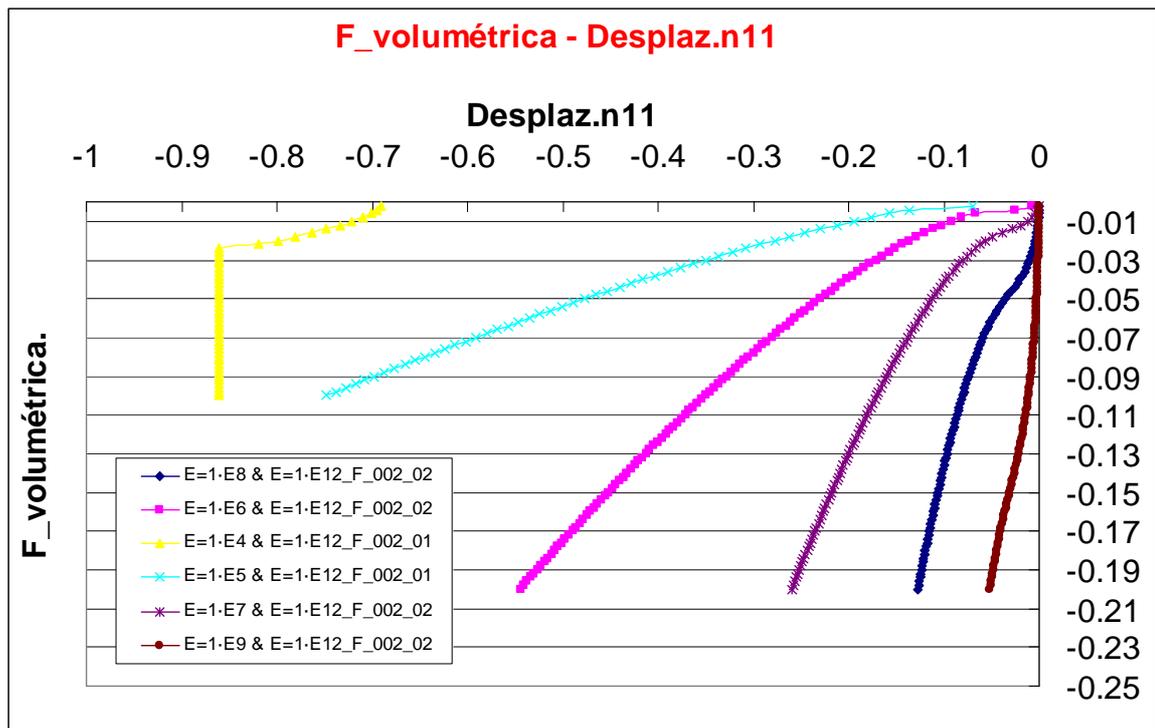


Cuando sucede este caso, el modelo no llega a converger puesto que el elemento central está suelto, el sistema tiene un movimiento de sólido rígido.

Este método se aplicará con distintos módulos de Young  $E$ , pero fijando el bucle de fuerza, puesto que se ha verificado que según sea éste, los resultados son distintos, como corresponde a un material con comportamiento plástico.



Estudiando distintos casos con diferentes  $E$  para el material 1, la gráfica que obtenemos es:



Cada una de las gráficas termina en fuerzas distintas, debido a que en ese instante el elemento queda libre y el MEF deja de converger, pero poseemos datos suficientes para llegar a dictaminar alguna conclusión.

Como conclusión de los análisis realizados, se observa que las curvas con módulo de Young,  $E$ ,  $9 \cdot 10^{12}$ ,  $8 \cdot 10^{12}$  y  $7 \cdot 10^{12}$ , poseen tres tramos claramente diferenciados. El primero es lineal y seguido hay un cambio brusco debido al comportamiento plástico que posee el material y termina con un tramo lineal.

Debemos notar que el comportamiento cualitativo del modelo es similar al que se obtuvo para los geles mediante MD. Esto se debe a la combinación de materiales



considerada, a pesar de que el comportamiento del elemento dista mucho de los enlaces entre partículas. Decidimos por tanto, seguir probando con este elemento para modelos más complejos.

#### 4. 2. 2. SIMULACIÓN MEDIANTE EL MODELO DE 1000 NODOS EN 3D.

Pasamos ahora al estudio del sistema con 1000 nodos, tomando directamente las configuraciones de las simulaciones de MD. Nos centraremos en tres configuraciones siendo éstas los extremos y una intermedia de los intervalos de desplazamiento de las simulaciones obtenidas por medio de MD, en la modalidad de fuerza continua. Las configuraciones son:

- p-080-01 - p-080-04 - p-080-09

Para cada una de las configuraciones se genera su propia macro, es decir, un código para que se ejecute en la herramienta ANSYS, siendo:

**m1000\_p\_080\_01\_Link180.mac, m1000\_p\_080\_04\_Link180.mac y m1000\_p\_080\_09\_Link180.mac**

En el Anexo 7.2, se puede visualizar la macro: **m1000\_p\_080\_01\_Link180.mac**.

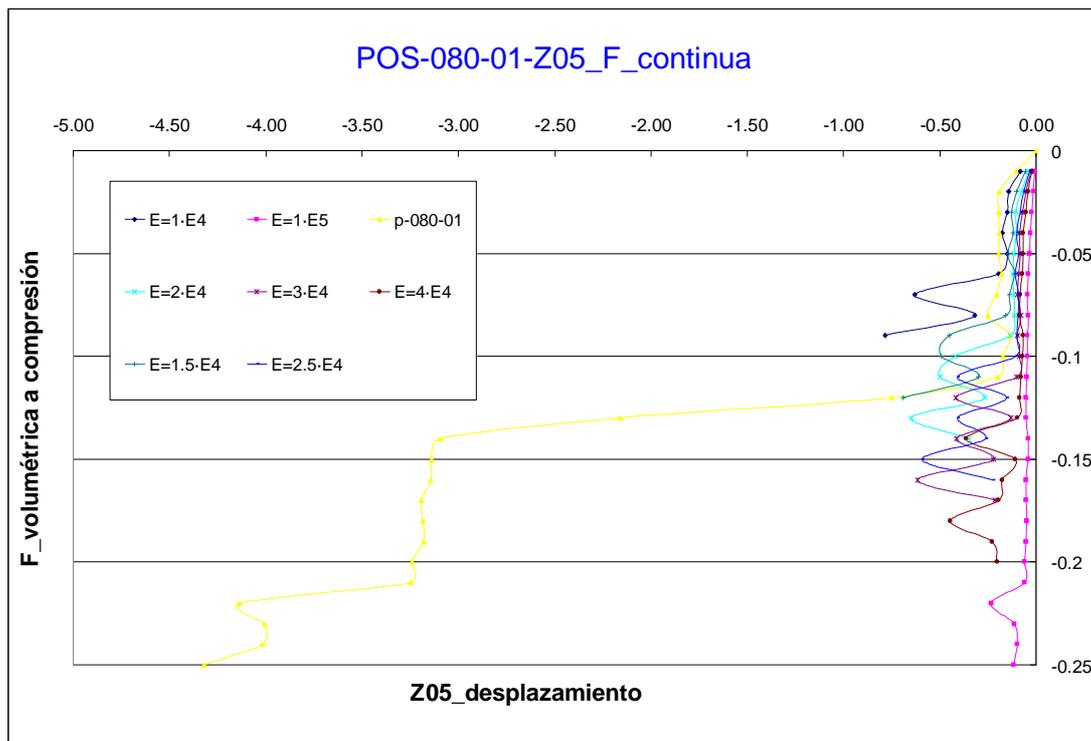
Se estudian distintos valores del módulo de Young y fuerzas volumétricas, en el mismo intervalo de fuerzas. El objetivo es utilizar el resultado del desplazamiento de la partícula de mayor desplazamiento y generar una gráfica similar a la obtenida a través de la Dinámica Molecular, para cada una de las configuraciones. Hay que hacer constar que no es exactamente el mismo criterio que el usado en las simulaciones de MD, debido a que en este modelo el MEF necesitamos empotrar los nodos laterales, por lo que las partículas más altas están en este empotramiento. Se aplica el remallado, para la modalidad de fuerza continua.



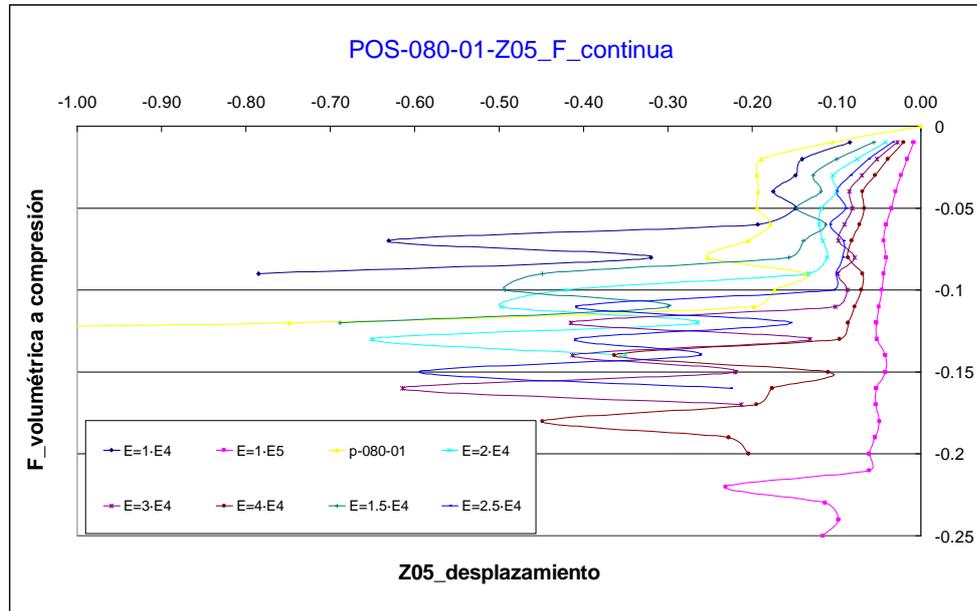
- **Configuración: p-080-01.**

En las siguientes gráficas se representan las curvas; en color amarillo la de MD y el resto son las obtenidas mediante el MEF con valores distintos de módulo elástico, E.

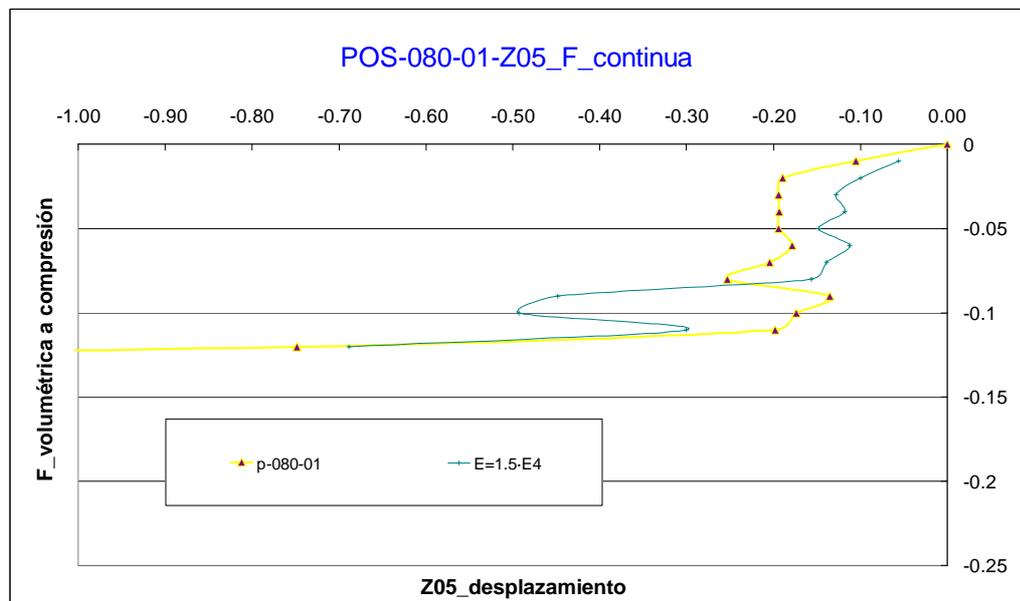
Como en el caso del modelo de 11 nodos, cuando alguna parte del sistema rompe sus enlaces con la parte empotrada, caerá libremente y Ansys nos dará un error, parándose el cálculo. Por esa razón, las curvas con distintos valores de E llegan hasta distintas fuerzas.



Realizando un zoom, se observa que las deformaciones son muy pequeñas respecto a la curva MD.



Entre todas las curvas obtenidas, la curva con  $E = 1.5 \cdot 10^4$ , es la más aproximada, la mostramos a continuación.

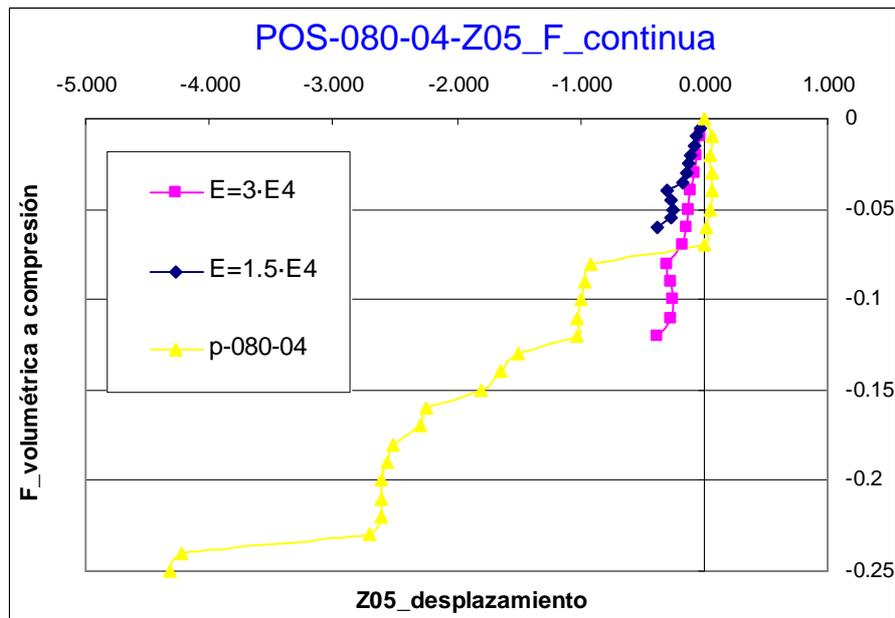




Para el resto de puntos que no aparecen, es debido al comportamiento de sólido rígido que tienen el modelo, y el problema en el MEF aparece a la misma fuerza que las simulaciones de MD detectan el desplazamiento abrupto de la interfase superior.

- **Configuración: p-080-04.**

En las siguientes gráficas se representa la curva de la MD, en color amarillo y el resto de curvas son las obtenidas con valores distintos de módulo elástico, E.

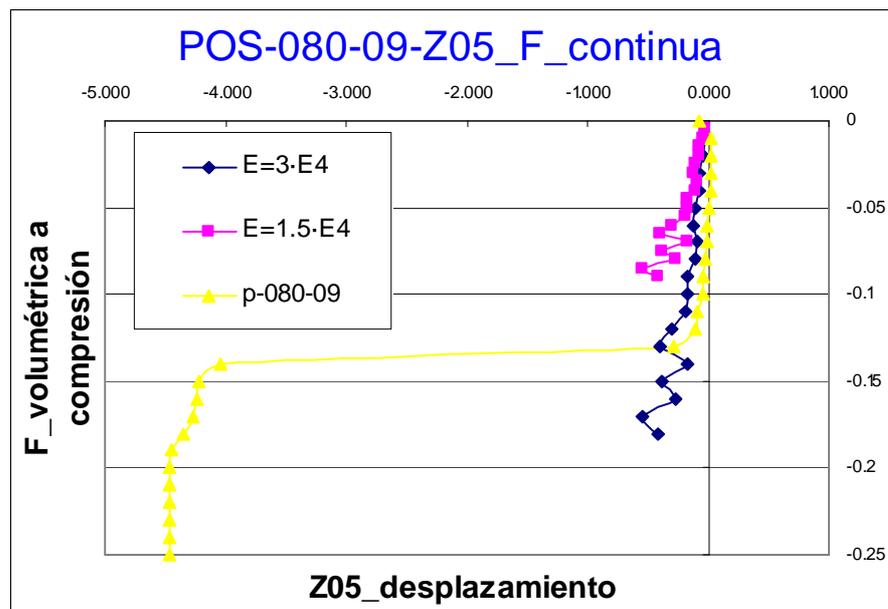


En esta configuración nos hemos basado en dos valores de E y observamos que el tramo inicial es muy parecido. Para el resto de puntos que no aparecen, el modelo tiene comportamiento de sólido rígido.



- **Configuración: p-080-09.**

En las siguientes gráficas se representa la curva de la MD, en color amarillo y el resto de curvas son las obtenidas con valores distintos de módulo elástico, E.



El comportamiento es muy similar a la anterior configuración y para el resto de puntos sin poner, el modelo tiene movimiento de sólido rígido.

A continuación se analizará el grado de importancia que tiene aplicar unos valores u otros en el bucle de carga. Haremos uso para la demostración de la configuración: p-080-01.

- 1º Bucle: Desde una fuerza inicial de -0.005 hasta -0.25, con un incremento constante de valor -0.005.

- 2º Bucle: Desde una fuerza inicial de -0.01 hasta -0.25, con un incremento constante de valor -0.01.

En aquellos casos de carga que coinciden en el bucle deberían obtenerse los mismos valores de desplazamiento, pero según la tabla adjunta, los resultados son diferentes.

**1º BUCLE**

fuerza desplaz_1.5E4_E12_F_005_25		
Nº casos	F_vol.compre.	Desplaz_1.5E4_E12_F_005_25
1	-0.005	-0.028007
2	-0.01	-0.052254
3	-0.015	-0.069755
4	-0.02	-0.085135
5	-0.025	-0.081470
6	-0.03	-0.090515
7	-0.035	-0.097935
8	-0.04	-0.078348
9	-0.045	-0.098378
10	-0.05	-0.086941
11	-0.055	-0.101212
12	-0.06	-0.415273
13	-0.065	-0.131653
14	-0.07	-0.412645
15	-0.075	-0.220396
16	-0.08	-0.667798
17	-0.085	-0.212963

**2º BUCLE**

fuerza desplaz_1.5E4_E12_F_01_25		
Nº casos	F_vol.compre.	Desplaz_1.5E4_E12_F_01_25
1	-0.01	-0.056014
2	-0.02	-0.099924
3	-0.03	-0.127861
4	-0.04	-0.118221
5	-0.05	-0.147429
6	-0.06	-0.112637
7	-0.07	-0.139258
8	-0.08	-0.156742
9	-0.09	-0.448451
10	-0.1	-0.492833
11	-0.11	-0.300078
12	-0.12	-0.688352

Tabla donde se indican los valores de desplazamientos resultantes, para los mismos valores de Fuerza Volumétrica a compresión.

F_vol.compre.	Desplaz_1.5E4_E12_F_005_25	Desplaz_1.5E4_E12_F_01_25
0.01	-0.052254	-0.056014
0.02	-0.085135	-0.099924
0.03	-0.090515	-0.127861
0.04	-0.078348	-0.118221
0.05	-0.086941	-0.147429
0.06	-0.415273	-0.112637
0.07	-0.412645	-0.139258
0.08	-0.667798	-0.156742

La razón para esta dependencia con el ciclo de carga es, naturalmente, que nuestro sistema se encuentra en el régimen plástico. Nótese que aún para fuerzas pequeñas, hay diferencias entre los desplazamientos obtenidos, lo que nos indica que la intrincada estructura del sistema, así como el comportamiento del elemento reproducen este resultado no trivial.



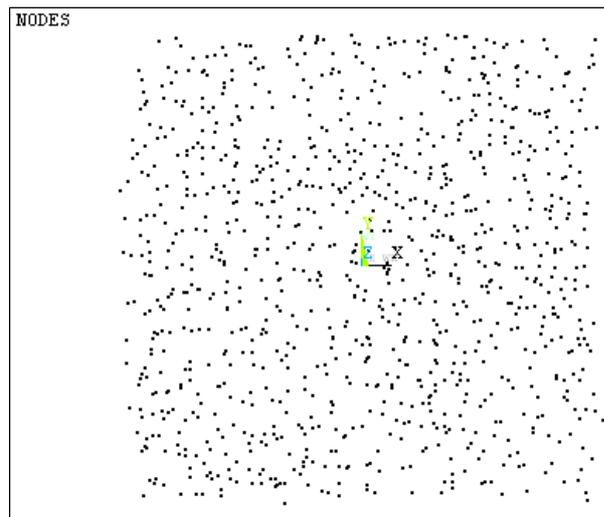
#### 4. 2. 3. SIMULACIÓN MEDIANTE EL MODELO DE 9000 NODOS EN 3D.

Tras los análisis realizados anteriormente, pasamos a estudiar el modelo de 9000 partículas, para visualizar el comportamiento del gel, sin efecto del empotramiento.

Se generan modelos de dos configuraciones: la 01 y la 04, sobre los cuales se aplican fuerzas volumétricas instantáneas o continuas, como ejemplos típicos de las distintas configuraciones.

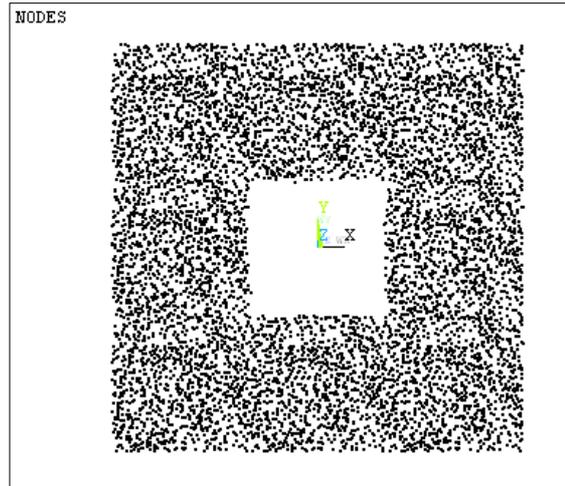
Partiendo del modelo de 1000 partículas, y aplicando las condiciones de contorno periódicas usadas en MD, se crea un sistema de 9000 nodos, por tanto, usamos la posición de la quinta partícula más alta de la caja central para medir la evolución de la interfase, como hicimos en el caso de las simulaciones de MD. Donde la zona central es el modelo de partida.

En la siguiente imagen, se aprecia el modelo de partida de 1000 nodos.

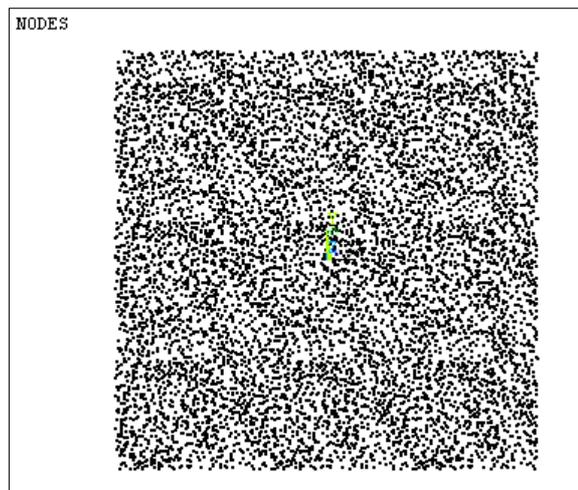




Aplicando las condiciones periódicas se genera el resto del sistema de partículas.



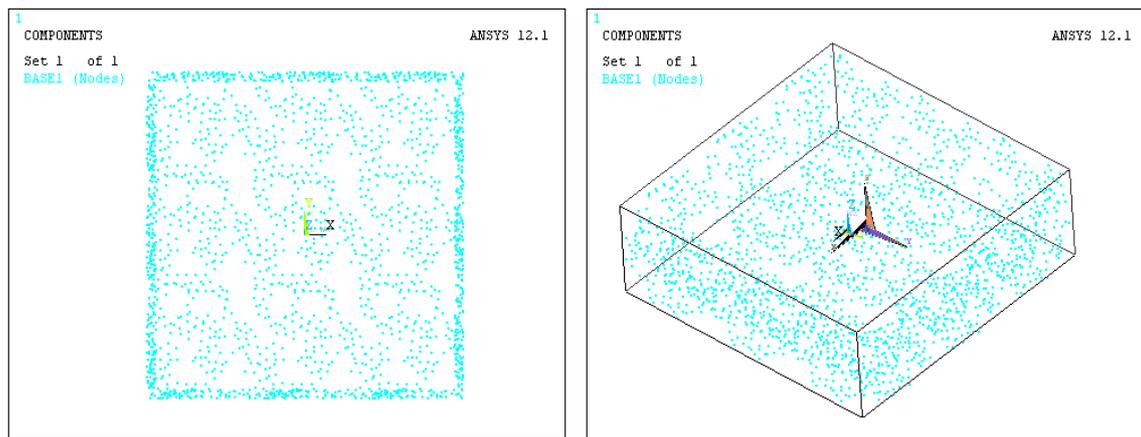
El modelo a analizar de 9000 partículas, presenta la siguiente forma:



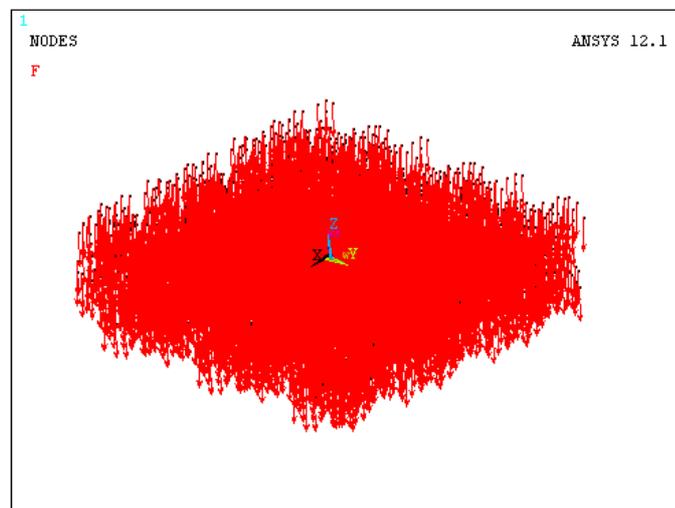
Los sucesivos pasos a realizar, son similares al análisis del modelo de 1000 nodos, siendo:



- Generar las restricciones en todas las caras laterales y en la base, para evitar movimiento de sólido rígido.



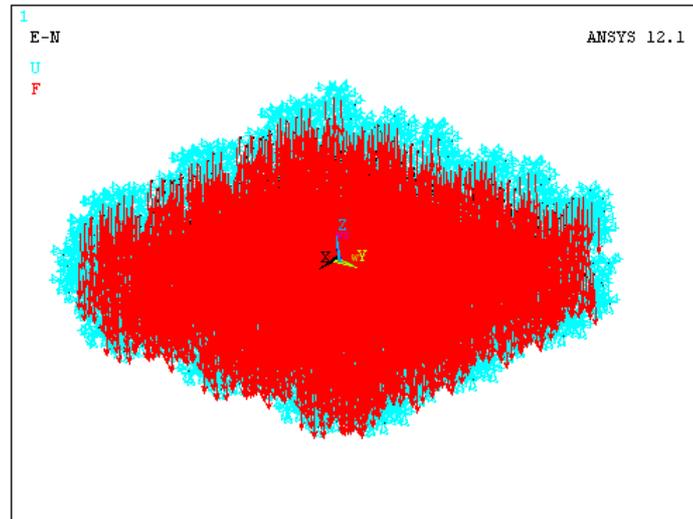
- Al resto de nodos que no poseen restricciones, se les aplicará una fuerza volumétrica, en dirección de  $-Z$ .



- Se realiza el mallado y se asigna el tipo de material a cada elemento, en función de su longitud, similar a la simulación del modelo de 1000 nodos, como ya se describió anteriormente.



- Una vez consideradas todas las condiciones de contorno y propiedades, el modelo queda listo para ser resuelto.



El primer paso en la resolución del sistema es el mallado, que es el que más tiempo consume. En este modelo con 9000 nodos se forman alrededor de 30000 elementos, lo que tarda, aproximadamente, unas ocho horas de cálculo en los ordenadores en los que se ha trabajado. La posterior resolución del modelo con MEF es bastante rápida, y suele tardar una media hora.

Es necesario notar, por tanto, que en el modelo de carga continua, donde se hace el mallado para cada estado de carga, un ciclo completo desde  $F=0$  hasta  $F=-0.25$ , con 25 estados de carga, consume alrededor de diez días de computación, si no aparece ningún problema adicional.

Para el caso de carga instantánea, puesto que el mallado no se repite, el tiempo de computación es sensiblemente inferior, pudiendo realizarse un ciclo de carga completo en uno o dos días.



El tiempo total de computación de los cálculos con el MEF presentados en este Proyecto, superan con creces los tres meses.

#### **4. 2. 3. 1. FUERZAS VOLUMÉTRICAS CONTINUAS. CONFIGURACIÓN 01.**

Vamos a estudiar en esta sección la respuesta del modelo de 9000 nodos, para las mismas fuerzas que se consideraron en MD, y variando el módulo elástico del material 1, el que es compresible.

Se va a analizar en detalle las gráficas obtenidas mediante el valor de  $E = 2.5 \cdot 10^4$  y  $E = 6 \cdot 10^4$  a lo largo del abanico de fuerzas volumétricas aplicadas, indicando mediante plots la posición real de las partículas del 4º, 5º y 6º cuadrante.

Durante la convergencia del modelo, se han encontrado situaciones con movimientos de sólido rígido por parte de alguna partícula, como consecuencia de un cambio brusco. Este comportamiento origina la paralización del cálculo.

En este punto nos hemos detenido y se han estudiado distintos parámetros de convergencia, con el objeto que el modelo fuera capaz de llegar a la solución. Nuestras investigaciones no han sido favorables, y como consecuencia se decidió considerar la posición de las partículas del método de la Dinámica Molecular para el siguiente estado de carga, para guiar nuestro modelo hacia la convergencia y continuar con el bucle de fuerzas volumétricas.

La hipótesis elegida es correcta, puesto que ayuda a encontrar la solución al problema.

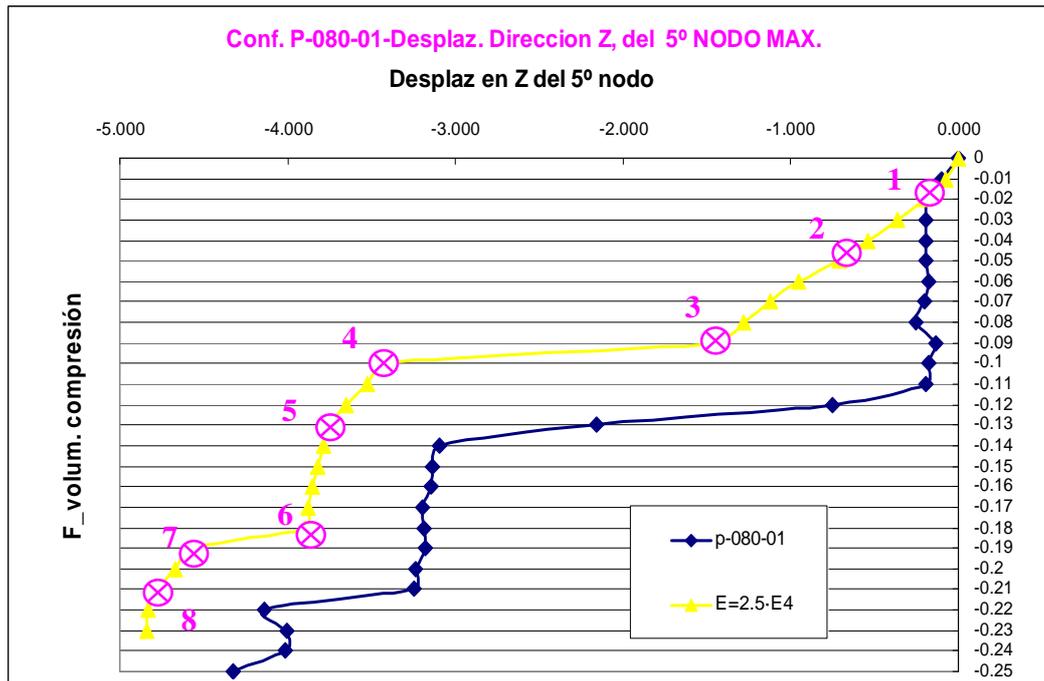


**MODELO CON  $E = 2.5 \cdot 10^4$ .**

Mostramos a continuación los resultados para un modelo de 9000 partículas, considerando el elemento Link 180, que se caracteriza por ser capaz de soportar esfuerzos de tracción, compresión y no pone impedimento a comportamiento a flexión.

Dependiendo de la longitud del elemento se aplicara un material incomprensible o un material elástico lineal, que en este caso tiene el valor de  $E = 2.5 \cdot 10^4$ .

A continuación se representan los desplazamientos de la quinta partícula más alta, para cada una de las fuerzas volumétricas aplicadas junto con la curva de MD.

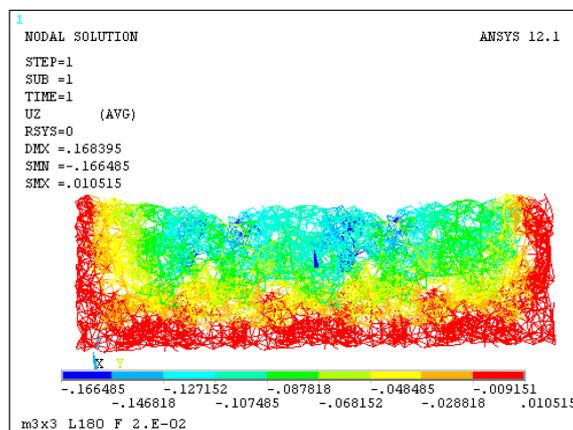
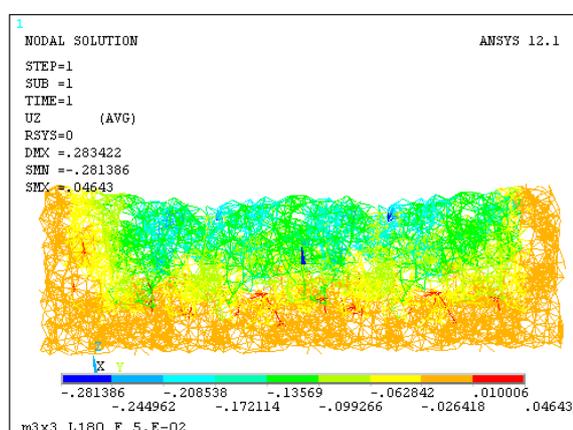




Inicialmente se puede observar, que ambas curvas guardan una gran similitud, diferenciándose varias zonas. La primera zona es lineal; en la gráfica de MD tiene el mismo desplazamiento para las distintas fuerzas, mientras que en la curva de MEF en este tramo, el desplazamiento es creciente. Es aquí donde se produce la única diferencia entre ambos métodos. Tras esta zona lineal se produce un cambio abrupto, que se debe a la plasticidad del material. Una vez superada ésta da lugar a un pequeño crecimiento de desplazamiento para distintos valores de fuerza, hasta llegar a otro punto donde se vuelve a tener un comportamiento abrupto.

Hay que reflejar que en aquellas zonas donde se produce el cambio brusco de desplazamiento, en la curva del MEF, la solución adoptada es la comentada anteriormente, mediante el fichero de posición de las partículas para el siguiente estado de carga resuelto del método de la Dinámica Molecular.

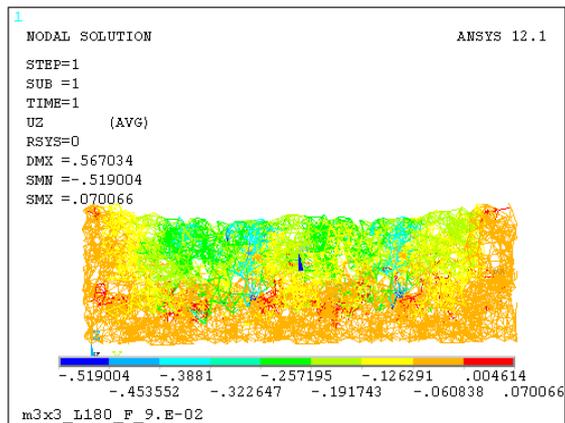
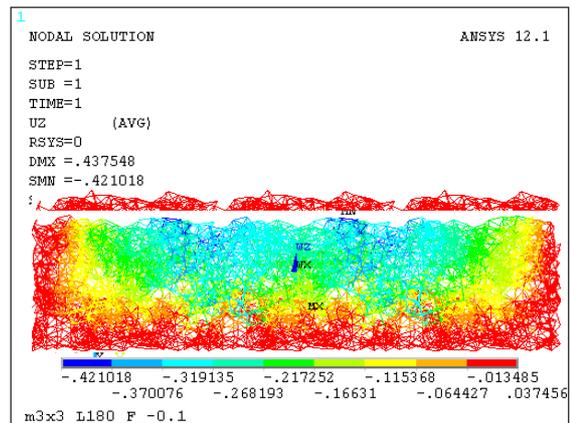
En las siguientes imágenes se presentan los desplazamientos de los cuadrantes 4°, 5° y 6° del modelo, para los distintos valores de fuerzas volumétricas, el quinto cuadrante corresponde a la caja inicial, que se replicó en las dos direcciones laterales. Esta es la gran diferencia frente al modelo de 1000 nodos, ya que las restricciones laterales no van a alterar los resultados.

Caso 1.  $F = -0.02$ .Caso 2.  $F = -0.05$ .



En los plots se puede apreciar una barra de colores que indica el mínimo y el máximo desplazamiento unitario, siendo respectivamente el color azul y el color rojo.

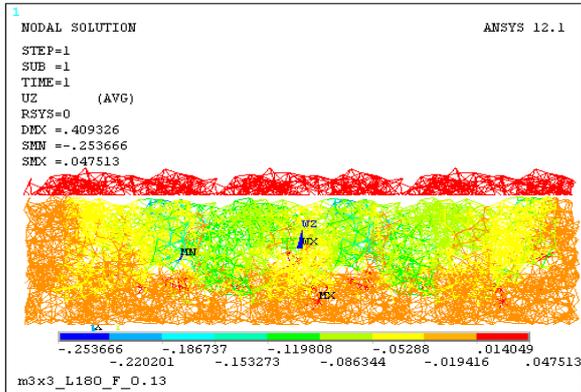
Si nos centramos en el modelo, se aprecia el efecto de las restricciones (laterales y base) en color rojo, ya que estas partículas fijan el modelo. Se observa una curvatura de la interfase fijándonos en la bandas de colores en la zona central del modelo, lo que significa que la fuerza volumétrica a compresión esta comprimiendo el sistema. En la caja central, sin embargo, no se observa efecto de los empotramientos laterales, como se buscaba con la replicación del sistema.

Caso 3.  $F = -0.09$ .Caso 4.  $F = -0.1$ .

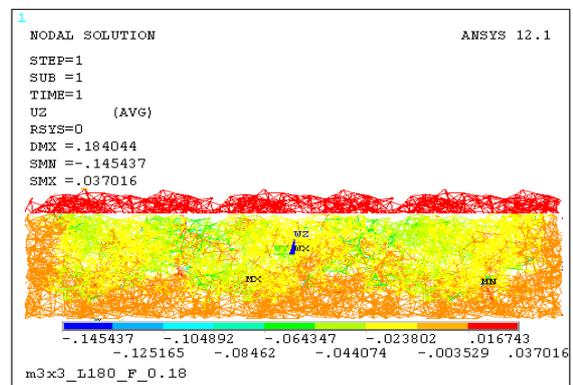
En el caso 4, es donde se produce el desplazamiento brusco y es aquí donde hacemos uso del fichero de posiciones de MD, para guiar a nuestro modelo hacia la convergencia. La nueva posición de las partículas tiene el salto del desplazamiento por ello se obtiene un valor inferior de desplazamiento que el anterior estado de carga del MEF resuelto. En los casos siguientes se introduce de fondo la configuración inicial del sistema para compararlo con el modelo resuelto.



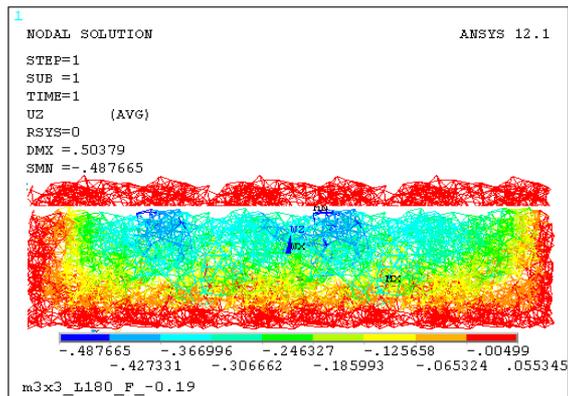
Caso 5.  $F = -0.13$ .



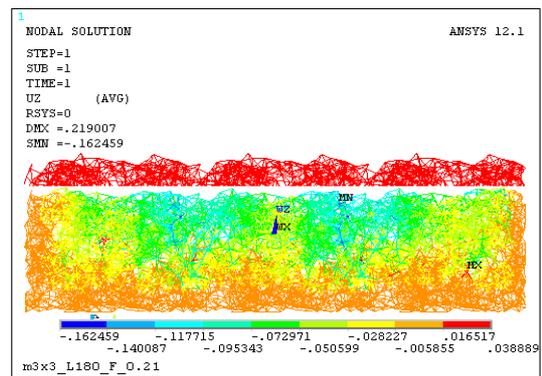
Caso 6.  $F = -0.18$ .



Caso 7.  $F = -0.19$ .



Caso 8.  $F = -0.21$ .



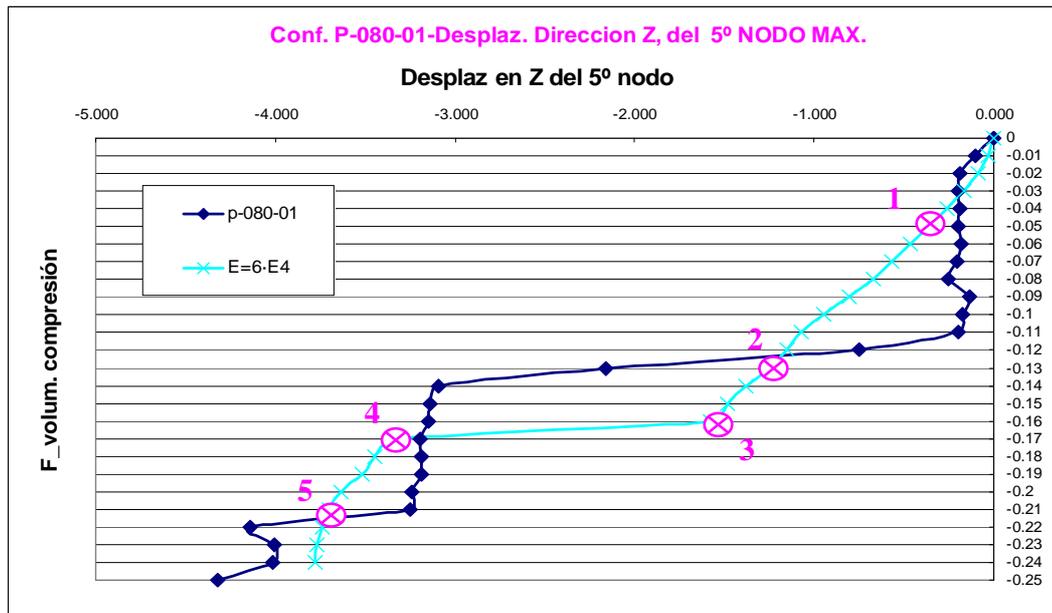
Se muestran finalmente los valores numéricos del desplazamiento de la interfase, según el MEF, en la tabla siguiente. Además, se han marcado en azul las fuerzas en las que el método no pudo encontrar la solución por sí solo.



F_volum.compresion	Desplaz. 2.5E4_E12_F_01_25 - 5 nodo
0	0
-0.01	-7.18E-02
-0.02	-0.2044334
-0.03	-0.3628111
-0.04	-0.5418587
-0.05	-0.7094154
-0.06	-0.9521418
-0.07	-1.121066
-0.08	-1.285706
-0.09	-1.468375
-0.1	-3.4101
-0.11	-3.520397
-0.12	-3.65E+00
-0.13	-3.74E+00
-0.14	-3.79E+00
-0.15	-3.82E+00
-0.16	-3.86E+00
-0.17	-3.88E+00
-0.18	-3.90E+00
-0.19	-4.565732
-0.2	-4.674954
-0.21	-4.765848
-0.22	-4.832436
-0.23	-4.843302

**MODELO CON  $E = 6 \cdot 10^4$ .**

Repetimos el análisis anterior para otro valor del módulo elástico, E. Como en el caso anterior, se observa un salto en el desplazamiento en una fuerza crítica, igual que en las simulaciones de MD.

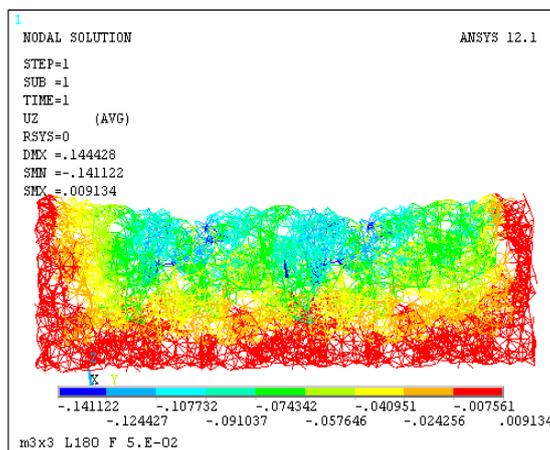




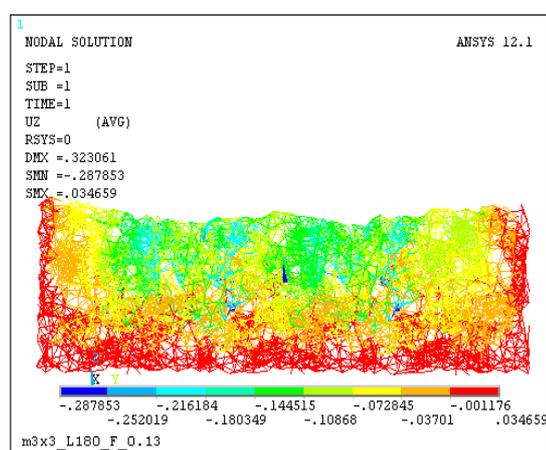
Si analizamos ambas curvas, apreciamos una primera parte donde al igual que en el modelo anterior tenemos una diferencia. El desplazamiento se mantiene constante en MD mientras que la curva de MEF se produce un desplazamiento creciente. Tras este tramo ambas curvas tienen comportamientos similares, se produce un cambio abrupto, debido a la plasticidad del material. Una vez superado este salto, vuelve a tener un desplazamiento creciente.

Por cada punto señalado en la gráfica se presenta un plot de desplazamientos de los cuadrantes 4º, 5º y 6º del modelo.

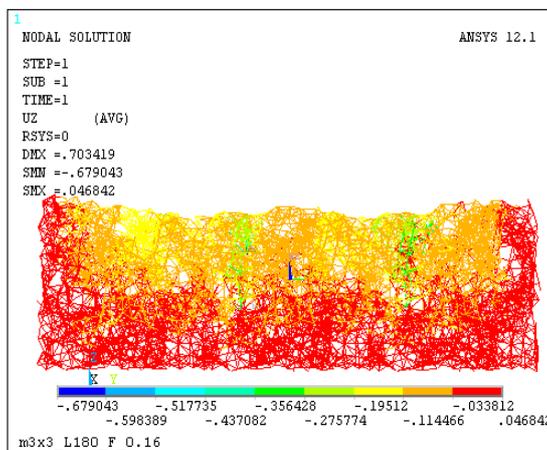
Caso 1.  $F = -0.05$ .



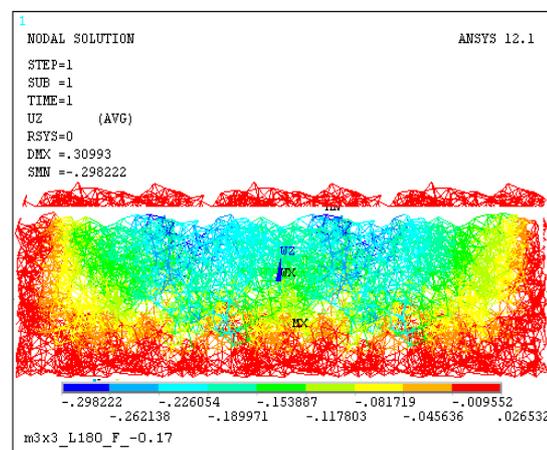
Caso 2.  $F = -0.13$ .



Caso 3.  $F = -0.16$ .

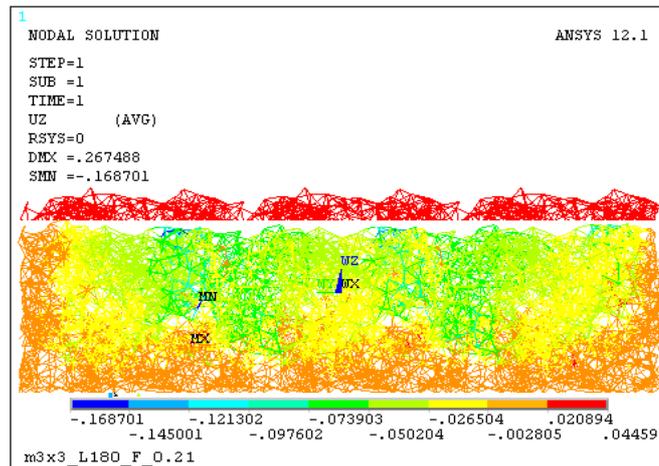


Caso 4.  $F = -0.17$ .





Caso 5.  $F = -0.21$ .

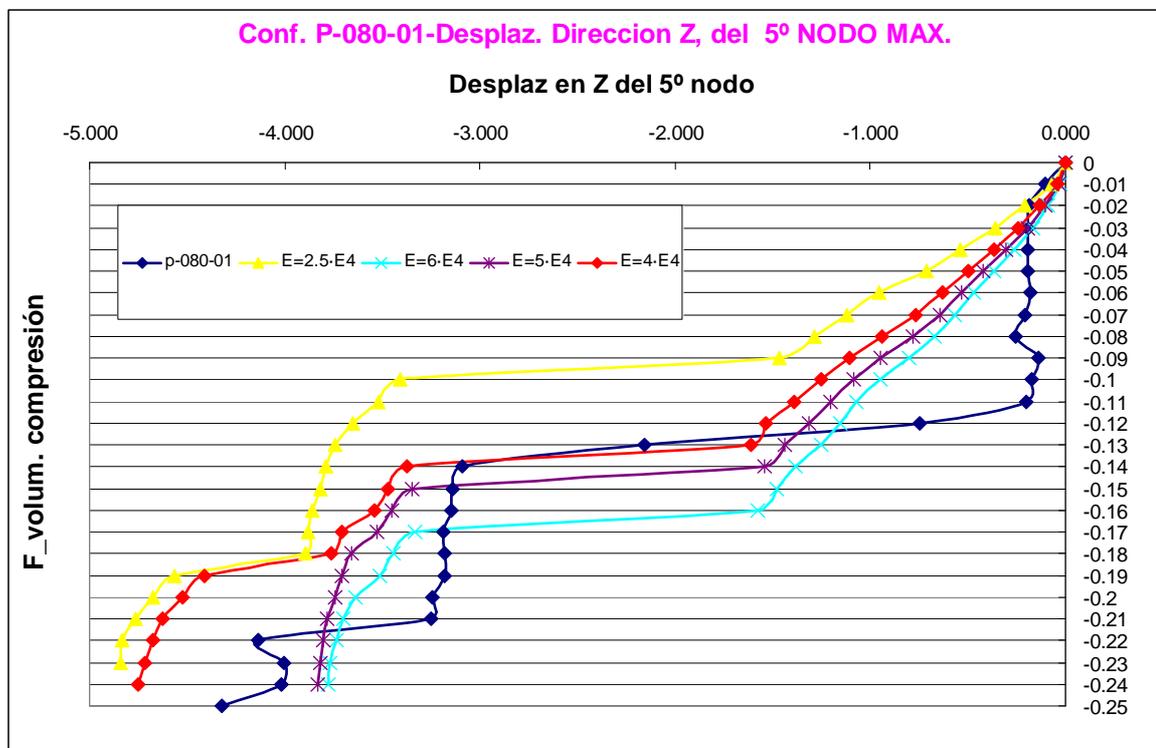


Al igual que en el modelo anterior, la caja central no se ve afectada, por los empotramientos laterales. En la siguiente tabla se pueden observar los desplazamientos en función de la fuerza.

F_volum.compresion	Desplaz_6E4_E12_F_01_25 - 5 nodo
0	0
-0.01	-2.99E-02
-0.02	-8.72E-02
-0.03	-0.1661596
-0.04	-0.259654
-0.05	-0.3642244
-0.06	-0.468482
-0.07	-0.5687304
-0.08	-0.6680317
-0.09	-0.8033962
-0.1	-0.9499941
-0.11	-1.071469
-0.12	-1.154824
-0.13	-1.254021
-0.14	-1.382622
-0.15	-1.479677
-0.16	-1.574126
-0.17	-3.333897
-0.18	-3.444482
-0.19	-3.51653
-0.2	-3.635242
-0.21	-3.699937
-0.22	-3.737039
-0.23	-3.767639
-0.24	-3.779293



Para concluir esta sección, se muestra en la siguiente figura el comportamiento del modelo para distintos valores del módulo elástico, junto con los resultados de MD. Todos ellos muestran un salto abrupto aproximadamente en el mismo valor de fuerza volumétrica que la MD, tal como se muestra en el siguiente gráfico.



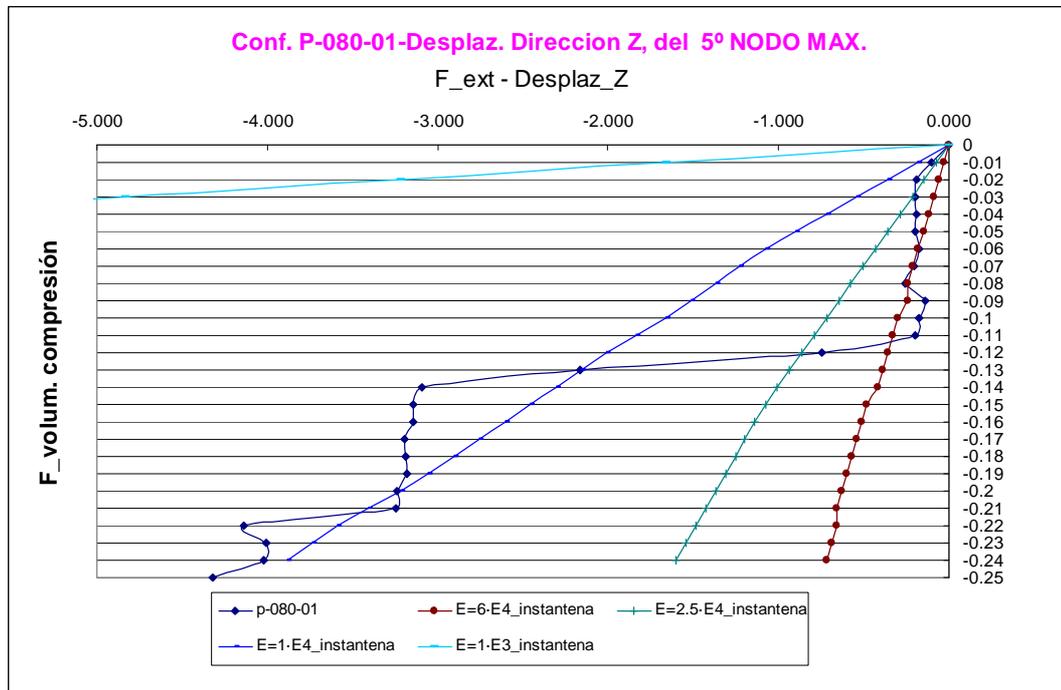


### 4. 2. 3. 2. FUERZAS INSTANTÁNEAS. CONFIGURACIÓN 01.

Al igual que en los análisis anteriores se lanzan distintos casos con valores de módulo elástico diferentes, pero con el mismo bucle de fuerzas. Esta simulación se caracteriza porque no se tienen en cuenta las condiciones resultantes del estado anterior, es decir, se realiza el mallado y las condiciones de contorno para un valor de fuerza volumétrica nula y las siguientes fuerzas volumétricas se aplican para este mismo modelo.

Las diferentes fuerzas volumétricas a compresión aplicadas se inician con un valor nulo hasta -0.25, con un incremento constante de -0.01.

Los modelos analizados presentan las curvas que se muestran junto con la curva obtenida a través de MD.



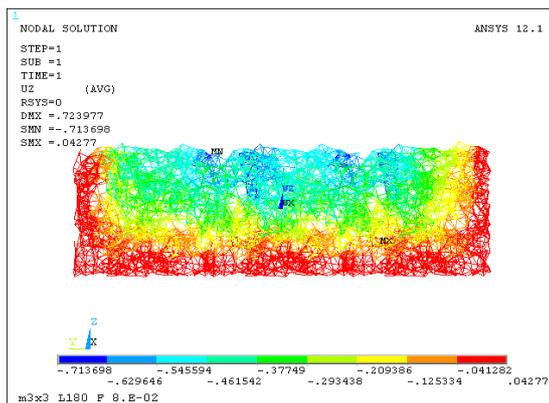


Hay que destacar, que en estos modelos no se producen el salto abrupto, porque no se permite que se rompan los enlaces. Por otro lado, no hay los problemas de convergencia que se presentaron en el caso de carga continua.

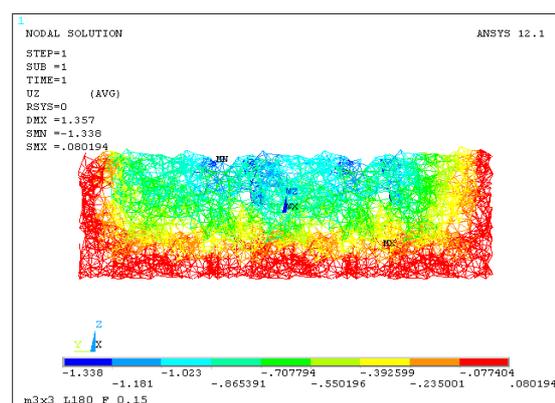
Se generan tres plots de resultados, con el fin de observar el desplazamiento de las partículas de los cuadrantes 4º, 5º y 6º en la dirección Z.

Los desplazamientos son tan pequeños que las paredes laterales no afectan a la posición de la interfase en la zona central.

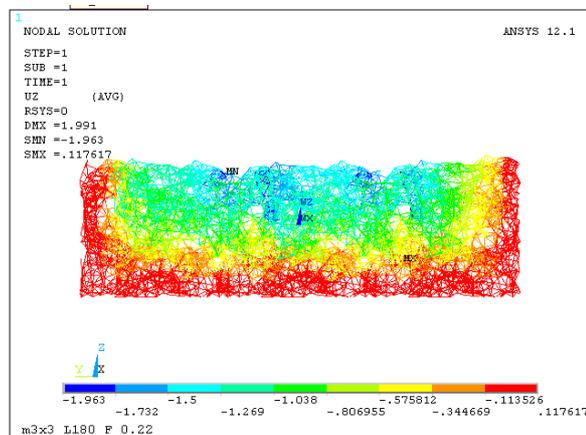
Caso 1.  $F = 0.08$



Caso 2.  $F = 0.15$

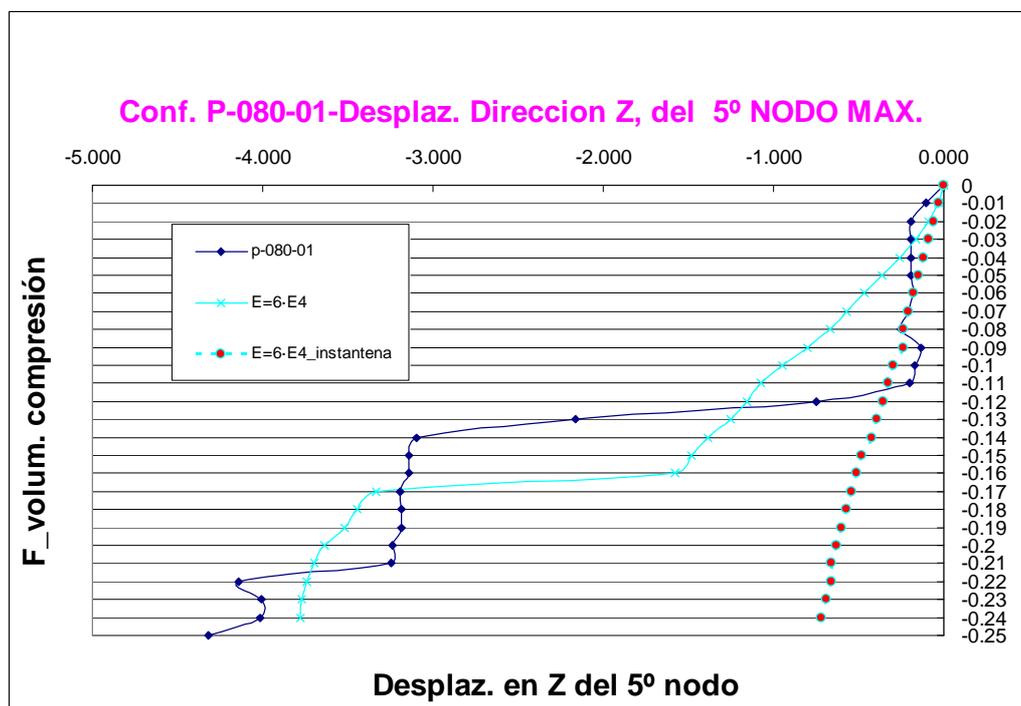


Caso 3.  $F = 0.15$





Por último, para concluir esta sección, vamos a comparar los desplazamientos de la interfase obtenidos mediante los dos tipos de carga aplicada, continua o instantánea. Tomaremos los resultados obtenidos para el mismo valor del módulo elástico,  $E=6 \cdot 10^4$ , en ambos casos. La comparación se muestra en la figura siguiente, junto con los resultados de la simulación de MD.



Además de la diferencia ya discutida de que el modelo de carga instantánea no reproduce el salto abrupto en el desplazamiento de la interfase, podemos ver que la compresión en el caso de carga continua es mayor que en el otro caso. Una vez más, esta diferencia nos muestra el carácter plástico del material.

Para comprender mejor el origen de la diferencia en desplazamientos, recordemos que en el modelo de carga continua se hace un remallado del sistema después de cada carga aplicada, formándose nuevos enlaces (incompresibles algunos y elásticos otros), o rompiéndose algunos, mientras que en el caso de carga instantánea el mallado original se



aplica en todas las fuerzas. La diferencia en los desplazamientos observados, por tanto, implica que en el remallado el sistema se vuelve menos resistente, es decir se rompen enlaces, a la vez que se estructuran mejor las partículas en un espacio cada vez menor.

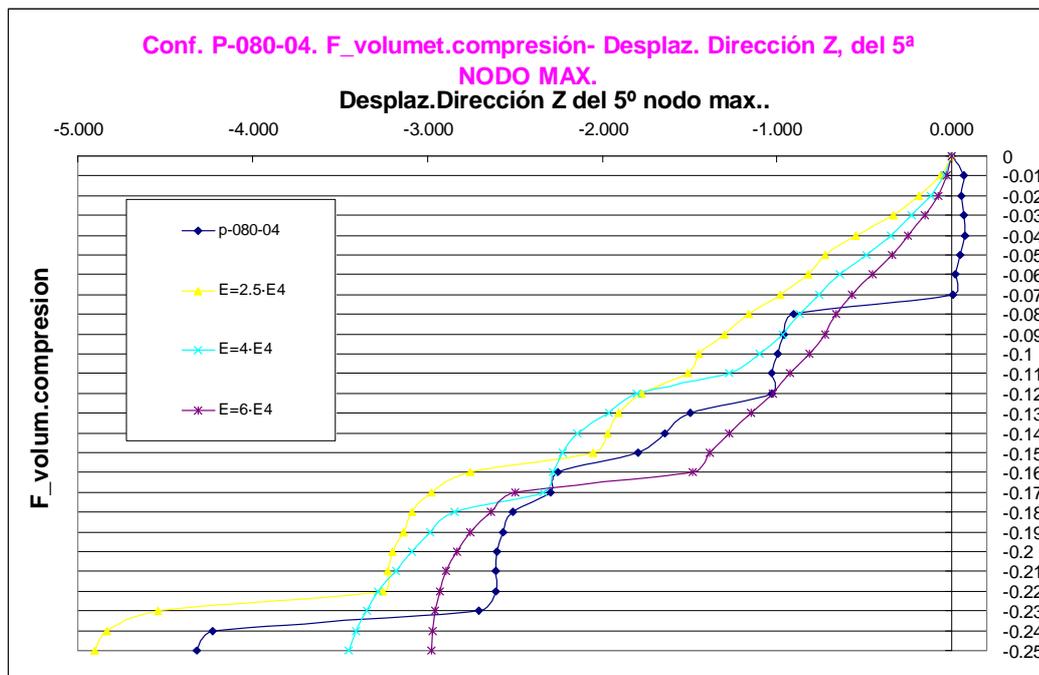
Hay que destacar que los comportamientos en las simulaciones de MD, eran opuestos a los obtenidos mediante el MEF. Es decir, el desplazamiento es mayor en el caso de carga instantánea, aunque las diferencias no eran demasiado grandes. El origen de esta diferencia, sin embargo, no puede investigarse mediante el MEF.



### 4. 2. 3. 3. FUERZAS VOLUMÉTRICAS INSTANTÁNEAS - CONTINUAS. CONFIGURACIÓN 04.

Se repitieron los análisis mostrados anteriormente para otras configuraciones, llegándose a conclusiones similares. En la siguiente gráfica se muestran los resultados para la configuración 04 y el caso de carga continua. De nuevo se observa el salto abrupto del desplazamiento de la interfase, y como el modelo propuesto lo reproduce cualitativamente.

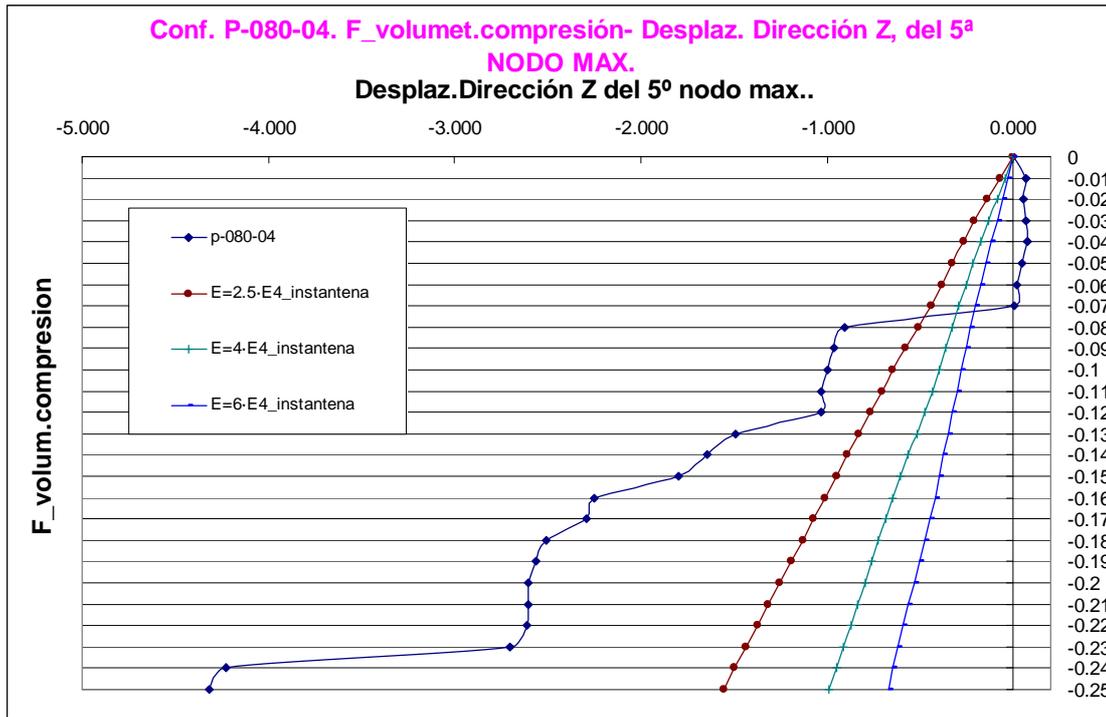
**Modalidad: F. continua.**



Igualmente, para el caso de fuerza instantánea, el MEF no reproduce el salto abrupto, debido a que el mallado inicial no se rehace, y el sistema tiene un comportamiento elástico lineal.



**Modalidad: F. instantánea.**





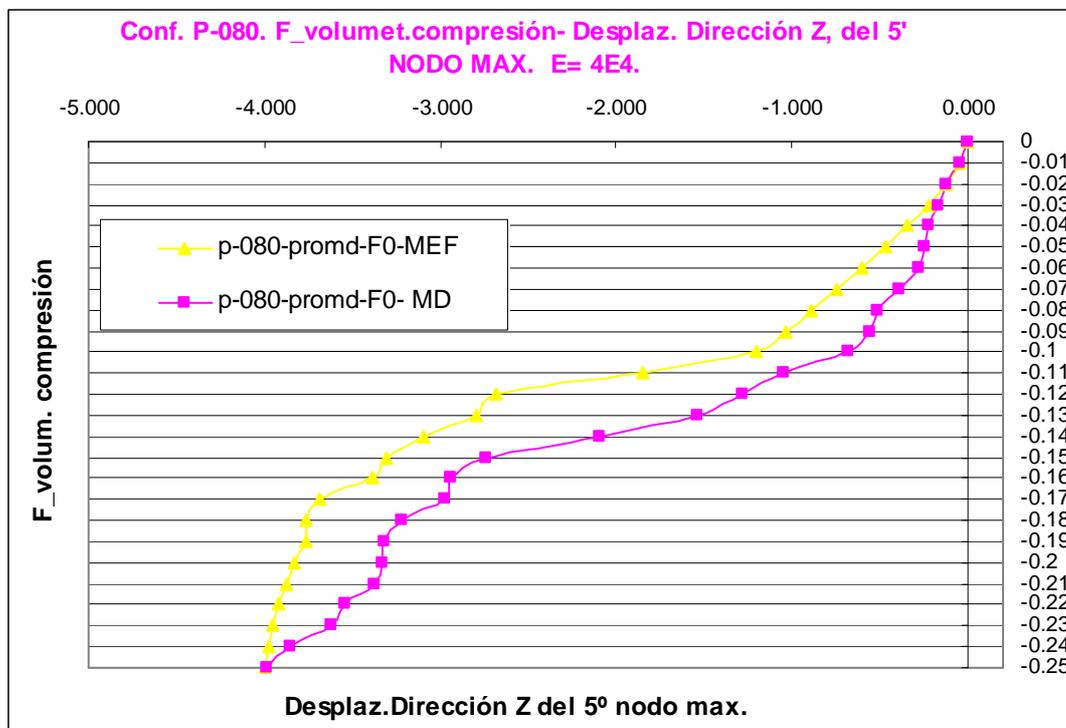
### 4. 3. COMPARATIVA ENTRE MD Y MEF.

Tras los estudios realizados, vemos que el valor de módulo elástico,  $E = 4 \cdot 10^4$ , puede ser optimo para comparar ambas simulaciones.

El siguiente análisis a realizar se basa en mantener el mismo valor de módulo elástico para todas las configuraciones del MEF. El valor elegido es  $E = 4 \cdot 10^4$  en la modalidad de fuerza continua, es decir se realiza el remallado para cada estado de carga del bucle, siendo éste el mismo que el de MD.

Utilizaremos los resultados de la quinta partícula más alta, los cuales se mostrarán en una gráfica, para ser comparada.

A continuación se muestra la gráfica con ambas curvas.





Se puede observar que ambas curvas si guardan una gran similitud. Inicialmente las curvas poseen una zona lineal. Tras este tramo se produce el colapso del material, por el comportamiento plástico y se finaliza con un tramo creciente de desplazamiento.

Aunque un ajuste más fino del módulo elástico hubiera hecho posible un mejor acuerdo entre los resultados de MEF y MD, consideramos que la comparación mostrada es suficientemente buena para estimar la bondad del método desarrollado en este proyecto. La elección del tipo de elemento, las propiedades del material, y la estructura intrincada del gel son responsables del comportamiento observado.

Para finalizar, conviene indicar en unidades del Sistema Internacional, S.I. el valor del módulo elástico elegido,  $E = 4 \cdot 10^4$ . Haremos uso del apartado **2. 1. 3. 7. Unidades reducidas [Pág. 55]**, donde se indica la equivalencia entre el sistema internacional y el sistema reducido, siendo:

$$\text{Sist. Reduc.: } E = 2.5 \cdot 10^4 \rightarrow \text{S.I.: } 77,11 \text{ [N/m}^2\text{]}$$

$$\text{Sist. Reduc.: } E = 4 \cdot 10^4 \rightarrow \underline{\underline{\text{S.I.} = 123,38 \text{ [N/m}^2\text{]}}}$$

Este valor del módulo de Young es mucho más pequeño que el característico de materiales atómicos (en el orden de los GPa). Se refleja, con ello, el carácter “blando” de los geles coloidales, que entran dentro de la llamada materia blanda, soft matter.



## 5. CONCLUSIONES.

En este Proyecto se ha pretendido resolver mediante el MEF, el comportamiento de Geles Coloidales cuando se ven sometidos a una fuerza volumétrica a compresión, intentado representar el colapso de los Geles.

Mediante la herramienta comercial llamada Ansys, que aplica el MEF, analizamos una serie de elementos, para representar el comportamiento de los enlaces entre partículas.

Estudiando distintas posibilidades, decidimos investigar la elasticidad de geles coloidales mediante la aplicación del MEF, comparando simulaciones de MD mediante un código generado en Fortran. A través de estas simulaciones estudiamos la evolución de la interfase superior del sistema (caracterizado por la quinta partícula más alta) en función de la fuerza volumétrica aplicada.

- 1- De los resultados obtenidos mediante las simulaciones de MD, hay que destacar que el desplazamiento que se produce no es lineal. Se observa una determinada fuerza crítica, donde un pequeño incremento de la fuerza volumétrica produce un gran desplazamiento de la interfase. Esto se debe al comportamiento plástico del material, es decir se detecta el colapso del gel.
- 2- Se han investigado distintos elementos en MEF, para Ansys, con el fin de describir el sistema. Finalmente se opta por el Link-180. El modelo se caracteriza por tener dos materiales distintos, siendo incompresible cuando la longitud de las partículas sea inferior a dos veces el radio de las partículas.
- 3- Se estudian dos modalidades de carga en los modelos, tanto para las simulaciones de MD como para el MEF. Una es con fuerza continua y la otra instantánea. La diferencia entre ellas en el MEF es que en el caso de carga continua se hace un remallado del sistema después de cada fuerza.
- 4- Se debe destacar que para el caso de carga continua, se ha comprobado que la evolución de la interfase depende de todas las fuerzas anteriores



aplicadas al sistema, es decir del incremento de fuerzas considerado, mostrando que el comportamiento es plástico.

- 5- Teniendo en cuenta el mismo incremento de fuerzas que en las simulaciones de MD, ha sido posible ajustar el módulo elástico para reproducir las principales características del comportamiento de la interfase (lineal a bajas fuerzas, colapso, y saturación para fuerzas grandes).
- 6- Para ayudar a la convergencia del MEF de las soluciones, se ha tomado las configuraciones de MD, cuando se produce el colapso del sistema.
- 7- Las simulaciones de carga instantáneas solo presentan un tramo lineal, y los desplazamientos observados son menores que los obtenidos a través de fuerzas continuas. Esto indica que en el remallado se debilita el sistema, hasta que finalmente llegamos al colapso. Este comportamiento sucede para el MEF, pero en la simulación MD es justo lo contrario.
- 8- Se realiza la comparativa entre las simulaciones de MD y el MEF, donde para el MEF se mantiene el mismo valor de módulo elástico  $E = 4 \cdot 10^4$  para todas las configuraciones. Los resultados se obtienen del desplazamiento de la quinta partícula más alta y realizando el remallado, para cada caso de carga, en la modalidad de fuerza continua. Los resultados son muy buenos, puesto que ambas curvas son prácticamente iguales. Tienen inicialmente una zona lineal, tras este tramo se produce el colapso del material, por el comportamiento plástico y se finaliza con un tramo creciente de desplazamiento.



## 6. BIBLIOGRAFÍA.

- [1] J. M. Brader. Statistical Mechanics of a Model Colloid-Polymer Mixture. Published August 2001.
- [2] J.B.Caballero Moraleda. Diagrama de Fases de Electrolitos Coloidales. Simulaciones y Experimentos. Tesis Doctoral, Universidad de Almería (2006).
- [3] J.T. Celigüeta Lizarra. Método de los Elementos Finitos para Análisis Estructural. Cuarta edición, Marzo 2011.
- [4] R. D. Cook. Finite Element Method for Stress Analysis. John Wiley & Sons, Inc. New York (1995).
- [5] A. D. Dinsmore; V. Prasad; I. Y. Wong; D. A. Weitz. Microscopic Structure and Elasticity of Weakly Aggregated Colloidal Gels. Physical Review Letters. Vol. 96, pag. 185502-1 (2006).
- [6] D. Frenkel; B. Smit. Understanding Molecular Simulation From Algorithms to Applications. Editorial: Elsevier Science 2001.
- [7] C. Kim; Y. Liu; A. Kühnle; S. Hess; S. Viereck; T. Danner; L. Mahadevan; D. A. Weitz. Gravitational Stability of Suspensions of Attractive Colloidal Particles. Physical Review Letters. Vol 99, pag. 028303-1 (2007).
- [8] H. N W. Lekkerkerker; W. C. K. Poon; P. N. Pusey; A. Stroobants; P. B. Warren. Phase Behaviour of Colloid + Polymer Mixtures. Europhys. Letters, Vol. 20 (6), pag. 559 (1992).
- [9] S. Manley; J. M. Skotheim; L. Mahadevan; D. A. Weitz. Gravitational Collapse of Colloidal Gels. Physical Review Letters. Vol. 94, pag. 218302-1 (2005).
- [10] K.N. Pham; A. M. Puertas; J. Bergenholtz; S. U. Egelhaaf; A. Moussaïd; P. N. Pusey; A. B. Schofield; M. E. Cates; M. Fuchs; W. C. K. Poon. Multiple Glassy States in a Simple Model System. Science Vol. 296, pag. 104 (2002).
- [11] W. C. K. Poon; L. Starrs; S. P. Meeker; A. Moussaïd; R. M. L. Evans; P. N. Pusey; M. M. Robins. Delayed sedimentation of transient gels in colloid-polymer mixtures: dark-field



observation, rheology and dynamic light scattering studies. Faraday Discussions. Vol. 112 pag.143. (1999)

[12] A.M. Puertas; M. Fuchs; M. E. Cates. Simulation study of nonergodicity transitions: Gelation in colloidal systems with short-range attractions. Physical Review E. Vol. 67, pag. 031406 (2003).

[13] L.J. Rodriguez. Sistemas coloidales: Características generales. Departamento de Química Física- Facultad de Farmacia, Universidad de Salamanca.

[14] E. Zaccarelli. Colloidal gels: equilibrium and non-equilibrium routes. Journal of Physics: Condensed Matter. Vol. 19, pag. 323101 (2007).

[15] O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, J.Z. Zhu. The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals . Elsevier, Amsterdam (2000).

#### **WEBS DE INTERÉS:**

[1] E. V. Cano. Coloides. Publicado en: [www.uam.es/personal-pdf/ciencias/evelasco/coloides.pdf](http://www.uam.es/personal-pdf/ciencias/evelasco/coloides.pdf).

[2] <http://www.acresso.com/>. ANSLIC\_ADMIN Help menu option.GNU LESSER



## 7. ANEXOS.

### 7. 1. CONDIGO PARA LAS SIMULACIONES CON DINÁMICA MOLECULAR.

Archivo: /media/USB DISK/Proyecto/proy...ado\_final/pi\_final\_pos\_input.f

```

c nd4.f
c ND SIMULATION: nmax particles in 3D off-lattice
c
implicit real*8(a-h,p-z)
integer*2 lista(1000,0:100)
integer, parameter:: nmax = 1000
common /neighb/ boxl,dcorte,lista,ilista
common /pos/ x(1000),y(1000),z(1000),vx(1000),
1 vy(1000),vz(1000), R(1000),nmax0
common /pot_data/ dq,phi_s
common /F_externa/ F_ext
common /data/ t , tfin, dtp
logical ivecinos ! Variable logical
dimension x01(1000),y01(1000),z01(1000),iconta_fsqt(50),dnwr(50)
dimension dfx(1000),dfy(1000),dfz(1000)

dtp=2.5d-3 ! Time step (time scale)
nmax0=1000 ! Number of particles (natural**3)
dphi=0.40d0 ! Volune fraction
dq=0.1d0 ! Sizes ratio
ivec=0
delta=0.10d0 ! Width of the size distribution
dpi=dacos(-1.d0) ! pi
t= 0d0 ! tiempo inicial
tfin=3000.0 ! tiempo final.
phi_s = 0.50 ! se hace referencia al titulo interface
F_ext = -0.24 ! fuerza exterior para las particulas

volpart=nmax0*4.d0/3.d0*dpi*(1.d0+delta*delta) ! volum.particula
volbox=(volpart/dphi)*1.d0 !volumen. caja

```



```

boxl=dexp(1.d0/3.d0*dlog(volbox))
c print *,'# Edge: ',boxl
c write (23) sngl(boxl)
c Numero de pasos minimos q debe de dar una particula
dcorte= 3d0 ! Dato: rv. Maximum distance for neighbours
looplista=nint((dcorte-2d0*(1d0+dq))/16d0/dtp)
print *,'# looplista: ',looplista
c print *,'# dcorte: ',dcorte
c print *,'# dq: ',dq
c print *,'# dtp: ',dtp
c Se crea una imagen de la posicion inicial de las particulas.
do ik=1,nmax0
x01(ik)=x(ik)
y01(ik)=y(ik)
z01(ik)=z(ik)
end do
c Hasta aqui se ha inicializado.
c genero un fichero con codigo u = 20
open (20,file='pos-input.dat',status='OLD')
c Se lee el fichero
read (20,100) lololo ! la 1 linea no se quiere leer, con esto no se leeria
100 format(A70)
DO l=1,nmax
c DO l=1,20
READ(20,*,END=15) x(l),y(l),z(l),vx(l),vy(l),vz(l),R(l)
c write (*,*) l,x(l),y(l),z(l),vx(l),vy(l),vz(l),R(l)
END DO
15 continue
open(10,file='popo.dat') ! para ver como me escribe el fichero leído
DO l=1,nmax
write (10,*) 'COORDE=X=', x(i), 'COORDE=Y =', y(i),
+ 'COORDE=Z=', z(i) , 'COORDE=R=',R(i)
END DO
30 format (4(A8,E10.4)) !NO MERECE LA PENA PUESTO QUE PONE COMO LEE EL FICHERO.
c-----
call vecinos
call inform
call thermostat

```



```

icont=0
do while (t .lt. tfin)
call motion
icont=icont+1
C -----
c UPDATE OF NEIGHBOUR LIST?
dc2=(dcorte-2d0*(1d0+dq))*(dcorte-2d0*(1d0+dq))/4d0
ivecinos=.false.
do 108 jj=1,nmax0
c Se obtiene la difer. de lo q se ha movido cada particula
distx=x(jj)-x01(jj)
disty=y(jj)-y01(jj)
ditz=z(jj)-z01(jj)
c Se obtiene un numero real, con 'an', delante del int.
distx=distx-anint(distx/boxl)*boxl
disty=disty-anint(disty/boxl)*boxl
c distz=distz-anint(ditz/boxl)*boxl
c Distancia en V.abs, de lo q se ha movido en 3D
dist=(distx*distx+disty*disty+ditz*ditz)
if (dist .ge. dc2) ivecinos=.true.
108 continue
if (ivecinos) then
call vecinos
c Se vuelve a coger una imagen de la nueva posicion de
c las particulas.
do 110 jj=1,nmax0
x01(jj)=x(jj)
y01(jj)=y(jj)
z01(jj)=z(jj)
110 continue
ivec=0
end if
c Finalizacion de la lista de vecinos
C -----
if (mod(icont,1000) .eq. 0) then
call inform
call save_pos
call thermostat

```



```

end if
end do
write (*,*) 'dtp,nmax0,dphi,dq,ivec,delta,t,tfin,phi_s,F_ext'
write (*,*) dtp,nmax0,dphi,dq,ivec,delta,t,tfin,phi_s,F_ext
c write (*,*) z01,z02,z03,z04,z05
c read (*,*)
stop
end
c -----
c Elaboracion de la lista de vecinos de cada particula
c -----
subroutine vecinos
implicit real*8(a-h,p-z)
c
integer*2 lista(1000,0:100)
common /neighb/ boxl,dcorte,lista,ilista
common /pos/ x(1000),y(1000),z(1000),vx(1000),
1 vy(1000),vz(1000), R(1000), nmax0
c
c
199 do 206 i=1,1000
lista(i,0)=0
206 continue
c
do 208 i = 1, nmax0-1
do 209 j = i+1, nmax0
dist=distance(i,j)
if (dist .lt. dcorte) then
lista(i,0)=lista(i,0)+1
lista(j,0) = lista (j,0)+1
icc=lista(i,0)
jcc= lista(j,0)
lista(i,icc)=j
lista(j,jcc) = i
if (icc .eq. 100) then
dcorte=dcorte/1.1d0
write (*,*) 'Cortando alcance de vecinos: ',dcorte
goto 199

```



```

end if
end if
209 continue
208 continue
sum=0.
do i=1,nmax0
sum=lista(i,0)+sum
end do
c print *, 'nmax0= ', sum
c print *, 'sum=', sum/1000 ! sale 8.846 vecinos de media
return
end

c -----
c Calculates distance separating particles i and j
c -----
function distance(i,j)
implicit real*8(a-h,p-z)
c
integer*2 lista(1000,0:100)
common /neighb/ boxl,dcorte,lista,ilista
common /pos/ x(1000),y(1000),z(1000),vx(1000),
1 vy(1000),vz(1000), R(1000), nmax0
c
distx=x(i)-x(j)
disty=y(i)-y(j)
distz=z(i)-z(j)
distx=distx-anint(distx/boxl)*boxl
disty=disty-anint(disty/boxl)*boxl
c distz=distz-anint(distz/boxl)*boxl
dist=dsqrt(distx*distx+disty*disty+distz*distz)
distance=dist
c
return
end

c -----
c CALCULO DE LA ENERGIA, aproximacion debe de entrar 12 particula,
c como maximo.
c -----

```



```

subroutine inform
implicit real*8(a-h,p-z)
c
integer*2 lista(1000,0:100)
common /neighb/ boxl,dcorte,lista,ilista
common /pos/ x(1000),y(1000),z(1000),vx(1000),
1 vy(1000),vz(1000), R(1000), nmax0
common /pot_data/ dq,phi_s
common /data/ t , tfin, dtp
dimension nn(0:12)
c
dpi=dacos(-1.d0)
dq3=dq*dq*dq
dener=0.d0
nneigh=0
dcorte=0.d0 !exp(36.d0*log(2.d0/(2.d0+dcorte)))
z01= 0.d0 ! Zmax, para la 1 maxima
z02= 0.d0 ! Zmax, para la 2 maxima
z03= 0.d0 ! Zmax, para la 3 maxima
z04= 0.d0 ! Zmax, para la 4 maxima
z05= 0.d0 ! Zmax, para la 5 maxima
a = 0
b = 0
c
dtemper=0.d0
do 450 ii=1,nmax0
nlist=lista(ii,0)
if (nlist .gt. 0) then
do 452 ij=1,nlist
jj=lista(ii,ij)
ds2s=R(ii)+R(jj)
dist=distance(ii,jj)
dist0=dist-ds2s
dr0=ds2s+dq/5d0
dpot=0.d0
c print *,'dist0 = ', dist0
c print *,'dr0 = ', dr0
c print *,'dist = ', dist

```



```

c print *,'jj = ', jj
if ((dist0 .lt. 2.d0*dq)) then
dq3=dq*dq*dq
dist3=dist*dist*dist
dq1=dq/R(ii)
dq2=dq/R(jj)
dqbar=(dq1+dq2)/dq1/dq2/2.d0
dqbar2=(dqbar+1.0)*(dqbar+1.0)
dqbar3=dqbar2*(dqbar+1.d0)
dq12=(dq1-dq2)/dq1/dq2
if (dist .gt. dr0) then
dpt=((dqbar3-0.75d0*dqbar2*dist/dq
1 +dist3/16.d0/dq3)-0.75d0*dq/dist*dq12*dq12*((dqbar+1.0)-
1 dist/dq/2.d0)**2) !F. Parabolica
c print *,'dpt = ', dpt
c print *,'lololo = '
else
dc0=((dqbar3-0.75d0*dqbar2*dr0/dq
1 +dr0*dr0*dr0/16.d0/dq3)-0.75d0*dq/dr0*dq12*dq12*
1 ((dqbar+1.0)-dr0/dq/2.d0)**2)
dc2=0.75d0*((-dqbar2/dq+dr0*dr0/dq/dq/dq/4d0)-
1 dq*dq12*dq12*(dqbar2/dr0/dr0-0.25d0/dq/dq))
dc00=dc0-dc2/2d0*(dr0-ds2s)
dc22=dc2/2d0/(dr0-ds2s)
dpt=dc00+dc22*(dist-ds2s)*(dist-ds2s) !F. deplexion
c print *,'kkkkkkk = '
end if
dpot=-4d0/3d0*dpt*phi_s
nneigh = nneigh +1
c print *,'dpt = ', dpt
c print *,'dpot = ', dpot
c print *,'hhhhhh = '
end if
c F. compresion
dist3=dist*dist*dist/ds2s/ds2s/ds2s
dist12=dist3*dist3*dist3*dist3
dist36=dist12*dist12*dist12
dcore_pot=4.d0/3.d0/dist36

```



```

c
dener=dener+(dpot+dcore_pot) ! ENERGIA POTENCIAL.
a = a + dpot
b = b + dcore_pot
c print *,'dc00 = ', dc00
c print *,'dc22 = ', dc22
c print *,'dpt = ', dpt
c print *,'a = ', a
c print *,'sssss = '
c print *,'dcore_pot = ', dcore_pot
c print *,'b = ', b
c print *,'dener = ', dener
452 continue
end if
! Energia cinetica
dtemper=dtemper+(vx(ii)**2+vy(ii)**2+vz(ii)**2)/nmax0/2.d0
c print *,'dtemper = ', dtemper
c print *,'vx = ', vx(ii)
c print *,'vy = ', vy(ii)
c print *,'vz = ', vz(ii)
c Obtencion de la particula con Zmax
zz = z(ii)
if (zz .gt. z01) then
z01 = zz ! 1 max en z.
end if
c print *,'Z_maxxx= ', Z_max
450 continue
c-----
c 5 posicion de z maxima
c-----
z01 = z(1)
if (z(2) .gt. z01) then ! 2 max en z.
z02 = z01
z01 = z(2)
else
z02 = z(2)
end if
if (z(3) .gt. z02) then ! 3 max en z.

```



```
if ( z(3) .gt. z01) then
z03 = z02
z02 = z01
z01 = z(3)
else
z03=z02
z02=z(3)
end if
else
z03 = z(3)
end if
if (z(4) .gt. z03) then ! 4 max en z.
if (z(4) .gt. z02) then
if ( z(4) .gt. z01) then
z04 = z03
z03 = z02
z02 = z01
z01 = z(4)
else
z04 = z03
z03 = z02
z02 = z(4)
end if
else
z04 = z03
z03 = z(4)
end if
else
z04 = z(4)
end if
if (z(5) .gt. z04) then ! 5 max en z.
if (z(5) .gt. z03) then
if (z(5) .gt. z02) then
if ( z(5) .gt. z01) then
z05 = z04
z04 = z03
z03 = z02
z02 = z01
```



```
z01 = z(5)
else
z05 = z04
z04 = z03
z03 = z02
z02 = z(5)
end if
else
z05 = z04
z04 = z03
z03 = z(5)
end if
else
z05 = z04
z04 = z(5)
end if
else
z05 = z(5)
end if
c write (*,*) z01,z02,z03,z04,z05
c write (*,*) z(1),z(2),z(3),z(4),z(5)
do i = 6, nmax0
if (z(i) .gt. z05) then
if (z(i) .gt. z04) then
if (z(i) .gt. z03) then
if (z(i) .gt. z02) then
if (z(i) .gt. z01) then
z05 = z04
z04 = z03
z03 = z02
z02 = z01
z01 = z(i)
else
z05 = z04
z04 = z03
z03 = z02
z02 = z(i)
end if
end if
```



```

else
z05 = z04
z04 = z03
z03 = z(i)
end if
else
z05 = z04
z04 = z(i)
end if
else
z05 = z(i)
end if
end if
end do
write (*,367) t, dtemper,dener/nmax0,z01,z02,z03,z04,z05
367 format (10(F10.4))
c write (*,*) z01,z02,z03,z04,z05
c read (*,*)
return
end

c -----
c Calculates the forces acting on every particle
c -----

subroutine forces(dfx,dfy,dfz)
implicit real*8(a-h,p-z)
c
integer*2 lista(1000,0:100)
common /neighb/ boxl,dcorte,lista,ilista
common /pos/ x(1000),y(1000),z(1000),vx(1000),
1 vy(1000),vz(1000),R(1000), nmax0
common /pot_data/ dq,phi_s
common /F_externa/ F_ext
c
dimension dfx(1000),dfy(1000),dfz(1000)
c
boxh=boxl/2.d0
c print *,'boxh = ',boxh
dpi=dacos(-1.d0)

```



```

c print *,'dpi = ',dpi
do 340 ip=1,1000
dfx(ip)=0.d0
dfy(ip)=0.d0
dfz(ip)=0.d0
340 continue
c
c print *,'dfx(524) = ', dfx(514)
do 342 ip=1,nmax0
nlist=lista(ip,0)
if (nlist .ge. 1) then
do 352 ij=1,nlist
jj=lista(ip,ij)
if (jj .gt. ip) then
c
ds2s=R(ip)+R(jj)
ddx=x(ip)-x(jj)
ddy=y(ip)-y(jj)
ddz=z(ip)-z(jj)
c print * , ' ddx(ip) =', ddx
c print * , ' ddy(ip) =', ddy
c print * , ' ddz(ip) =', ddz
if (dabs(ddx) .gt. boxh) ddx=ddx-dabs(ddx)/ddx*boxl
if (dabs(ddy) .gt. boxh) ddy=ddy-dabs(ddy)/ddy*boxl
c if (dabs(ddz) .gt. boxh) ddz=ddz-dabs(ddz)/ddz*boxl
dist=dsqrt(ddx*ddx+ddy*ddy+ddz*ddz)
dist0=dist-ds2s
c
dq3=dq*dq*dq
fpot=0.d0
dr0=ds2s+dq/5d0
if ((dist0 .lt. 2.d0*dq)) then
dist2=dist*dist
dq1=dq/R(ip)
dq2=dq/R(jj)
dqbar=(dq1+dq2)/dq1/dq2/2.d0
dqbar2=(dqbar+1.d0)*(dqbar+1.d0)
dq12=(dq1-dq2)/dq1/dq2

```



```

if (dist .gt. dr0) then
  fpot=phi_s*((dist2/4.d0/dq3-dqbar2/dq)+
  1 dq*dq12*dq12*(dqbar2/dist2-0.25d0/dq/dq))
else
  dc22=phi_s*((dr0*dr0/4.d0/dq3-dqbar2/dq)+
  1 dq*dq12*dq12*(dqbar2/dr0/dr0-0.25d0/dq/dq))
  fpot=dc22*(dist-ds2s)/(dr0-ds2s)
end if
end if
c
dist3=dist*dist*dist/ds2s/ds2s/ds2s !Soft-core (r^-36)
dist12=dist3*dist3*dist3*dist3
dist36=dist12*dist12*dist12
dr37=dist36*dist/ds2s
fcore=24.d0/dr37
c
ftot=fpot+fcore
c
dfx(ip)=dfx(ip)+ftot*ddx/dist
dfy(ip)=dfy(ip)+ftot*ddy/dist
dfz(ip)=dfz(ip)+ftot*ddz/dist + F_ext
dfx(jj)=dfx(jj)-ftot*ddx/dist
dfy(jj)=dfy(jj)-ftot*ddy/dist
dfz(jj)=dfz(jj)-ftot*ddz/dist+ F_ext
end if
c
352 continue
end if
c
c write (*,*) ip,nlist,nmax0
342 continue
return
end
c -----
c M.R.U.A. Every particle moves according to eqs. of motion.
c -----

subroutine motion
implicit real*8(a-h,p-z)

```



```

c
integer*2 lista(1000,0:100)
common /neighb/ boxl,dcorte,lista,ilista
common /data/ t , tfin, dtp
common /F_externa/ F_ext
common /pos/ x(1000),y(1000),z(1000),vx(1000),
1 vy(1000),vz(1000),R(1000),nmax0
c
dimension dfx(1000),dfy(1000),dfz(1000)
c
boxh=boxl/2.d0
dpi=dacos(-1.d0)
Z_max = 0d0 ! Se inicializa al principio de cada mov
c
call forces(dfx,dfy,dfz)
do 250 i=1,nmax0
imag = z(i) ! para imponer la restriccion en la base.
if (imag .gt. (-boxh + 1.0)) then
x(i)=x(i)+vx(i)*dtp+dfx(i)/2.d0*dtp*dtp
y(i)=y(i)+vy(i)*dtp+dfy(i)/2.d0*dtp*dtp
z(i)=z(i)+vz(i)*dtp+dfz(i)/2.d0*dtp*dtp
x(i)=x(i)-int(x(i)/boxh)*boxl
y(i)=y(i)-int(y(i)/boxh)*boxl
c z(i)=z(i)-int(z(i)/boxh)*boxl ! NO PERMITE LA IMAGEN EN Z
c
vx(i)=vx(i)+dfx(i)/2.d0*dtp
vy(i)=vy(i)+dfy(i)/2.d0*dtp
vz(i)=vz(i)+dfz(i)/2.d0*dtp
end if
250 continue
c
call forces(dfx,dfy,dfz)
do 252 i=1,nmax0
imag = z(i) ! para imponer la restriccion en la base.
if (imag .gt. (-boxh + 1.0)) then
vx(i)=vx(i)+dfx(i)/2.d0*dtp
vy(i)=vy(i)+dfy(i)/2.d0*dtp
vz(i)=vz(i)+dfz(i)/2.d0*dtp

```



```

end if
252 continue
t=t+ntp
return
end
c -----
c Mantener la temperatura constante
c -----
subroutine thermostat
implicit real*8 (a-h,p-z)
c
integer*2 lista(1000,0:100)
common /data/ t, tfin, ntp
common /pos/ x(1000),y(1000),z(1000),vx(1000),
1 vy(1000),vz(1000),R(1000),nmax0
real*4 r1,r2,r3
c
vxcm=0.d0
vycm=0.d0
vzcm=0.d0
do i=1,nmax0
vxcm=vxcm+vx(i)
vycm=vycm+vy(i)
vzcm=vzcm+vz(i)
end do
c write (*,*) vxcm/nmax0,vycm/nmax0,vzcm/nmax0
c
do i=1,nmax0
vx(i)=vx(i)-vxcm/nmax0
vy(i)=vy(i)-vycm/nmax0
vz(i)=vz(i)-vzcm/nmax0
end do
c
dpi=dacos(-1.d0)
dtemp=0.d0
do i=1,nmax0
dtemp=dtemp+vx(i)*vx(i)+vy(i)*vy(i)+vz(i)*vz(i)
end do

```



```

dtemp=1.d0/3.d0*dtemp/nmax0
dtemp0=4.d0/3.d0
dcoef=dtemp/dtemp0
sigma=dsqrt(dcoef)
c
do 375 i=1,nmax0
vx(i)=vx(i)/sigma
vy(i)=vy(i)/sigma
vz(i)=vz(i)/sigma
375 continue
c
return
end
c
c -----
c Creacion Posicion intermedia
c -----
subroutine save_pos
implicit real*8 (a-h,p-z)
integer*2 lista(1000,0:100)
common /neighb/ boxl,dcorte,lista,ilista
common /data/ t, tfin, dtp
common /pos/ x(1000),y(1000),z(1000),vx(1000),
1 vy(1000),vz(1000),R(1000),nmax0
open (22,file='position.dat',status='unknown')
c
write (22,*) t,boxl
do 750 i=1,nmax0
write (22,'(7(F11.6))') x(i),y(i),z(i),vx(i),vy(i),vz(i),R(i)
750 continue
close (22)
c
return
end
c

```



## 7. 2. CÓDIGO PARA LAS SIMULACIONES EN ELEMENTOS FINITOS.

### 7. 2. 1. SIMULACIÓN PARA EL MODELO DE 1000 NODOS.

Se genera dos macros para los modelos de 1000 nodos, cuyo código es:

- m1000\_p\_080\_01\_Link180.mac → para el bucle de  $F = -0.01$  a  $F = -0.25$ .

#### MACRO: m1000\_p\_080\_01\_Link180.mac

```
!macro para lanzar automaticamente
!      modelo 1000 nodos
!
! *use,m1000_p_080_01_Link180.mac,arg1,arg2,arg3,arg4
! arg2 =arg4, debe de tener el mismo valor.

! *use,m1000_p_080_01_Link180.mac,1.5E+4,0.01,0.25

! arg1 = E del material 1
! arg2 = Fuerza exterior inicial
! arg3 = fuerza exterior final
! arg4 = incremento de cada fuerza.
! ejem:  *do,ii,arg2,arg3,arg4
!
!/PREP7
!edele,all,all
!ndelet,all,all
!/input, coordenadas_finales_%jj-1%,dat
!
!
!

finish
/clear

/COM,
/COM,Preferences for GUI filtering have been set to display:
/COM,  Structural   ; Tipo de análisis a realizar

/output, output_modelo_1000nodos,dat
arg4 =arg2

! Modulo de Preproceso

/nerr,50,1000000      ! Limits the number of warning and error messages
displayed.
/ Prep7
```



```

/nopr                ! comando para que no imprima en el fichero de
salida
/PREP7

!LECTURA DE FICHEROS CON LAS COORDENADAS DE LOS NODOS.
/input, n_pos-080-01-F0.0_position_ansys,dat,,0,

/gopr                !comando para que empiece a imprimir en el fichero
de salida

!/Noor              !muestre en ventana de output, se cierrar con/gopr
alfinal            de la macro

! Para poner el fondo blanco.

/RGB,INDEX,100,100,100, 0
/RGB,INDEX, 80, 80, 80,13
/RGB,INDEX, 60, 60, 60,14
/RGB,INDEX, 0, 0, 0,15
/REPLOT
/COLOR,PBAK,OFF
/REPLOT

! Para q ponga el logo en texto, wp y wjw parta inferior izq.
/PLOPTS,LOGO,0
/PLOPTS,WINS,1
/PLOPTS,WP,1
/PLOPTS,DATE,2
/TRIAD,LBOT

/replot
!TITULO DEL ANALISIS.
/title,MODELO 1000 nodos
/units,si                ! las unidades son: (m,kg,s,K)

!propiedades, materiales elasticamente isotropicos

TUNIF,298,                ! temp uniforme y derefe, en kelvin: 273 +
25 = 298
TREF,298,

mat,1                    ! E = 1e5
mat,2                    ! E = 1e12
MPTEMP,,,,,,,,
MPTEMP,1,0
MPDATA,EX,1,,arg1
MPDATA,PRXY,1,,0.33
MPTEMP,,,,,,,,
MPTEMP,1,0
MPDATA,EX,2,,1e12

```



```

MPDATA,PRXY,2,,0.33

! Se introduce el tamaño del elemntno y se malla, con link10
allsel,all,all
ET,1,LINK180           ! Seleccion del tipo de elemento
KEYOPT,1,2,0          ! K2 = cross section scaling: 0 = func os
stretch
KEYOPT,1,10,0         ! K10 = Definir la tension inicial: No
USTRES routn
!*
R,1,0.001,0,         ! seccion : 0.001 y masa = 0

!Mallo las lineas generadas
allsel,all,all
esize,,1             !Se genera un elemento por cada linea

/nopr
!creo los elementos
/prep7
*do, b, 1, 999, 1
!/gopr               !Reactivates suppressed printout.
!bb=b               !para comprobar
*do, k, b+1, 1000, 1
!/gopr
!bb = b
!ii=i               !para comprobar
    a= distnd(b,k)
    *if, a, gt,(1+1+0.2), then      !a>2.2
        !edele,all,all
    !*endif
    *elseif, a, gt, (1+ 1),then      !a>2
        mat,1
        e, b, k,      ! creo la linea
    *else, a, le, (1+1), then      !a<=2
        mat,2
        e,b,k,
    *endif
*enddo
*enddo
/gopr

allsel,all,all

!condicion de contorno, lo empotro. los 3 gdl. 413 nodos en total
allsel,all,all
nsel,,loc,z,-12,-8      ! 132 nodos
nplot
nsel,a,loc,x, 9,11
nplot
nsel,a,loc,y, 9,11

```



```

nplot
nset,a,loc,x, -9, -11
nplot
nset,a,loc,y, -9,-11
nplot

cm,basel,node          !restricciones en la base. 79 nodos
cmplot
D,BASE1, ,0, , , ,ALL, , , , ,

! -----

*get,kk,elem, ,count
! Se generan 13 elementos link180, modelo basico
! Parametros q ayudan a la convergencia
shpp,off              ! no tiene en cuenta la forma del nodo
MODMSH,NOCHECK

allsel,all,all
/title, m_1000nodos_L180_F_0
!TITULO DEL ANALISIS.

allsel,all,all        ! Selects all entities
finish                ! Exits normally from a processor
/filename,file        ! Changes the Jobname for the analysis for
"caso25R".
/solu                 ! Enters the solution processor.
    fdele,all,all

    antype,static      ! Specifies the analysis type: in this case
is Static
    nropt,unsym        ! Specifies the Newton-Raphson options with
                        ! unsymmetric matrices of elements
    _OMGSQRD=1         ! Divide the square velocity in each load
step
    SOLCONTROL,1,0     ! Activates optimized for a set of commands
                        ! applicable to nonlinear solutions
                        ! and Time step predictions not based on
                        ! contact status or nonlinear element
                        ! status
    EQSLV, SPARSE,1E-8 ! The type of equation solver is Sparse
                        ! direct with a tolerance of 1e-8.
    NLGEOM, 0          ! Includes large-deflection effects in a
static

```



```

SSTIF,1                ! Stress stiffening is included in a
                        nonlinear analysis
NSUBST, 1, 1, 1,      ! Specifies the number of substeps to be
                        taken this load step
CNVTOL,F, 1e-11, 1.0E-03, 2, 0.0E+00    ! Force convergence values
for !nonlinear analyses is 20000 with a tolerance of 0.001, L2 norm
(check SRSS value) !and 0 reference value.
neqit,500
save,m_1000nodos_L180_F_0,db,,model      ! Save the model data as
caso%i%.db !(solid model, finite element model, loadings,..no results)
solve                                     ! Starts a solution.
finish                                    ! Exits normally from a
processor
/aux3                                     ! Enters the results file editing
processor
/COPY,file,'rst','',m_1000nodos_L180_F_0,'rst','' ! Copies
file.rst to caso2.rst

!-----
! 0.rst
!-----
!finish
!/CLEAR
!resume,m_1000nodos_L180_F_0,db

/post1
/file,m_1000nodos_L180_F_0,rst
set,list
set,last
/eface,1
!rsys,11
plnsol,u,y,0,1,0

!prnsol,u,y

!Posicion inicial
*get,nnode,node,,num,max ! get number of nodes
*dim,x,,nnode            ! set up arrays for node locations
*dim,y,,nnode
*dim,z,,nnode

!Desplazamientos
*dim,uux,,nnode         ! set up arrays for node locations
*dim,uuy,,nnode
*dim,uuz,,nnode
*dim,resul_z_ini,,nnode

!capturo los valores que quiero.
*vget,x(1),node,,loc,x  ! get coordinates
*vget,y(1),node,,loc,y
*vget,z(1),node,,loc,z
*vget,uux(1),node,,u,x  ! get coordinates

```



```

*vget,uuy(1),node,,u,y
*vget,uuz(1),node,,u,z

*vget,resul_z_ini(1),node,,loc,y

!Posicion final
*dim,resul_x,,nnode,
*dim,resul_y,,nnode,
*dim,resul_z,,nnode,

      *do,i,1,nnode,1,      ! store new positions
        resul_x(i)= x(i) + uux(i)
        resul_y(i)= y(i) + uuy(i)
        resul_z(i)= z(i) + uuz(i)
      *enddo

! WRITE COORDINATES
*CFOPEN,coordenadas_finales_0,dat
*VWRITE,SEQU,resul_x(1), resul_y(1), resul_z(1),
(' n','F7.0 ',' ','F20.11',' ','F20.11',' ','F20.11')
*CFCLOSE

!The next case is aumentando la fuerza y generar el modelo.

!FINISH
!/CLEAR

kkk = arg3/arg4                ! numero de casos que se aplicaran las
fuerzas

*do,ii,arg2,arg3,arg4

/PREP7

jj=ii/arg4 !pillar el entero

edele,all,all
ndelete,all,all

/nopr
/input, coordenadas_finales_%jj-1%,dat
/gopr
!propiedades, materiales elasticamente isotropicos

TUNIF,298,                    ! temp uniforme y derefe, en kelvin: 273 +
25 = 298
TREF,298,

mat,1                          ! E = 1e5
mat,2                          ! E = 1e12

```



```

MPTEMP,,,,,,,,
MPTEMP,1,0
MPDATA,EX,1,,arg1
MPDATA,PRXY,1,,0.33
MPTEMP,,,,,,,,
MPTEMP,1,0
MPDATA,EX,2,,1e12
MPDATA,PRXY,2,,0.33

! Se introduce el tamaño del elemento y se malla, con link10
allsel,all,all
ET,1,LINK180           ! Seleccion del tipo de elemento
KEYOPT,1,2,0          ! K2 = cross section scaling: 0 = func os
stretch
KEYOPT,1,10,0         ! K10 = Definir la tension inicial: No
USTRES routn
!*
R,1,0.001,0,          ! seccion : 0.001 y masa = 0
esize,,1             !Se genera un elemento por cada linea

!condicion de contorno, lo empotro. los 3 gdl. 413 nodos en total
allsel,all,all
nsel,,loc,z,-12,-8    ! 132 nodos
nplot
nsel,a,loc,x, 9,11
nplot
nsel,a,loc,y, 9,11
nplot
nsel,a,loc,x, -9, -11
nplot
nsel,a,loc,y, -9,-11
nplot

cm,basel,node        !restricciones en la base. 79 nodos
cmplot
D,BASE1, ,0, , , ,ALL, , , , ,

!creo los elementos
/prep7
allsel,all,all

/nopr
*do, b, 1, 999, 1
!/gopr               !Reactivates suppressed printout.
                    !para comprobar
                    !bb=b
                    *do, k, b+1, 1000, 1
                    !/gopr
                    !bb = b

```



```

!ii=i                                !para comprobar
a= distnd(b,k)
  *if, a, gt,(1+1+0.2), then           !a>2.2
    !edele,all,all
  !*endif
  *elseif, a, gt, (1+ 1),then         !a>2
    mat,1
    e, b, k,      ! creo la linea
  *else, a, le, (1+1), then           !a<=2
    mat,2
    e,b,k,
  *endif
*enddo
*enddo

/gopr

*get,ee,elem,,count

allsel,all,all
NUMCMP,ELEM                                !comprimo los elementos sea desde 1.

*get,ee,elem,,count
! Parametros q ayudan a la convergencia
shpp,off                                    ! no tiene en cuenta la forma del nodo
MODMSH,NOCHECK

allsel,all,all
/title, m_1000nodos_L180_F_%ii%
!TITULO DEL ANALISIS.

allsel,all,all                                ! Selects all entities
!finish                                       ! Exits normally from a processor
!/filename,file                               ! Changes the Jobname for the analysis for
"caso25R".
/solu                                         ! Enters the solution processor.
!aplicacion de la fuerza
fdele,all,all

cmsel,,base1
cmplot
nsel,inve
nplot
f,all,fz,-%ii%,                                ! incremento 30 N
allsel,all,all

antype,static                                ! Specifies the analysis type: in this case
is Static

```



```

nropt,unsym          ! Specifies the Newton-Raphson options with
                    ! unsymmetric matrices of elements
_OMGSQRD=1          ! Divide the square velocity in each load
step
SOLCONTROL,1,0      ! Activates optimized for a set of
                    ! commands !applicable to nonlinear solutions and Time step predictions not
                    ! based on contact !status or nonlinear element status
EQSLV, SPARSE,1E-8  ! The type of equation solver is Sparse
                    ! direct with a tolerance of 1e-8.
NLGEOM, 0           ! Includes large-deflection effects in a
static
SSTIF,1             ! Stress stiffening is included in a
                    ! nonlinear analysis
NSUBST, 1, 1, 1,    ! Specifies the number of substeps to be
                    ! taken this load step
CNVTOL,F, 1e-2*ii, 1.0E-03, 2, 0.0E+00 ! Force convergence values
                    ! for nonlinear analyses is 20000 with a tolerance of 0.001, L2 norm (check
                    ! SRSS value) and 0 reference value.

neqit,500
save,m_1000nodos_L180_F_%jj%,db,,model ! Save the model data as
                    ! caso%i%.db !(solid model, finite element model, loadings,...no results)
solve               ! Starts a solution.
finish             ! Exits normally from a processor
/aux3              ! Enters the results file editing
processor
/COPY,file,'rst','',m_1000nodos_L180_F_%jj%,'rst','' ! Copies
                    ! file.rst to caso2.rst

!-----
! ii.rst
!-----
!finish
!/CLEAR
!resume,m_1000nodos_L180_F_%jj%,db

/post1
file,m_1000nodos_L180_F_%jj%,rst
set,list
set,last
/eface,1
!rsys,11
!plnsol,u,y,0,1,0

!prnsol,u,y

!Posicion inicial
*get,nnode,node,,num,max ! get number of nodes

```



```

*dim,x,,nnode          ! set up arrays for node locations
*dim,y,,nnode
*dim,z,,nnode

!Desplazamientos
*dim,uux,,nnode        ! set up arrays for node locations
*dim,uuy,,nnode
*dim,uuz,,nnode

!capturo los valores que quiero.
*vget,x(1),node,,loc,x ! get coordinates
*vget,y(1),node,,loc,y
*vget,z(1),node,,loc,z
*vget,uux(1),node,,u,x ! get coordinates
*vget,uuy(1),node,,u,y
*vget,uuz(1),node,,u,z

!Posicion final
*dim,resul_x,,nnode,
*dim,resul_y,,nnode,
*dim,resul_z,,nnode,

      *do,i,1,nnode,1,      ! store new positions
          resul_x(i)= x(i) + uux(i)
          resul_y(i)= y(i) + uuy(i)
          resul_z(i)= z(i) + uuz(i)
      *enddo

! WRITE COORDINATES
*CFOPEN,coordenadas_finales_%jj%,dat
*VWRITE,SEQU,resul_x(1), resul_y(1), resul_z(1),
(' n','F7.0 ',' ', 'F20.11',' ', 'F20.11',' ', 'F20.11')

*CFCLOSE
*enddo

*CFOPEN,fuerza_desplaz,dat
!*VWRITE,SEQU,F_ext(1),uuz_11(1),
*VWRITE,SEQU,F_ext(1),uuz_556(1),
(F7.0 ,F20.11 ,F20.11)
*CFCLOSE

/eof

```



## 7. 2. 2. SIMULACIÓN PARA EL MODELO 9000 NODOS.

Para la macro del modelo de 9000 nodos de fuerza continua, se utilizan dos macros.

- m3x3\_p\_080\_01\_Link180.mac → para el bucle de  $F = -0.01$  a  $F = -0.25$
- m3x3\_p\_080\_01\_Link180\_continuacion.mac → Cuando no converge algun caso se continua con esta macro..

### MACRO: m3x3 p\_080\_01\_Link180.mac

```
!macro para lanzar automaticamente
!   modelo 1000 nodos
!
! *use,m1000_p_080_01_Link180.mac, arg1, arg2, arg3, arg4
! arg2 =arg4, debe de tener el mismo valor.

! *use,m3x3_p_080_01_Link180.mac, 2.5E+4, 0.01, 0.25

! arg1 = E del material 1
! arg2 = Fuerza exterior inicial
! arg3 = fuerza exterior final
! arg4 = incremento de cada fuerza.
! ejem: *do, ii, arg2, arg3, arg4
!
! /PREP7
! edele, all, all
! ndelel, all, all
! /input, coordenadas_finales_%jj-1%, dat
!
!
!

finish
/clear

/COM,
/COM, Preferences for GUI filtering have been set to display:
/COM, Structural ; Tipo de análisis a realizar

/output, output_modelo_3x3, dat
arg4 =arg2

! Modulo de Preproceso
```



```

/nerr,50,1000000          ! Limits the number of warning and error
messages displayed.
/ Prep7

/nopr                    ! comando para que no imprima en el fichero
de salida
/PREP7

!LECTURA DE FICHEROS CON LAS COORDENADAS DE LOS NODOS.
/input, n_pos-080-01-F0.0_position_ansys,dat,,0,

/gopr                    ! comando para que empiece a imprimir en el
fichero de salida

!/nopr      !muestre en ventana de output, se cierrar con/gopr alfinal de
la macro

! Para poner el fondo blanco.

/RGB,INDEX,100,100,100, 0
/RGB,INDEX, 80, 80, 80,13
/RGB,INDEX, 60, 60, 60,14
/RGB,INDEX, 0, 0, 0,15
/REPLOT
/COLOR,PBAK,OFF
/REPLOT

! Para q ponga el logo en texto, wp y wjw parta inferior izq.
/PLOPTS,LOGO,0
/PLOPTS,WINS,1
/PLOPTS,WP,1
/PLOPTS,DATE,2
/TRIAD,LBOT

/replot
!TITULO DEL ANALISIS.
/title, BASE 3x3
/units,si          ! las unidades son: (m,kg,s,K)

!propiedades, materiales elasticamente isotropicos

TUNIF,298,          ! temp uniforme y derefe, en kelvin: 273 +
25 = 298
TREF,298,

```



```

mat,1                      ! E = 1e5
mat,2                      ! E = 1e12
MPTEMP,,,,,,,,
MPTEMP,1,0
MPDATA,EX,1,,arg1
MPDATA,PRXY,1,,0.33
MPTEMP,,,,,,,,
MPTEMP,1,0
MPDATA,EX,2,,1e12
MPDATA,PRXY,2,,0.33

! Se introduce el tamaño del elemntno y se malla, con link10
allsel,all,all
ET,1,LINK180              ! Selección del tipo de elemento
KEYOPT,1,2,0              ! K2 = cross section scaling: 0 = func os
stretch
KEYOPT,1,10,0             ! K10 = Definir la tension inicial: No
USTRES routn
!*
R,1,0.001,0,              ! seccion : 0.001 y masa = 0

!-----

/nopr                      ! comando para que no imprima en el fichero
de salida
! Se genera el modelo 3x3

*get,nnode,node,,num,max ! get number of nodes
*dim,x,,nnode ! set up arrays for node locations
*dim,y,,nnode
*dim,z,,nnode
*dim,sel,,nnode ! set up array for select vector
*vget,x(1),node,1,loc,x ! get coordinates
*vget,y(1),node,1,loc,y
*vget,z(1),node,1,loc,z
*vget,sel(1),node,1,n sel ! get selected set
*do,tt,-21.950782,-21.950782,0 !cuadrícula 1
  !*voper,x(1),x(1),add,tt ! offset locations
  *do,i,1,nnode ! store new positions
  *if,sel(i),gt,0,then ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
      n,2000+i,x(i)+tt,y(i),z(i)
  *endif
  *enddo
*enddo

*do,tt,-21.950782,-21.950782,0 !cuadrícula 3
  !*voper,x(1),x(1),add,tt ! offset locations
  *do,i,1,nnode ! store new positions

```



```

        *if,sel(i),gt,0,then ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
        n,1000+i,x(i)+tt,y(i)+ tt,z(i)
        *endif
        *enddo
*enddo

*do,tt,-21.950782,-21.950782,0          !cuadrícula 2
    !*voper,x(1),x(1),add,tt ! offset locations
    *do,i,1,nnode ! store new positions
    *if,sel(i),gt,0,then ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
        n,4000+i,x(i),y(i)+tt,z(i)
        *endif
        *enddo
*enddo

*do,tt,21.950782,21.950782,0          !cuadrícula 4
    !*voper,x(1),x(1),add,tt ! offset locations
    *do,i,1,nnode ! store new positions
    *if,sel(i),gt,0,then ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
        n,6000+i,x(i),y(i)+tt,z(i)
        *endif
        *enddo
*enddo

*do,tt,21.950782,21.950782,0          !cuadrícula 8
    !*voper,x(1),x(1),add,tt ! offset locations
    *do,i,1,nnode ! store new positions
    *if,sel(i),gt,0,then ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
        n,9000+i,x(i)+tt,y(i)+tt,z(i)
        *endif
        *enddo
*enddo

*do,tt,21.950782,21.950782,0          !cuadrícula 6
    !*voper,x(1),x(1),add,tt ! offset locations
    *do,i,1,nnode ! store new positions
    *if,sel(i),gt,0,then ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
        n,8000+i,x(i)+tt,y(i),z(i)
        *endif
        *enddo
*enddo
```



```

*do,tt,21.950782,21.950782,0          !cuadrícula 5
  !*voper,x(1),x(1),add,tt ! offset locations
  *do,i,1,nnode ! store new positions
  *if,sel(i),gt,0,then ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
      n,3000+i,x(i)-tt,y(i)+tt,z(i)
  *endif
  *enddo
*enddo

*do,tt,21.950782,21.950782,0          !cuadrícula 7
  !*voper,x(1),x(1),add,tt          ! offset locations
  *do,i,1,nnode          ! store new positions
  *if,sel(i),gt,0,then          ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
      n,7000+i,x(i)+tt,y(i)-tt,z(i)
  *endif
  *enddo
*enddo

/gopr

allsel,all,all
nselect,1,1000
nplot
cm,base,node
*get,rr,node,,count

!se copia los nodos con la enumeración a partir del 5001
NGEN,2,5000,all,,1,
*get,rr,node,,count

nselect,1,1000
nplot
ndelete,all
nplot
nselect,5001,6000
cm,base,node
cmplot

!comprimo los nodos
NUMCMP,NODE
allsel,all,all
nplot

NUMMRG,NODE,,1,,LOW ! Mergo los nodos que están en el mismo sitio.
NUMCMP,NODE          ! Se renumeran los nodos: tiene q haber 32 nodos

```



```

NUMSTR,ELEM,1,          ! se generan elem a partir de 1

!-----

!Mallo las lineas generadas
allsel,all,all
esize,,1              !Se genera un elemento por cada linea

/nopr
!creo los elementos
/prep7
*do, b, 1, 8999, 1
!/gopr                !Reactivates suppressed printout.
    !bb=b              !para comprobar
    *do, k, b+1, 9000, 1
    !/gopr
    !bb = b
    !ii=i              !para comprobar
        a= distnd(b,k)
        *if, a, gt,(1+1+0.2), then      !a>2.2
            !edele,all,all
            !*endif
        *elseif, a, gt, (1+ 1),then      !a>2
            mat,1
            e, b, k,      ! creo la linea
        *else, a, le, (1+1), then      !a<=2
            mat,2
            e,b,k,
        *endif
    *enddo
*enddo
/gopr

!*get,ee,elem,,count

allsel,all,all

!condicion de contorno, lo empotro. los 3 gdl. 413 nodos en total
!base es un cubo de lado 21,950782
allsel,all,all
nsel,,loc,z,-12,-8
nplot
nsel,a,loc,x,31,33
nplot
nsel,a,loc,y,31,33
nplot
nsel,a,loc,x,-31,-33
nplot

```



nselect,a,loc,y, -31,-33

nplot

cm,basel,node !restricciones en la base. 79 nodos  
 cmplot  
 D,BASE1, ,0, , , ,ALL, , , , ,

allsel,all,all

! -----

\*get,kk,elem,,count  
 ! Se generan 13 elementos link180, modelo basico  
 ! Parametros q ayudan a la convergencia  
 shpp,off ! no tiene en cuenta la forma del nodo  
 MODMSH,NOCHECK

allsel,all,all  
 /title, m3x3\_L180\_F\_0  
 !TITULO DEL ANALISIS.

allsel,all,all ! Selects all entities  
 finish ! Exits normally from a processor  
 /filename,file ! Changes the Jobname for the analysis  
 for "caso25R".  
 /solu ! Enters the solution processor.  
 fdelete,all,all

antype,static ! Specifies the analysis type: in this case is  
 Static  
 nropt,unsym ! Specifies the Newton-Raphson options with  
 unsymmetric matrices of elements  
 \_OMGSQRD=1 ! Divide the square velocity in each load  
 step  
 SOLCONTROL,1,0 ! Activates optimized for a set of commands  
 !applicable to nonlinear solutions and Time step predictions not based on  
 contact !status or nonlinear element status  
 EQSLV, SPARSE,1E-8 ! The type of equation solver is Sparse direct  
 with a tolerance of 1e-8.  
 NLGEOM, 0 ! Includes large-deflection effects in a  
 static  
 SSTIF,1 ! Stress stiffening is included in a nonlinear  
 analysis



```

        NSUBST, 1, 1, 1,      ! Specifies the number of substeps to be taken
                               this load step
        CNVTOL,F, 20e+3, 1.0E-03, 2, 0.0E+00      ! Force convergence values
for nonlinear analyses is 20000 with a tolerance of 0.001, L2 norm (check
SRSS value) and 0 reference value.

        ! neqit,500
        save,m3x3_L180_F_0,db,,model      ! Save the model data as
caso%i%.db (solid model, finite element model, loadings,...no results)
        solve      ! Starts a solution.
        finish      ! Exits normally from a processor
        /aux3      ! Enters the results file editing
processor
        /COPY,file,'rst','',m3x3_L180_F_0,'rst',''      ! Copies file.rst
                                                    to caso2.rst

!-----
! 0.rst
!-----
!finish
!/CLEAR
!resume,m3x3_L180_F_0,db

/post1
/file,m3x3_L180_F_0,rst
set,list
set,last
/eface,1
plnsol,u,z,0,1,0

!Posicion inicial
*get,nnode,node,,num,max ! get number of nodes
*dim,x,,nnode ! set up arrays for node locations
*dim,y,,nnode
*dim,z,,nnode

!Desplazamientos
*dim,uux,,nnode ! set up arrays for node locations
*dim,uuy,,nnode
*dim,uuz,,nnode
*dim,resul_z_ini,,nnode

!capturo los valores que quiero.
*vget,x(1),node,,loc,x ! get coordinates
*vget,y(1),node,,loc,y
*vget,z(1),node,,loc,z
*vget,uux(1),node,,u,x ! get coordinates
*vget,uuy(1),node,,u,y

```



```

*vget,uuz(1),node,,u,z

*vget,resul_z_ini(1),node,,loc,z

!Posicion final
*dim,resul_x,,nnode,
*dim,resul_y,,nnode,
*dim,resul_z,,nnode,

      *do,i,1,nnode,1,      ! store new positions
        resul_x(i)= x(i) + uux(i)
        resul_y(i)= y(i) + uuy(i)
        resul_z(i)= z(i) + uuz(i)
      *enddo

! WRITE COORDINATES
*CFOPEN,coordenadas_finales_0,dat
*vWRITE,SEQU,resul_x(1), resul_y(1), resul_z(1),
(' n','F7.0 ',' ','F20.11',' ','F20.11',' ','F20.11')
*CFCLOSE

!The next case is aumentando la fuerza y generar el modelo.

!FINISH
!/CLEAR

kkk = arg3/arg4      ! numero de casos que se aplicaran las fuerzas

*dim,F_ext,,kkk
*dim,uuz_556,,kkk

*do,ii,arg2,arg3,arg4

/PREP7

jj=ii/arg4 !pillar el entero

edele,all,all
ndelete,all,all

/nopr
/input, coordenadas_finales_%jj-1%,dat

```



```

/gopr

!propiedades, materiales elasticamente isotropicos

TUNIF,298,                ! temp uniforme y derefe, en kelvin: 273 +
25 = 298
TREF,298,

mat,1                     ! arg1--> E = 1e5
mat,2                     ! E = 1e12
MPTEMP,,,,,,,,
MPTEMP,1,0
MPDATA,EX,1,,arg1
MPDATA,PRXY,1,,0.33
MPTEMP,,,,,,,,
MPTEMP,1,0
MPDATA,EX,2,,1e12
MPDATA,PRXY,2,,0.33

! Se introduce el tamaño del elemntno y se malla, con link10
allsel,all,all
ET,1,LINK180             ! Seleccin del tipo de elemento
KEYOPT,1,2,0            ! K2 = cross section scaling: 0 = func os
stretch
KEYOPT,1,10,0           ! K10 = Definir la tension inicial: No
USTRES routn
!*
R,1,0.001,0,            ! seccion : 0.001 y masa = 0
esize,,1               !Se genera un elemento por cada linea

!creo los elementos
/prep7
allsel,all,all

/nopr
*do, b, 1, 8999, 1
!/gopr                  !Reactivates suppressed printout.
    !bb=b               !para comprobar
    *do, k, b+1, 9000, 1
    !/gopr
    !bb = b
    !ii=i               !para comprobar
        a= distnd(b,k)
            *if, a, gt,(1+1+0.2), then           !a>2.2

```



```

                !edele,all,all
            !*endif
        *elseif, a, gt, (1+ 1),then                !a>2
            mat,1
            e, b, k,                ! creo la linea
        *else, a, le, (1+1), then                !a<=2
            mat,2
            e,b,k,
        *endif
    *enddo
*enddo

/gopr

*get,ee,elem,,count

allsel,all,all

!condicion de contorno, lo empotro. los 3 gdl. 413 nodos en total
!base es un cubo de lado 21,950782
allsel,all,all
nsel,,loc,z,-12,-8
nplot
nsel,a,loc,x,31,33
nplot
nsel,a,loc,y,31,33
nplot
nsel,a,loc,x,-31,-33
nplot
nsel,a,loc,y, -31,-33
nplot

cm,basel,node                !restricciones en la base. 79 nodos
cmplot
D,BASE1, ,0, , , ,ALL, , , ,

! Parametros q ayudan a la convergencia
shpp,off                ! no tiene en cuenta la forma del nodo
MODMSH,NOCHECK

allsel,all,all
/title, m3x3_L180_F %ii%
!TITULO DEL ANALISIS.

allsel,all,all                ! Selects all entities

```



```

!finish                                ! Exits normally from a processor
!/filename,file                         ! Changes the Jobname for the analysis for
"caso25R".
/solu                                    ! Enters the solution processor.
    !aplicacion de la fuerza
    fdele,all,all

    cmsel,,base1
    cmplot
    nsel,inve
    nplot
    f,all,fz,-%ii%,                      ! incremento 30 N
    allsel,all,all

    antype,static                        ! Specifies the analysis type: in this case
is Static
    nropt,unsym                          ! Specifies the Newton-Raphson options with
!unsymmetric matrices of elements
    _OMGSQRD=1                            ! Divide the square velocity in each load
step
    SOLCONTROL,1,0                       ! Activates optimized for a set of commands
!applicable to nonlinear solutions and Time step predictions not based on
contact !status or nonlinear element status
    EQSLV, SPARSE,1E-8                   ! The type of equation solver is Sparse
direct with a !tolerance of 1e-8.
    NLGEOM, 0                            ! Includes large-deflection effects in a
static
    SSTIF,1                              ! Stress stiffening is included in a nonlinear
analysis
    NSUBST, 1, 1, 1,                    ! Specifies the number of substeps to be taken
this load step
    CNVTOL,F, 20e+1*ii, 1.0E-03, 2, 0.0E+00 ! Force convergence values
for !nonlinear analyses is 20000 with a tolerance of 0.001, L2 norm (check
SRSS value) !and 0 reference value.

!    neqit,500
    save,m3x3_L180_F_%jj%,db,,model      ! Save the model data as
caso%i%.db (solid model, finite element model, loadings,...no results)
    solve                                 ! Starts a solution.
    finish                                 ! Exits normally from a
processor
    /aux3                                  ! Enters the results file
editing processor
    /COPY,file,'rst','',m3x3_L180_F_%jj%,'rst','' ! Copies
file.rst to caso2.rst

```

```

!-----
! ii.rst
!-----

```



```

!finish
!/CLEAR
!resume,m_1000nodos_L180_F_%jj%,db

/post1
file,m3x3_L180_F_%jj%,rst
set,list
set,last
/eface,1
!rsys,11
!plnsol,u,z,0,1,0

!prnsol,u,z

!Posicion inicial
*get,node,node,,num,max ! get number of nodes
*dim,x,,nnode           ! set up arrays for node locations
*dim,y,,nnode
*dim,z,,nnode

!Desplazamientos
*dim,uux,,nnode         ! set up arrays for node locations
*dim,uuy,,nnode
*dim,uuz,,nnode

!capturo los valores que quiero.
*vget,x(1),node,,loc,x ! get coordinates
*vget,y(1),node,,loc,y
*vget,z(1),node,,loc,z
*vget,uux(1),node,,u,x ! get coordinates
*vget,uuy(1),node,,u,y
*vget,uuz(1),node,,u,z

!Posicion final
*dim,resul_x,,nnode,
*dim,resul_y,,nnode,
*dim,resul_z,,nnode,

      *do,i,1,nnode,1,      ! store new positions
          resul_x(i)= x(i) + uux(i)
          resul_y(i)= y(i) + uuy(i)
          resul_z(i)= z(i) + uuz(i)
      *enddo

! WRITE COORDINATES
*CFOPEN,coordenadas_finales_%jj%,dat
*VWRITE,SEQU,resul_x(1), resul_y(1), resul_z(1),

```



```
(' n','F7.0 ',' ','F20.11',' ','F20.11',' ','F20.11')
```

```
*CFCLOSE
```

```
! generacion del plot fuerza/desplazamiento
```

```
F_ext(jj)=ii
```

```
uuz_556(jj)=resul_z(556)-resul_z_ini(556)
```

```
*enddo
```

```
*CFOPEN,fuerza_desplaz,dat
```

```
!*VWRITE,SEQU,F_ext(1),uuz_11(1),
```

```
*VWRITE,SEQU,F_ext(1),uuz_556(1),
```

```
(F7.0 ,F20.11 ,F20.11)
```

```
*CFCLOSE
```

```
/eof
```



### MACRO: m3x3 p 080 01 Link180 continuacion.mac

```

!macro para lanzar automaticamente
!      modelo 1000 nodos
!
! *use,m1000_p_080_01_Link180.mac, arg1, arg2, arg3, arg4
! arg2 =arg4, debe de tener el mismo valor.

! *use,m3x3_p_080_01_Link180_continuacion.mac,2.5E+4,0.11,0.25,0.01

! arg1 = E del material 1
! arg2 = Fuerza exterior inicial
! arg3 = fuerza exterior final
! arg4 = incremento de cada fuerza.
! ejem:  *do,ii,arg2,arg3,arg4
!
!/PREP7
!edele,all,all
!ndelet,all,all
!/input, coordenadas_finales_%jj-1%,dat
!
!
!
!1 caso en vez de F=0, se pone F = -0.06, se corre y luego se aplica el
bucle.

finish
/clear

/COM,
/COM,Preferences for GUI filtering have been set to display:
/COM, Structural ; Tipo de análisis a realizar

/prep7
!parametro del primer caso de calculo. Es una fuerza menos del bucle.
aaa = 0.1

/output, output_modelo_3x3_Caso_10,dat

! Modulo de Preproceso

/nerr,50,1000000 ! Limits the number of warning and error messages
displayed.
/ Prep7

/nopr ! comando para que no imprima en el fichero de
salida

```



```

/PREP7

!LECTURA DE FICHEROS CON LAS COORDENADAS DE LOS NODOS. 1000 nodos
/input, n_pos-080-01-F0.14_position_ansys,dat,,0,

/gopr                ! comando para que empiece a imprimir en el fichero
                    ! de salida

!/Noor              !muestre en ventana de output, se cierrar con/gopr
                    !alfinal de la macro

! Para poner el fondo blanco.

/RGB,INDEX,100,100,100, 0
/RGB,INDEX, 80, 80, 80,13
/RGB,INDEX, 60, 60, 60,14
/RGB,INDEX, 0, 0, 0,15
/REPLOT
/COLOR,PBAK,OFF
/REPLOT

! Para q ponga el logo en texto, wp y wjw parta inferior izq.
/PLOPTS,LOGO,0
/PLOPTS,WINS,1
/PLOPTS,WP,1
/PLOPTS,DATE,2
/TRIAD,LBOT

/replot
!TITULO DEL ANALISIS.
/title, Modelo 3x3, 9000 nodos F =--%aaa%
/units,si           ! las unidades son: (m,kg,s,K)

!propiedades, materiales elasticamente isotropicos

TUNIF,298,          ! temp uniforme y derefe, en kelvin: 273 + 25 = 298
TREF,298,

mat,1              ! E = 2.5e4
mat,2              ! E = 1e12
MPTEMP,,,,,,,,
MPTEMP,1,0
MPDATA,EX,1,,arg1
MPDATA,PRXY,1,,0.33
MPTEMP,,,,,,,,
MPTEMP,1,0

```



```

MPDATA,EX,2,,1e12
MPDATA,PRXY,2,,0.33

! Se introduce el tamaño del elemntno y se malla, con link10
allsel,all,all
ET,1,LINK180           ! Selección del tipo de elemento
KEYOPT,1,2,0          ! K2 = cross section scaling: 0 = func os
stretch
KEYOPT,1,10,0         ! K10 = Definir la tension inicial: No
USTRES routn
!*
R,1,0.001,0,          ! seccion : 0.001 y masa = 0

!-----

/nopr                  ! comando para que no imprima en el fichero
de salida
! Se genera el modelo 3x3

*get,nnode,node,,num,max ! get number of nodes
*dim,x,,nnode           ! set up arrays for node locations
*dim,y,,nnode
*dim,z,,nnode
*dim,sel,,nnode        ! set up array for select vector
*vget,x(1),node,1,loc,x ! get coordinates
*vget,y(1),node,1,loc,y
*vget,z(1),node,1,loc,z
*vget,sel(1),node,1,nsel ! get selected set
*do,tt,-21.950782,-21.950782,0 !cuadrícula 1
  !*voper,x(1),x(1),add,tt    ! offset locations
  *do,i,1,nnode              ! store new positions
  *if,sel(i),gt,0,then      ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
      n,2000+i,x(i)+tt,y(i),z(i)
  *endif
  *enddo
*enddo

*do,tt,-21.950782,-21.950782,0 !cuadrícula 3
  !*voper,x(1),x(1),add,tt    ! offset locations
  *do,i,1,nnode              ! store new positions
  *if,sel(i),gt,0,then      ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
      n,1000+i,x(i)+tt,y(i)+ tt,z(i)
  *endif
  *enddo
*enddo

*do,tt,-21.950782,-21.950782,0 !cuadrícula 2

```



```

      !*voper,x(1),x(1),add,tt      ! offset locations
      *do,i,1,nnode                ! store new positions
      *if,sel(i),gt,0,then         ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
      n,4000+i,x(i),y(i)+tt,z(i)
      *endif
      *enddo
*enddo

*do,tt,21.950782,21.950782,0      !cuadrícula 4
  !*voper,x(1),x(1),add,tt      ! offset locations
  *do,i,1,nnode                ! store new positions
  *if,sel(i),gt,0,then         ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
  n,6000+i,x(i),y(i)+tt,z(i)
  *endif
  *enddo
*enddo

*do,tt,21.950782,21.950782,0      !cuadrícula 8
  !*voper,x(1),x(1),add,tt      ! offset locations
  *do,i,1,nnode                ! store new positions
  *if,sel(i),gt,0,then         ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
  n,9000+i,x(i)+tt,y(i)+tt,z(i)
  *endif
  *enddo
*enddo

*do,tt,21.950782,21.950782,0      !cuadrícula 6
  !*voper,x(1),x(1),add,tt      ! offset locations
  *do,i,1,nnode                ! store new positions
  *if,sel(i),gt,0,then         ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
  n,8000+i,x(i)+tt,y(i),z(i)
  *endif
  *enddo
*enddo

*do,tt,21.950782,21.950782,0      !cuadrícula 5
  !*voper,x(1),x(1),add,tt      ! offset locations
  *do,i,1,nnode                ! store new positions
  *if,sel(i),gt,0,then         ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
  n,3000+i,x(i)-tt,y(i)+tt,z(i)
  *endif
  *enddo
*enddo

```



```

*do,tt,21.950782,21.950782,0      !cuadrícula 7
  !*voper,x(1),x(1),add,tt      ! offset locations
  *do,i,1,nnode                  ! store new positions
  *if,sel(i),gt,0,then          ! this form takes 98 sec for 100,000
nodes
      n,7000+i,x(i)+tt,y(i)-tt,z(i)
  *endif
  *enddo
*enddo

/gopr

allsel,all,all
nsel,,,,1,1000
nplot
cm,base,node
*get,rr,node,,count

!se copia los nodos con la enumeración a partir del 5001
NGEN,2,5000,all,, , , , ,1,
*get,rr,node,,count

nsel,,,,1,1000
nplot
ndelete,all
nplot
nsel,,,,5001,6000
cm,base,node
cmplot

!comprimo los nodos
NUMCMP,NODE
allsel,all,all
nplot

NUMMRG,NODE,,1, , ,LOW      ! Mergo los nodos que están en el mismo
sitio.
NUMCMP,NODE                  ! Se reenumeran los nodos: tiene q haber 32
nodos
NUMSTR,ELEM,1,              ! se generan elem a partir de 1

!-----

!Mallo las líneas generadas
allsel,all,all
esize,,1                    !Se genera un elemento por cada línea

```



```

/nopr
!creo los elementos
/prep7
*do, b, 1, 8999, 1
!/gopr
!Reactivates suppressed printout.
!bb=b
!para comprobar
*do, k, b+1, 9000, 1
!/gopr
!bb = b
!ii=i
!para comprobar
a= distnd(b,k)
*if, a, gt,(1+1+0.2), then !a>2.2
!edele,all,all
!*endif
*elseif, a, gt, (1+ 1),then !a>2
mat,1
e, b, k, ! creo la linea
*else, a, le, (1+1), then !a<=2
mat,2
e,b,k,
*endif
*enddo
*enddo
/gopr

!*get,ee,elem,,count

allsel,all,all

!condicion de contorno, lo empotro. los 3 gdl. 413 nodos en total
!base es un cubo de lado 21,950782
allsel,all,all
nsel,,loc,z,-12,-8
nplot
nsel,a,loc,x,31,33
nplot
nsel,a,loc,y,31,33
nplot
nsel,a,loc,x,-31,-33
nplot
nsel,a,loc,y, -31,-33

nplot

cm,basel,node !restricciones en la base. 79 nodos
cmplot
D,BASE1, ,0, , , ,ALL, , , , ,

```



allsel,all,all

! -----

```
*get,kk,elem,,count
! Se generan 13 elementos link180, modelo basico
! Parametros q ayudan a la convergencia
shpp,off                               ! no tiene en cuenta la forma
del nodo
MODMSH,NOCHECK
```

```
allsel,all,all
/title, m3x3_L180_F_-%aaa%
!TITULO DEL ANALISIS.
```

```
allsel,all,all                          ! Selects all entities
finish                                  ! Exits normally from a
processor
/filename,file                          ! Changes the Jobname for the
analysis for "caso25R".
/solu                                    ! Enters the solution processor.
    fdele,all,all

    cmsel,,base1
    cmplot
    nsel,inve
    nplot
    f,all,fz,-%aaa%,                    ! incremento 30 N
    allsel,all,all
```

```
    antype,static                        ! Specifies the analysis type: in this case
is Static
    nropt,unsym                          ! Specifies the Newton-Raphson options with
                                         unsymmetric matrices of elements
    _OMGSQRD=1                            ! Divide the square velocity in each load
step
    SOLCONTROL,1,0                        ! Activates optimized for a set of commands
!applicable to nonlinear solutions and Time step predictions not based on
contact !status or nonlinear element status

    EQSLV, SPARSE,1E-8                   ! The type of equation solver is Sparse
                                         direct with a tolerance of 1e-8.
    NLGEOM, 0                             ! Includes large-deflection effects in a
static
```



```

SSTIF,1          ! Stress stiffening is included in a nonlinear
analysis
NSUBST, 1, 1, 1,      ! Specifies the number of substeps to be
                      taken this load step
CNVTOL,F, 20e+1*aaa, 1.0E-03, 2, 0.0E+00      ! Force convergence
values !for nonlinear analyses is 20000 with a tolerance of 0.001, L2 norm
(check SRSS !value) and 0 reference value.

! neqit,500
save,m3x3_L180_F_%aaa/0.01%,db,,model      ! Save the model data as
caso%i%.db !(solid model, finite element model, loadings,...no results)
solve          ! Starts a solution.
finish        ! Exits normally from a processor
/aux3        ! Enters the results file editing
processor
/COPY,file,'rst','',m3x3_L180_F_%aaa/0.01%,'rst',''      ! Copies
file.rst to caso2.rst

!-----
! 0.rst
!-----
!finish
!/CLEAR
!resume,m3x3_L180_F_%aaa/0.01%,db

/post1
/file,m3x3_L180_F_%aaa/0.01%,rst
set,list
set,last
/eface,1
plnsol,u,z,0,1,0

!Posicion inicial
*get,nnode,node,,num,max ! get number of nodes
*dim,x,,nnode          ! set up arrays for node locations
*dim,y,,nnode
*dim,z,,nnode

!Desplazamientos
*dim,uux,,nnode        ! set up arrays for node locations
*dim,uuy,,nnode
*dim,uuz,,nnode
*dim,resul_z_ini,,nnode

!capturo los valores que quiero.
*vget,x(1),node,,loc,x      ! get coordinates
*vget,y(1),node,,loc,y
*vget,z(1),node,,loc,z
*vget,uux(1),node,,u,x      ! get coordinates

```



```

*vget,uuy(1),node,,u,y
*vget,uuz(1),node,,u,z

*vget,resul_z_ini(1),node,,loc,z

!Posicion final
*dim,resul_x,,nnode,
*dim,resul_y,,nnode,
*dim,resul_z,,nnode,

      *do,i,1,nnode,1,      ! store new positions
        resul_x(i)= x(i) + uux(i)
        resul_y(i)= y(i) + uuy(i)
        resul_z(i)= z(i) + uuz(i)
      *enddo

! WRITE COORDINATES
*CFOPEN,coordenadas_finales_%aaa/0.01%,dat
*VWRITE,SEQU,resul_x(1), resul_y(1), resul_z(1),
(' n','F7.0 ',' ', 'F20.11',' ', 'F20.11',' ', 'F20.11',' ', 'F20.11)

*CFCLOSE

!The next case is aumentando la fuerza y generar el modelo.

!FINISH
!/CLEAR

*do,ii,arg2,arg3,arg4

/PREP7

jj=ii/arg4 !pillar el entero

edele,all,all
ndele,all,all

/nopr
/input, coordenadas_finales_%jj-1%,dat
/gopr

!propiedades, materiales elasticamente isotropicos

```



```

TUNIF,298,                ! temp uniforme y derefe, en kelvin: 273 +
25 = 298
TREF,298,

mat,1                     !  arg1--> E = 2.5e5
mat,2                     !  E = 1e12
MPTEMP,,,,,,,,
MPTEMP,1,0
MPDATA,EX,1,,arg1
MPDATA,PRXY,1,,0.33
MPTEMP,,,,,,,,
MPTEMP,1,0
MPDATA,EX,2,,1e12
MPDATA,PRXY,2,,0.33

! Se introduce el tamaño del elemntno y se malla, con link10
allsel,all,all
ET,1,LINK180             ! Selecccion del tipo de elemento
KEYOPT,1,2,0            ! K2 = cross section scaling: 0 = func os
stretch
KEYOPT,1,10,0           ! K10 = Definir la tension inicial: No
USTRES routn
!*
R,1,0.001,0,            ! seccion : 0.001 y masa = 0
esize,,1               !Se genera un elemento por cada linea

!creo los elementos
/prep7
allsel,all,all

/nopr
*do, b, 1, 8999, 1
!/gopr                  !Reactivates suppressed printout.
    !bb=b               !para comprobar
    *do, k, b+1, 9000, 1
    !/gopr
    !bb = b
    !ii=i               !para comprobar
        a= distnd(b,k)
        *if, a, gt,(1+1+0.2), then           !a>2.2
            !edele,all,all
        !*endif
        *elseif, a, gt, (1+ 1),then          !a>2
            mat,1
            e, b, k,      ! creo la linea
        *else, a, le, (1+1), then           !a<=2
            mat,2
            e,b,k,
        *endif
    *enddo

```



```

*enddo

/gopr

*get,ee,elem,,count

allsel,all,all

!condicion de contorno, lo empotro. los 3 gdl. 413 nodos en total
!base es un cubo de lado 21,950782
allsel,all,all
nsel,,loc,z,-12,-8
nplot
nsel,a,loc,x,31,33
nplot
nsel,a,loc,y,31,33
nplot
nsel,a,loc,x,-31,-33
nplot
nsel,a,loc,y, -31,-33
nplot

cm,basel,node          !restricciones en la base. 79 nodos
cmplot
D,BASE1, ,0, , , ,ALL, , , , ,

! Parametros q ayudan a la convergencia
shpp,off                ! no tiene en cuenta la forma del nodo
MODMSH,NOCHECK

allsel,all,all
/title, m3x3_L180_F_%ii%
!TITULO DEL ANALISIS.

allsel,all,all          ! Selects all entities
!finish                 ! Exits normally from a processor
!/filename,file         ! Changes the Jobname for the analysis for
"caso25R".
/solu                   ! Enters the solution processor.
    !aplicacion de la fuerza
    fdele,all,all

    cmsel,,basel
    cmplot
    nsel,inve
    nplot
    f,all,fz,-%ii%,     ! incremento 30 N
    allsel,all,all

```



```

        antype,static          ! Specifies the analysis type: in this case
is Static
        nropt,unsym           ! Specifies the Newton-Raphson options with
                               unsymmetric matrices of elements
        _OMGSQRD=1            ! Divide the square velocity in each load
step
        SOLCONTROL,1,0        ! Activates optimized for a set of commands
!applicable to nonlinear solutions and Time step predictions not based on
contact !status or nonlinear element status

        EQSLV, SPARSE,1E-8    ! The type of equation solver is Sparse
                               direct with a tolerance of 1e-8.
        NLGEOM, 0             ! Includes large-deflection effects in a
static
        SSTIF,1               ! Stress stiffening is included in a
                               nonlinear analysis
        NSUBST, 1, 1, 1,      ! Specifies the number of substeps to be
                               taken this load step
        CNVTOL,F, 20e+1*ii, 1.0E-03, 2, 0.0E+00 ! Force convergence values
for !nonlinear analyses is 20000 with a tolerance of 0.001, L2 norm (check
SRSS value) !and 0 reference value.

!       neqit,500
        save,m3x3_L180_F_%jj%,db,,model ! Save the model data as
caso%i%.db !(solid model, finite element model, loadings,...no results)
        solve                  ! Starts a solution.
        finish                 ! Exits normally from a processor
        /aux3                  ! Enters the results file editing processor
        /COPY,file,'rst','',m3x3_L180_F_%jj%,'rst','' ! Copies
file.rst to caso2.rst

!-----
! ii.rst
!-----
!finish
!/CLEAR
!resume,m_1000nodos_L180_F_%jj%,db

/post1
file,m3x3_L180_F_%jj%,rst
set,list
set,last
/eface,1
!rsys,11
!plnsol,u,z,0,1,0

!prnsol,u,z

!Posicion inicial
*get,nnode,node,,num,max ! get number of nodes
*dim,x,,nnode            ! set up arrays for node locations

```



```

*dim,y,,nnode
*dim,z,,nnode

!Desplazamientos
*dim,uux,,nnode           ! set up arrays for node locations
*dim,uuy,,nnode
*dim,uuz,,nnode

!capturo los valores que quiero.
*vget,x(1),node,,loc,x    ! get coordinates
*vget,y(1),node,,loc,y
*vget,z(1),node,,loc,z
*vget,uux(1),node,,u,x    ! get coordinates
*vget,uuy(1),node,,u,y
*vget,uuz(1),node,,u,z

!Posicion final
*dim,resul_x,,nnode,
*dim,resul_y,,nnode,
*dim,resul_z,,nnode,

      *do,i,1,nnode,1,      ! store new positions
          resul_x(i)= x(i) + uux(i)
          resul_y(i)= y(i) + uuy(i)
          resul_z(i)= z(i) + uuz(i)
      *enddo

! WRITE COORDINATES
*CFOPEN,coordenadas_finales_%jj%,dat
*VWRITE,SEQU,resul_x(1), resul_y(1), resul_z(1),
(' n','F7.0 ',' ', 'F20.11',' ', 'F20.11',' ', 'F20.11')
*CFCLOSE

*enddo
*CFOPEN,fuerza_desplaz,dat
!*VWRITE,SEQU,F_ext(1),uuz_11(1),
*VWRITE,SEQU,F_ext(1),uuz_556(1),
(F7.0 ,F20.11 ,F20.11)
*CFCLOSE

/eof

```



### 7. 3. CÓDIGO PARA LA INTERFASE MEDIANTE DINÁMICA MOLECULAR.

Se crea un programa para el cálculo del desplazamiento máximo de la quinta partícula máxima, denominado: **analysis**, que este a su vez, aplica otros códigos.

