

**UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA**  
**DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA**  
**VALPARAÍSO - CHILE**

**ESTUDIO NUMÉRICO DEL COMPORTAMIENTO MECÁNICO  
DE ESPUMAS METÁLICAS DE UNA ALEACIÓN  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa  
CON POROSIDAD FUNCIONALMENTE DIRIGIDA FABRICADAS  
POR LA TÉCNICA PULVIMETALÚRGICA DE ESPACIADORES  
PARA APLICACIONES BIOMÉDICAS**

Tesis doctoral presentada por

**Mauricio Alejandro Campillo Canto**  
Estudiante de Doctorado en Ingeniería Mecánica

**Prof. Dr. Luis Carlos Pérez Pozo**  
Director de Tesis

Marzo 2023

*A mi padre y a mi abuelo,  
quienes ya no están conmigo para compartir este momento.*

# Agradecimientos

Quisiera expresar mis palabras de agradecimiento a todos quienes, de distinta forma, me han prestado su ayuda y soporte durante todo este tiempo.

A mi director de tesis, el profesor Dr. Luis Perez Pozo, por todo su apoyo en lo académico y personal.

Al profesor Dr. Ernerto Chicardi de la Universidad de Sevilla, por compartir sus resultados de investigación y facilitarlos para ser utilizados como insumo en este trabajo y su voluntad para apoyar mi trabajo de investigación.

A los profesores Robin A.L. Drew, Ph.D. y Ramin Sedaghati, Ph.D. de la Universidad Concordia, por su recepción y acogida durante el tiempo que realicé mi pasantía en Montreal, les agradezco por su tutela, su guía y todo lo que pude aprender de ellos.

A todos los que componen el Departamento de Ingeniería Mecánica, profesores, apoyos académicos y secretarias, quienes con su ayuda me hacen recordar que el DIMEC y la USM siempre serán mi casa.

A la Dirección de Postgrados y Programas de la Universidad Técnica Federico Santa María, quienes a través del programas de becas internas y el Programa de Iniciación a la Investigación Científica (PIIC) me permitieron obtener los recursos necesarios para sostener mis estudios.

Al gobierno de Canadá, y Global Affairs Canada, quienes a través de la beca otorgada por el programa *Canada-Chile Leadership Exchange Scholarship* me permitieron financiar mi pasantía en la Universidad Concordia.

A mis primos, Paz y Bob, por habernos recibido en su casa en Montreal, por su increíble hospitalidad y haberme facilitado tener una experiencia inmejorable.

Finalmente, a mi pareja Camila, mi familia y amigos, por estar siempre a mi lado, por su soporte y la fuerza para siempre seguir adelante.

# Resumen

El hueso es un tejido cuya estructura y densidad son dinámicas, las que varían en base a los estímulos externos. Cuando un elemento de fijación metálico (i.e: prótesis) es incorporado como refuerzo, la diferencia de rigidez entre el implante y el hueso produce un desbalance en la transferencia de cargas sobre la zona afectada, transfiriendo casi la totalidad de la carga mecánica al elemento de refuerzo, fenómeno conocido como *stress shielding*. En las zonas donde el hueso posee baja estimulación mecánica se produce reabsorción ósea, a la vez que en aquellos puntos donde se concentran las carga se produce una hiperdensidad ósea no deseada.

Para mejorar el desempeño de nuevos implantes y mitigar los efectos del *stress shielding*, gran parte de los esfuerzos en investigación a nivel mundial están orientados hacia el desarrollo de nuevas aleaciones en base a titanio que posean baja rigidez y alta resistencia. Con ello, nuevos materiales en base a titanio que incorporan elementos que estabilizan la fase  $\beta$ -Ti (BCC), como el Nb y Ta, permiten reducir el módulo elástico, respecto del titanio en fase  $\alpha$  (HCP). Un novedoso método para la producción de aleaciones metálicas a baja temperatura es la Aleación Mecánica (AM). Este proceso permite que parte de la fase  $\beta$  de la aleación se transforme alotrópicamente en fase  $\gamma$ -Ti (FCC), obteniendo una aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con una menor rigidez. Un segundo foco de investigación para este objetivo se centra en el desarrollo de estructuras e incorporación de porosidad para así controlar de forma precisa las propiedades (físicas y/o mecánicas) resultantes. La utilización de materiales que combinan el uso de aleaciones de baja rigidez con estructuras con porosidad orientada, para obtener un comportamiento específico similar al del tejido óseo, ofrecen una alternativa para alcanzar una respuesta mecánica que permita mitigar aún más los efectos del *stress shielding*.

El objetivo principal de este trabajo es desarrollar la extensión de una metodología numérica basada en la utilización conjunta del Método de Elementos Finitos (FEM) y el Método de los Elementos Discretos (DEM), como herramienta para determinar la respuesta mecánica compresiva en régimen lineal elástico de espumas metálicas fabricadas por pulvimetalurgia de espaciadores en una aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad funcionalmente dirigida.

Esta metodología utiliza la simulación DEM para la generación de un modelo CAD con porosidad homogénea que se utiliza como dominio en un análisis mediante FEM con un esquema de homogeneización de dos escalas bajo una condición de borde aproximadamente periódica modificada y una pequeña perturbación lineal para calcular las constantes elásticas aparentes, las que posteriormente son transferidas a un modelo FEM con porosidad funcionalmente dirigida como un modelo constitutivo elástico-lineal homogéneo por zonas o estratos. Los resultados obtenidos son consistentes con otras metodologías, y muestran que espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad funcionalmente dirigida en forma radial que posean porosidades promedio del orden de 35 % son capaces de exhibir módulos elásticos aparentes similares al del hueso cortical, ofreciendo características que cumplen con los requerimientos de biocompatibilidad y mayor reducción del *stress shielding* que aquellas con porosidad homogénea.

# Summary

Bone is a tissue with dynamic structure and density, tailored by external stimuli. When metallic fixation elements (i.e: prostheses) are added as reinforcement, the difference in stiffness between both produces a load bearing imbalance in the affected zone, transferring almost all the mechanical load to the reinforcement, this phenomenon is known as stress shielding. In areas with low mechanical stimulation bone resorption is observed, while areas with high mechanical stimulation show an unwanted hyperdensity.

To improve new implants performance and mitigate stress shielding effects, researchers have oriented their work to develop new titanium-based alloys with low stiffness and high strength. Then, new Ti-based materials with  $\beta$  phase (BCC) stabilizers, such as Nb and Ta, allow to reduce the elastic modulus, with respect to  $\alpha$ -Ti (HCP). A novel manufacturing process to produce metallic alloys at room temperature is Mechanical Alloying (AM). This process allows part of the  $\beta$ -Ti phase to allotropically transform to  $\gamma$ -Ti (FCC) to produce a  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa alloy, with even lower stiffness. Alternatively, researchers have focused their efforts toward developing new structures and adding porosity to precisely control both physical and mechanical properties.

The usage of materials combining low stiffness alloys and structures with gradient porosity, to achieve specific behavior similar to the bone tissue, offer an alternative to obtain a mechanical response that further reduces stress shielding effects.

The main goal of this work is to extend a numerical methodology based on the Discrete Elements Method (DEM) and the Finite Elements Method (FEM), as a mean to determine the linear-elastic mechanical response under compression of metallic foams produced in a  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa alloy by space holders powder metallurgy with functionally graded porosity.

This methodology uses DEM simulation to build a CAD model of an homogeneous porosity metallic foam which is used as a domain analyzed using FEM by means of a homogenization scheme under a modified approximately periodic boundary condition and a small linear perturbation method to compute the apparent elastic constants, which are later transferred to a FEM model with functionally

graded porosity through a linear-elastic constitutive model for each layer. The results obtained here are consistent with other methodologies, showing that  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa foams with radial functionally graded porosity with average porosity around 35 % are capable of exhibiting elastic modulus similar to cortical bone tissue, offering suitable biocompatibility behavior and better stress shielding reduction than their homogenous porosity counterparts.

# Glosario

1D/2D/3D	:	Unidimensional, Bidimensional, Tridimensional
ADT	:	(Alternating Digital Tree) Árbol Digital Alternante
AM	:	Aleación Mecánica
APBC	:	Condición de Borde Aproximadamente Periódica
ASTM	:	American Society for Testing Materials
ATD	:	( <i>Watershed</i> Algorithm) Algoritmo de Transformación Divisoria
BCC	:	(Body Centered Cubic) Cúbica Centrada en el Cuerpo
CAD	:	(Computer Aided Design) Diseño Asistido por Computador
CP-Ti	:	(Commercially Pure Titanium) Titanio Comercialmente Puro
DEM	:	(Discrete Elements Method) Método de los Elementos Discretos
DM	:	(Molecular Dynamics) Dinámica Molecular
DFC	:	Diferencia Finita Central
DOF	:	(Degree of Freedom) Grado de Libertad
FCC	:	(Face Centered Cubic) Cúbica Centrada en las Caras
FDT	:	(Fuzzy Distance Transform) Distancia de Transformación Difusa
FEM	:	(Finite Elements Method) Método de los Elementos Finitos
EBM	:	(Electron Beam Melting) Fusión por Haz de Electrones
EDP (PDE)	:	(Partial Differential Equation) Ecuación Diferencial Parcial
HA	:	Hidroxiapatita
HCP	:	(Hexagonal Closed Packed) Hexagonal Compacta
ISO	:	International Standardization Organization
LHS	:	(Latin Hypercube Sampling) Muestreo por Hipercubo Latino
MA	:	Manufactura Aditiva
mAPBC	:	(modified APBC) APBC modificada
MC	:	Monte Carlo
MD	:	Material(es) Dirigido(s)
MFD (FGM)	:	(Functionally Gradient Materials) Material(es) Funcionalmente Dirigido(s)
MSHS	:	(Multi Scale Homogenization Scheme) Esquema de Homogeneización Multi Escala
MUBC	:	(Mixed Uniform Boundary Conditions) Condiciones de Borde Mixtas Uniformes
NBS	:	(Non-binary Search) Búsqueda No Binaria
PVF (BVP)	:	(Boundary Value Problem) Problema de Valor en la Frontera
SLM	:	(Selective Laser Melting) Fusión Selectiva por Laser
SLS	:	(Selective Laser Sintering) Sinterización Selectiva por Laser
SMC	:	(Monte Carlo Simulation) Simulación de Monte Carlo
SVE	:	Elemento de Volumen Estadísticamente representativo
RVE	:	(Representative Volume Element) Elemento de Volumen Representativo

# Índice general

<b>Agradecimientos</b>	<b>II</b>
<b>Resumen</b>	<b>III</b>
<b>Summary</b>	<b>V</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Introducción . . . . .	1
1.2. Hipótesis Inicial . . . . .	1
1.3. Objetivos . . . . .	1
1.3.1. Objetivos Específicos . . . . .	2
1.4. Estructura de este trabajo . . . . .	2
1.5. Actividades de Divulgación . . . . .	3
<b>2. Antecedentes Generales</b>	<b>5</b>
2.1. Tejido Óseo . . . . .	5
2.2. Biomateriales . . . . .	8
2.3. Apantallamiento de Tensiones . . . . .	10
2.4. Materiales Porosos . . . . .	11
2.4.1. Clasificación Taxonómica . . . . .	11
2.4.2. Métodos de Fabricación . . . . .	14
2.4.3. Propiedades Mecánicas . . . . .	16

---

2.4.4. Respuesta Biológica . . . . .	18
2.5. Aleaciones de Titanio de Baja Rigidez . . . . .	19
2.6. Materiales Combinados . . . . .	23
2.7. Materiales Funcionalmente Dirigidos . . . . .	24
<b>3. Marco Teórico</b>	<b>28</b>
3.1. Teoría del Medio Continuo . . . . .	28
3.1.1. Esfuerzo y Deformación . . . . .	28
3.1.2. Leyes de Conservación . . . . .	35
3.1.3. Elasticidad Lineal . . . . .	39
3.2. Teoría de Homogeneización . . . . .	42
<b>4. Métodos Numéricos</b>	<b>48</b>
4.1. Método de los Elementos Discretos . . . . .	48
4.1.1. Cuantificación Fuerza Neta . . . . .	49
4.1.2. Integración Ecuaciones de Movimiento . . . . .	51
4.1.3. Identificación del Contacto . . . . .	53
4.2. Método de los Elementos Finitos . . . . .	57
4.2.1. Forma Variacional del Problema . . . . .	58
4.2.2. Discretización del Dominio . . . . .	60
4.2.3. Ecuaciones para un Elemento . . . . .	61
4.2.4. Ensamble de las Ecuaciones . . . . .	67
4.2.5. Condiciones de Contorno . . . . .	70
4.2.6. Formulación del Problema de Elasticidad Lineal . . . . .	71
4.3. Simulación Directa de Monte Carlo . . . . .	76
4.3.1. Conceptos Generales . . . . .	77
4.3.2. Generación Aleatoria de Puntos . . . . .	79
4.3.3. Convergencia de la Simulación . . . . .	82

---

<b>5. Metodología DEM-FEM</b>	<b>84</b>
5.1. Caracterización de Microestructuras	85
5.1.1. Porcentaje de Porosidad	88
5.2. Generación de Distribución No-estructurada de Poros	89
5.3. Espuma Funcionalmente Dirigida	92
5.4. Método de Perturbación Lineal	93
5.5. Dimensiones Adecuadas para un RVE	95
5.6. Respuesta Mecánica de Espumas Funcionalmente Dirigidas	96
<b>6. Resultados</b>	<b>98</b>
6.1. Caracterización de la estructura de espumas metálicas generadas por simulación DEM	99
6.1.1. Cálculo de porosidad en espumas CAD generadas por simulación DEM	101
6.2. Simulación del comportamiento mecánico de espumas metálicas con porosidad homogénea	109
6.2.1. Porcentaje de porosidad	110
6.2.2. Nivel de anisotropía	111
6.2.3. Tamaño de RVE	112
6.2.4. Constantes elásticas equivalentes	114
6.3. Simulación del comportamiento mecánico de espumas metálicas con porosidad funcionalmente dirigida	117
6.3.1. Constantes elásticas aparentes por capa	118
6.3.2. Constantes elásticas equivalentes de espumas con porosidad funcionalmente dirigida	121
6.4. Discusión	126
6.4.1. Estructura espumas generadas por simulación DEM	126
6.4.2. Cálculo de porosidad de espumas generadas por simulación DEM	127
6.4.3. Comportamiento mecánico de espumas con porosidad homogénea	128
6.4.4. Comportamiento mecánico de espumas con porosidad funcionalmente dirigida	129
<b>7. Conclusiones</b>	<b>131</b>

---

7.1. Aportes Específicos . . . . .	133
7.2. Futuros Trabajos . . . . .	135
<b>A. Propiedades mecánicas aleación <math>(\beta + \gamma)</math>-TiNbTa</b>	<b>137</b>
<b>B. Caracterización bidimensional de geometrías de espumas generadas mediante simulación DEM</b>	<b>138</b>
B.1. Distribución de tamaño de poro bidimensional . . . . .	138
B.2. Distribución de tamaño de interconexión bidimensional . . . . .	141
<b>C. Constantes Elásticas de Espumas de <math>(\beta + \gamma)</math>-TiNbTa</b>	<b>144</b>
C.1. Módulo de Young aparente . . . . .	145
<b>D. Asignación aleatoria de geometrías para gradientes</b>	<b>146</b>
<b>Referencias</b>	<b>148</b>

# Índice de figuras

Figura 2.1. Esquema detalles histológicos del tejido óseo . . . . .	6
Figura 2.2. Corte proximal de un fémur . . . . .	7
Figura 2.3. Ejemplo de reabsorción ósea por <i>stress shielding</i> . . . . .	10
Figura 2.4. Ejemplo de hiperdensidad ósea por <i>stress shielding</i> . . . . .	11
Figura 2.5. Clasificación de los diferentes tipos de materiales celulares . . . . .	13
Figura 2.6. Esquemas de tipos de celda de materiales celulares (a) celda cerrada y (b) celda abierta . . . . .	13
Figura 2.7. Clasificación métodos de fabricación de espumas metálicas de acuerdo con estado del material base . . . . .	14
Figura 2.8. Esquema del proceso para la obtención de espumas metálicas mediante pulvimetalurgia de espaciadores . . . . .	15
Figura 2.9. Diagrama de fases para el sistema Titanio-Molibdeno . . . . .	19
Figura 2.10. Efecto de diferentes elementos aleantes en diagrama de fases del titanio. Adición de elemento (a) neutral, (b) estabilizador- $\alpha$ y (c) estabilizador- $\beta$ . . . . .	20
Figura 2.11. Pseudo diagrama de fases binario para titanio y un estabilizador $\beta$ . . . . .	20
Figura 2.12. Efecto del tiempo de molienda en el tamaño de partícula para el proceso de AM . . . . .	23
Figura 2.13. Diferentes tipos de materiales funcionalmente dirigidos en la naturaleza según: (a) Variación de la estructura, (b) variación de la forma y (c) combinación de ambas . . . . .	25
Figura 2.14. Clasificación de MFD artificiales de acuerdo a variación basada en (a) composición, (b) microestructura y (c) porosidad . . . . .	25

Figura 2.15. Ejemplo esquema de fabricación de un material funcionalmente dirigido por pulvimetalurgia . . . . .	26
Figura 3.1. Movimiento de una partícula típica $P$ entre los tiempos $t_0$ y $t$ . . . . .	29
Figura 3.2. Desplazamiento $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = u_i$ de una partícula típica $P$ entre los instantes de tiempo inicial $t_0$ y actual $t$ . . . . .	30
Figura 3.3. Movimiento relativo entre dos partículas típicas $P$ y $Q$ entre el tiempo inicial $t_0$ y el tiempo actual $t$ . . . . .	30
Figura 3.4. Equilibrio de un cuerpo arbitrario definido por un medio continuo . . . . .	32
Figura 3.5. Equilibrio de un tetraedro en el punto típico $P$ . . . . .	33
Figura 3.6. Tensor de esfuerzo para un punto típico $P$ . . . . .	34
Figura 3.7. Esquema de un medio heterogéneo representado por un medio <i>homogeneizado</i> equivalente . . . . .	45
Figura 3.8. Ejemplos de diferentes tipos de celdas unitarias utilizadas para homogeneización de materiales compuestos y porosos que exhiben triple periodicidad espacial, donde sólo se muestra el volumen de una de las fases . . . . .	46
Figura 4.1. Esquema de distribución de fuerza de interacción entre partículas . . . . .	49
Figura 4.2. Esquema de modelo para fuerza de interacción entre partículas . . . . .	50
Figura 4.3. Discretización del dominio y mapeo de discos para NBS . . . . .	55
Figura 4.4. Discretización del dominio y mapeo de discos para NBS . . . . .	56
Figura 4.5. Detección de contactos en NB . . . . .	57
Figura 4.6. Discretización de un dominio $\Omega$ mediante $n$ elementos finitos $\Omega^k$ . . . . .	60
Figura 4.7. Condición en el contorno de dos elementos finitos (a) aceptable y (b) no aceptable . . . . .	61
Figura 4.8. Tipos de elementos comúnmente utilizados en discretizaciones para elementos finitos . . . . .	62
Figura 4.9. Asignación de identificadores de elementos e identificadores nodales globales . . . . .	63
Figura 4.10. Asignación de identificadores nodales locales para (a) un elemento triangular de 3 nodos y (b) un elemento cuadrilátero de 4 nodos . . . . .	64
Figura 4.11. Funciones de forma para un elemento triangular de 3 nodos . . . . .	64

Figura 4.12. (a) Ensamble de 2 elementos finitos $\Omega^m$ y $\Omega^n$ que comparten los nodos globales 2 y 4 y (b) el correspondiente flujo entre ambos en el lado común . . . . .	67
Figura 4.13. (a) Elemento tridimensional tetraédrico de 4 nodos y (b) elemento maestro para funciones de forma . . . . .	73
Figura 4.14. Cálculo de $\pi$ mediante simulación de Monte Carlo (a) definición del dominio de análisis (azul) y zona de definición para <i>éxito</i> de los ensayos de Monte Carlo y (b) ejemplo de ensayos independientes realizados con ensayos de <i>éxito</i> (verde) y <i>fracaso</i> (rojo). . . . .	77
Figura 4.15. Valor calculado de $\pi$ utilizando simulación de Monte Carlo para experimentos con diferente número de ensayos independientes . . . . .	79
Figura 4.16. Dominio para el calculo de $\pi$ (a) estratificación para LHS y (b) ejemplo de ensayos realizados para un experimento de Monte Carlo con ensayos calificados como <i>éxito</i> (verde) y <i>fracaso</i> (rojo). . . . .	80
Figura 4.17. Valor calculado de $\pi$ mediante simulación de Monte Carlo para simulaciones entre 10 mil y 1 millón de ensayos utilizando (a) estrategia de muestreo aleatorio y (b) estrategia de muestreo LHS comparados con el valor exacto (línea roja discontinua). . . . .	81
Figura 4.18. Comportamiento convergente para $n$ experimentos de Monte Carlo sucesivos en el cálculo de $\pi$ donde se observa el valor promedio (puntos en azul), el error estándar (puntos en gris) y el valor exacto de la solución del problema (línea roja punteada) para simulación de Monte Carlo realizada con (a) muestreo aleatorio simple y (b) muestreo tipo LHS. . . . .	83
Figura 5.1. Esquema metodología numérica basada en DEM-FEM extendida para la estimación del comportamiento mecánico de espumas metálicas con porosidad funcionalmente dirigida . . . . .	84
Figura 5.2. Ejemplo corte transversal en espumas metálicas . . . . .	86
Figura 5.3. Esquema para definición de radio equivalente de poro . . . . .	86
Figura 5.4. Esquema de dimensiones características calculadas a partir de las distancias entre poros . . . . .	88
Figura 5.5. Espuma de Mg fabricada por pulvimetalurgia de espaciadores donde se observan características como porosidad abierta, presencia de poros en la superficie, aglomeración localizada e interconexión entre poros individuales . . . . .	90

Figura 5.6. Esquema bidimensional del proceso de 3 etapas para la generación de geometrías CAD porosas con distribución no-estructurada de poros. (a) modelación DEM de partículas espaciadoras, (b) asignación uniformemente distribuida para el radio individual de poros y (c) geometría CAD final . . . . .	90
Figura 5.7. Microestructura de espuma fabricada por pulvimetalurgia de espaciadores con poros en el rango de 300 - 500 $\mu m$ . . . . .	92
Figura 5.8. Esquema de aplicación de condición de contorno para una perturbación lineal axial (dirección $x_1$ ) sobre un dominio bidimensional con $\varepsilon_{11}^0 \neq 0$ y $\sigma_{ij}^0 = 0$ . . . . .	94
Figura 6.1. Distribución de tamaño de poro para geometrías con diferentes tamaños de RVE $\delta = a/d_{max}$ , (a) $\delta = 4$ , (b) $\delta = 5$ , (c) $\delta = 6$ , (d) $\delta = 7$ , (e) $\delta = 8$ . . . . .	100
Figura 6.2. Distribución de tamaño de poro para geometrías con diferentes tamaños de RVE $\delta = a/d_{max}$ , (a) $\delta = 4$ , (b) $\delta = 5$ , (c) $\delta = 6$ , (d) $\delta = 7$ , (e) $\delta = 8$ . . . . .	102
Figura 6.3. Porcentaje de porosidad y error estándar calculados versus cantidad de puntos aleatorios generados para el análisis de una geometría cúbica de lado 6.75 mm con 4000 poros (CUBE_4000_1) utilizando 125000 puntos por iteración . . . . .	103
Figura 6.4. Tiempo de ejecución promedio para el cálculo de porosidad utilizando el algoritmo propuesto y McVol con 20 ejecuciones independientes . . . . .	105
Figura 6.5. Número de iteraciones promedio necesarias para alcanzar el criterio de convergencia de 0.5% de incertidumbre en el error estándar en función del número de poros incluidos en geometrías en base a un cubo de 6.75 mm de arista y geometrías en base a un cilindro de 6.75 mm de diámetro y 6.75 mm de altura. . . . .	106
Figura 6.6. Error absoluto en cálculo de porosidad para espumas cúbicas de lado 6.5 mm mediante DMCS (identificada como <i>This work</i> ) y McVol para (a) 100, (b) 500, (c) 1000, (d) 2000 y (e) 4000 poros con distribución no estructurada y tamaños uniformemente distribuidos . . . . .	107
Figura 6.7. Error absoluto en cálculo de porosidad para espumas cilíndricas de diámetro 6.5 mm y altura 6.5 mm mediante SMC (identificada como <i>This work</i> ) y McVol para (a) 100, (b) 500, (c) 1000, (d) 2000 y (e) 4000 poros con distribución no estructurada y tamaños uniformemente distribuidos . . . . .	108
Figura 6.8. Porcentaje de porosidad nominal versus obtenido para geometrías analizadas con tamaños de RVE entre 4 y 8 y porcentajes de porosidad entre 30% y 70% . . . . .	110

Figura 6.9. Correlación entre las diferentes componentes diagonales del tensor de rigidez de espumas metálicas sintéticas con tamaño de RVE entre 4 y 8 con porosidad entre 30 % y 70 % . . . . .	111
Figura 6.10. Razón de anisotropía de Huber (AR) promedio calculado para espumas sintéticas con tamaño de RVE entre 4 y 8 con porcentajes de porosidad entre 30 % y 70 % . . . . .	112
Figura 6.11. Distribución de componentes diagonales del tensor de rigidez macroscópico aparente de espumas sintéticas con tamaño de RVE entre 4 y 8 para (a) 30 %, (b) 40 %, (c) 50 %, (d) 60 % y (e) 70 % de porosidad . . . . .	113
Figura 6.12. Módulo de Young isotrópico equivalente para espumas metálica de CP-Ti con porosidad abierta para diferentes porcentajes de porosidad . . . . .	115
Figura 6.13. Razón de Poisson isotrópico equivalente para espumas metálica de CP-Ti con porosidad abierta para diferentes porcentajes de porosidad . . . . .	116
Figura 6.14. Módulo de corte isotrópico equivalente para espumas metálica de CP-Ti con porosidad abierta para diferentes porcentajes de porosidad . . . . .	117
Figura 6.15. Distribución del módulo de Young promedio para espumas de $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con diferentes porcentajes de porosidad . . . . .	119
Figura 6.16. Distribución de la razón de Poisson promedio para espumas de $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con diferentes porcentajes de porosidad . . . . .	120
Figura 6.17. Distribución del módulo de Young promedio para espumas de $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con diferentes porcentajes de porosidad . . . . .	121
Figura 6.18. Distribución de la razón de Poisson promedio para espumas de $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con diferentes porcentajes de porosidad . . . . .	122
Figura 6.19. Distribución del módulo de Young aparente en espumas de $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa gradientes para diferentes combinaciones de dirección, orientación de gradiente y nivel de porosidad promedio . . . . .	125
Figura B.1. Distribución tamaños de poro geometrías DEM con $\delta = 4$ y 30 % porosidad para (a) geometría dump34000, (b) geometría dump55000 y (c) geometría dump72500 . . . . .	138
Figura B.2. Distribución tamaños de poro geometrías DEM con $\delta = 4$ y 40 % porosidad para (a) geometría dump42500, (b) geometría dump61000 y (c) geometría dump84000 . . . . .	139
Figura B.3. Distribución tamaños de poro geometrías DEM con $\delta = 4$ y 50 % porosidad para (a) geometría dump22500, (b) geometría dump50000 y (c) geometría dump73500 . . . . .	139

Figura B.4. Distribución tamaños de poro geometrías DEM con $\delta = 4$ y 60 % porosidad para (a) geometría dump56000, (b) geometría dump78500 y (c) geometría dump97500 . . . . .	139
Figura B.5. Distribución tamaños de poro geometrías DEM con $\delta = 4$ y 70 % porosidad para (a) geometría dump33000, (b) geometría dump64500 y (c) geometría dump95000 . . . . .	139
Figura B.6. Distribución tamaños de poro geometrías DEM con $\delta = 8$ y 30 % porosidad para (a) geometría dump57500, (b) geometría dump82000 y (c) geometría dump94000 . . . . .	140
Figura B.7. Distribución tamaños de poro geometrías DEM con $\delta = 4$ y 40 % porosidad para (a) geometría dump42000, (b) geometría dump65000 y (c) geometría dump80500 . . . . .	140
Figura B.8. Distribución tamaños de poro geometrías DEM con $\delta = 8$ y 50 % porosidad para (a) geometría dump53500, (b) geometría dump73000 y (c) geometría dump94000 . . . . .	140
Figura B.9. Distribución tamaños de poro geometrías DEM con $\delta = 8$ y 60 % porosidad para (a) geometría dump44500, (b) geometría dump60000 y (c) geometría dump73000 . . . . .	140
Figura B.10. Distribución tamaños de poro geometrías DEM con $\delta = 8$ y 70 % porosidad para (a) geometría dump49000, (b) geometría dump66500 y (c) geometría dump81500 . . . . .	141
Figura B.11. Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con $\delta = 4$ y 30 % porosidad para (a) geometría dump34000, (b) geometría dump55000 y (c) geometría dump72500 . . . . .	141
Figura B.12. Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con $\delta = 4$ y 40 % porosidad para (a) geometría dump42500, (b) geometría dump61000 y (c) geometría dump84000 . . . . .	141
Figura B.13. Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con $\delta = 4$ y 50 % porosidad para (a) geometría dump22500, (b) geometría dump50000 y (c) geometría dump73500 . . . . .	142
Figura B.14. Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con $\delta = 4$ y 60 % porosidad para (a) geometría dump56000, (b) geometría dump78500 y (c) geometría dump97500 . . . . .	142
Figura B.15. Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con $\delta = 4$ y 70 % porosidad para (a) geometría dump33000, (b) geometría dump64500 y (c) geometría dump95000 . . . . .	142
Figura B.16. Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con $\delta = 8$ y 30 % porosidad para (a) geometría dump57500, (b) geometría dump82000 y (c) geometría dump94000 . . . . .	142

---

Figura B.17. Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con $\delta = 8$ y 40 % porosidad para (a) geometría dump42000, (b) geometría dump65000 y (c) geometría dump80500 . . . . .	143
Figura B.18. Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con $\delta = 8$ y 50 % porosidad para (a) geometría dump53500, (b) geometría dump73000 y (c) geometría dump94000 . . . . .	143
Figura B.19. Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con $\delta = 8$ y 60 % porosidad para (a) geometría dump44500, (b) geometría dump60000 y (c) geometría dump73000 . . . . .	143
Figura B.20. Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con $\delta = 8$ y 70 % porosidad para (a) geometría dump49000, (b) geometría dump66500 y (c) geometría dump81500 . . . . .	143
Figura C.1. Detalle de módulo de Young aparente para espumas de $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad homogénea nominal de (a) 30 %, (b) 40 %, (c) 50 %, (d) 60 % y (e) 70 % . . .	145

# Índice de tablas

Tabla 2.1. Elementos estabilizadores de fase $\beta$ en el Titanio . . . . .	21
Tabla 2.2. Aleaciones en base a titanio de baja rigidez . . . . .	21
Tabla 5.1. Propiedades elásticas para modelo de contacto de Hertz-tangencial para la simulación DEM de partículas rígidas . . . . .	91
Tabla 5.2. Variables de entrada y salida para diseño de experimento en espumas de porosidad homogénea . . . . .	96
Tabla 5.3. Variables de entrada y salida para diseño de experimento en espumas de porosidad dirigida en dirección radial y axial . . . . .	97
Tabla 6.1. Factores y niveles para análisis de estructura en espumas generadas por simulación DEM . . . . .	99
Tabla 6.2. Numeración de geometrías por nivel de porosidad . . . . .	99
Tabla 6.3. Tiempo de ejecución promedio para el análisis de 4 geometrías diferentes luego de 20 ejecuciones independientes utilizando el método propuesto (SMC) y McVol para geometrías basadas en un cubo de 6.75 mm de arista y cilindros de 6.75 mm de diámetro y 6.75 mm de altura con poros entre 350 – 450 $\mu m$ de diámetro . . . . .	104
Tabla 6.4. Dimensiones dominio espumas con porosidad dirigida en dirección axial . . . . .	117
Tabla 6.5. Dimensiones dominio espumas con porosidad dirigida en dirección radial . . . . .	118
Tabla 6.6. Módulo de Young aparente para espumas de $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad homogénea . . . . .	119

Tabla 6.7. Razón de Poisson aparente para espumas de $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad homogénea . . . . .	120
Tabla 6.8. Composición de porosidad por capa y promedio para espumas con porosidad dirigida	122
Tabla 6.9. Intervalos de confianza para el modulo de Young promedio en espumas de $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad dirigida radial . . . . .	123
Tabla 6.10. Intervalos de confianza para el modulo de Young promedio en espumas de $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad dirigida axial . . . . .	123
Tabla A.1. Propiedades elásticas para aleación $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa . . . . .	137
Tabla D.1. Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes radial ascendentes con porosidad baja . . . . .	146
Tabla D.2. Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes radial ascendentes con porosidad alta . . . . .	146
Tabla D.3. Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes radial descendentes con porosidad baja . . . . .	146
Tabla D.4. Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes radial descendentes con porosidad alta . . . . .	147
Tabla D.5. Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes axial ascendentes con porosidad alta . . . . .	147
Tabla D.6. Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes axial ascendentes con porosidad alta . . . . .	147
Tabla D.7. Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes axial descendentes con porosidad alta . . . . .	147
Tabla D.8. Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes axial descendentes con porosidad alta . . . . .	147

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Introducción

### 1.2. Hipótesis Inicial

En esta tesis se plantea de forma inicial que la incorporación de porosidad funcionalmente dirigida en la fabricación de materiales porosos en base a una aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa de baja rigidez y alta resistencia permite obtener un efecto sinérgico entre porosidad y gradientes en la respuesta mecánica en régimen elástico lineal, para reducir los efectos del *stress shielding* en una nueva generación de implantes biomédicos.

### 1.3. Objetivos

El objetivo principal de este trabajo de tesis doctoral es desarrollar la extensión de una metodología numérica basada en la utilización conjunta del Método de Elementos Finitos (FEM) y el Método de los Elementos Discretos (DEM), como herramienta para la determinación de la respuesta mecánica en compresión, dentro de un régimen lineal elástico, de espumas metálicas fabricadas en una aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa por pulvimetalurgia de espaciadores con porosidad funcionalmente dirigida.

### 1.3.1. Objetivos Específicos

Con el fin de alcanzar el objetivo general propuesto, para este trabajo se han establecido los siguientes objetivos específicos:

- OE.1 Establecer los parámetros adecuados para la generación de geometrías computacionales que representen de forma realista la microestructura y morfología de espumas metálicas fabricadas por pulvimetalurgia de espaciadores, mediante simulación DEM
- OE.2 Aplicar el concepto de Materiales Funcionalmente Dirigidos (MFD) para modelar la dependencia espacial de las propiedades mecánicas en espumas metálicas de aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad funcionalmente dirigida por capas
- OE.3 Implementar un esquema de homogeneización multiescala para modelar las propiedades mecánicas elásticas aparentes de espumas metálicas con porosidad homogénea
- OE.4 Implementar un método de perturbación adecuado que permita estimar las propiedades mecánicas aparentes de cada capa homogénea de material, basado en una relación constitutiva elástica lineal aparente de un elemento de volumen representativo y del espécimen con porosidad funcionalmente dirigida
- OE.5 Establecer un procedimiento que permita determinar las dimensiones adecuadas para el estudio de un elemento de volumen representativo
- OE.6 Realizar un estudio sistemático robusto, basado en técnicas de análisis estadístico, de los parámetros micro- y macroestructurales de espumas metálicas con porosidad funcionalmente dirigida y su influencia en la respuesta mecánica, para identificar posibles rutas de fabricación con aplicación biomédica.

## 1.4. Estructura de este trabajo

Este informe de tesis doctoral se encuentra dividido en capítulos. En el capítulo 1 se describen la hipótesis inicial del trabajo y los objetivos planteados para su desarrollo. En el capítulo 2, se realiza una introducción al contexto biomédico, donde se abordan los conceptos relacionados con el tejido óseo, el problema y una descripción de los biomateriales y su aplicación. Luego, en el capítulo 3 se abordan los conceptos teóricos específicos asociados a la metodología, abordando tanto una presentación a la teoría de la mecánica del medio continuo, como la posterior teoría de homogeneización. El capítulo 4 aborda una descripción de los diferentes métodos numéricos utilizados en la metodología de trabajo propuesta,

tanto para la formulación del método de los elementos discretos, como para el método de los elementos finitos, la simulación directa de Monte Carlo y el algoritmo de transformación divisoria. En el capítulo 5 se realiza una descripción específica de la metodología de trabajo utilizada, donde se articulan tanto los conceptos teóricos como los métodos numéricos antes descritos. En el capítulo 6 de este documento, en la primera parte se muestran los resultados obtenidos en las diferentes etapas de desarrollo, mientras que en la segunda mitad se realiza una discusión de estos resultados. Finalmente, en el capítulo 7 se resumen las principales conclusiones asociadas, junto a los principales aportes específicos realizados en este trabajo y una propuesta de futuras líneas de investigación.

## 1.5. Actividades de Divulgación

Durante el desarrollo de este trabajo de tesis se han realizado diferentes actividades de divulgación científica asociadas. Entre estas se destacan asistencias a congresos nacionales e internacionales, publicación de artículos en revistas científicas de corriente principal y otras actividades de cooperación con investigadores internacionales.

### I. Publicaciones en revistas científicas:

- I. Campillo, M., Pérez, P., Daher, J., & Pérez, L. (2019). Percentage porosity computation of three-dimensional non-convex porous geometries using the direct Monte Carlo simulation. *Engineering with Computers*. doi:10.1007/s00366-019-00866-2 (Publicada en línea)
- II. Campillo, M., Sedaghati, R., Drew, R.A.L., Alfonso, I. & Pérez, L. (2021). Development of an RVE using a DEM-FEM Scheme under Modified Approximate Periodic Boundary Condition to Estimate the Mechanical Properties of Open Foams. *Engineering with Computers*. doi: 10.1007/s00366-021-01355-1 (Publicada en línea)

### II. Presentaciones en Congresos:

- I. *Cómputo de porosidad en geometrías generadas mediante CAD de espumas metálicas mediante Simulación de Monte Carlo Directa*. XVII Jornadas de Mecánica Computacional (2018), SMC, Punta Arenas, Chile.
- II. *Aplicación de la Condición de Borde Aproximadamente Periódica en un Elemento de Volumen Representativo para la Estimación Computacional de las Propiedades Mecánicas de Espumas de Titanio Grado 4 para Aplicaciones Biomédicas*. XVIII Jornadas de Mecánica Computacional (2019), SMC, Santiago, Chile.

- III. *Desarrollo de un Elemento de Volumen Representativo para la estimación del módulo de Young de espumas de Titanio comercialmente puro con una distribución aleatoria de poros utilizando el Método de Elementos Finitos. XIV Congreso de Metalurgia y Materiales CONAMET-SAM (2019), Valdivia, Chile.*

### III. Cooperación con Investigadores Internacionales

- I. Colaboración con Dr. Ernesto Chicardi (Universidad de Sevilla, Sevilla, España) quien ha proporcionado la información de las propiedades mecánicas de material denso para la aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa.
- II. Pasantía de investigación de 6 meses, tutelada por Prof. Robin A.L. Drew, Ph.D. y Prof. Ramin Sedaghati, Ph.D. (Universidad Concordia, Montreal, Canadá). Realizada entre septiembre de 2018 y febrero de 2019.

## Capítulo 2

# Antecedentes Generales

### 2.1. Tejido Óseo

El hueso es un tejido vivo y, como material, posee una estructura jerárquica de varios niveles cuya matriz se encuentra construida, principalmente, a partir de una mezcla entre compuestos orgánicos e inorgánicos y agua. El componente orgánico principal de la matriz del hueso corresponde a las fibras de colágeno, mientras que la parte inorgánica de la matriz corresponde a hidroxapatita ( $Ca_5(PO_4)_3(OH)$ ), también llamada apatita carbonatada, un mineral cristalino formado a a partir del fosfato de calcio ( $Ca_3(PO_4)_2$ ) [1].

Dentro del proceso de formación del hueso se identifican 2 tipos principales, en función de su madurez. En una primera etapa, se forma el hueso primario donde las fibras de colágeno se ordenan en forma de pequeños manojos formando un tejido suelto. En este tipo de tejido, la matriz está compuesta, principalmente por su fase orgánica (e.g: fibras de colágeno), con un bajo nivel de calcificación. Durante la formación del hueso secundario, o hueso maduro, la estructura del hueso primario es modificada para para formar una estructura laminar calcificada muy ordenada, que en el caso del hueso humano se organiza en una estructural laminar paralela concéntrica para formar los llamados osteonas que conforman el sistema de Havers [2].

En el tejido óseo se identifican cuatro tipos de células: (i) osteoblastos, (ii) osteocitos, (iii) osteoclastos y (iv) células de revestimiento. Estas células son las responsables de conducir el ciclo de vida del tejido, mediante los procesos de formación, mantención y reabsorción del hueso. En la formación del hueso primario, los osteoblastos son los encargados de secretar las proteínas de colágeno que estructuran la matriz orgánica y que posteriormente son mineralizadas a través de la secreción de cristales de

hidroxiapatita que se adhieren a las fibras de colágeno. Esta secreción se produce por ruptura de la membrana producto de la sobresaturación de iones de calcio y fosfato al interior del osteoblasto. Una vez que la síntesis de la matriz finaliza, los osteoblastos pueden sufrir apoptosis (muerte) o bien (i) transformarse en células de revestimiento, donde se aplanan y depositan en la superficie del nuevo hueso o (ii) permanecer atrapados al interior de la matriz, diferenciándose en osteocitos [3]. Los osteocitos representan más del 90 % de las células en el tejido óseo y aunque por mucho tiempo se creyó que los permanecían inactivos, se ha identificado que cumplen con una función fundamental para el ciclo de vida del hueso. Los osteocitos forman una red interconectada de células con capacidad de detectar las cargas mecánicas. Mediante un efecto piezoeléctrico, estos sensores son capaces de emitir señales a las células en la superficie del hueso a modo de respuesta al estímulo mecánico y, con esto, cumplen un rol fundamental en el proceso de remodelación ósea [4]. De esta manera, la masa ósea y la tasa de formación ósea son controladas por la magnitud de las fuerzas y frecuencia de aplicación, respectivamente [5, 6]. Por otra parte, los osteoclastos son las células principalmente responsables de la reabsorción ósea, debido a su habilidad para remover calcio, así como también cumplen un rol fundamental en la homeostasis [7].

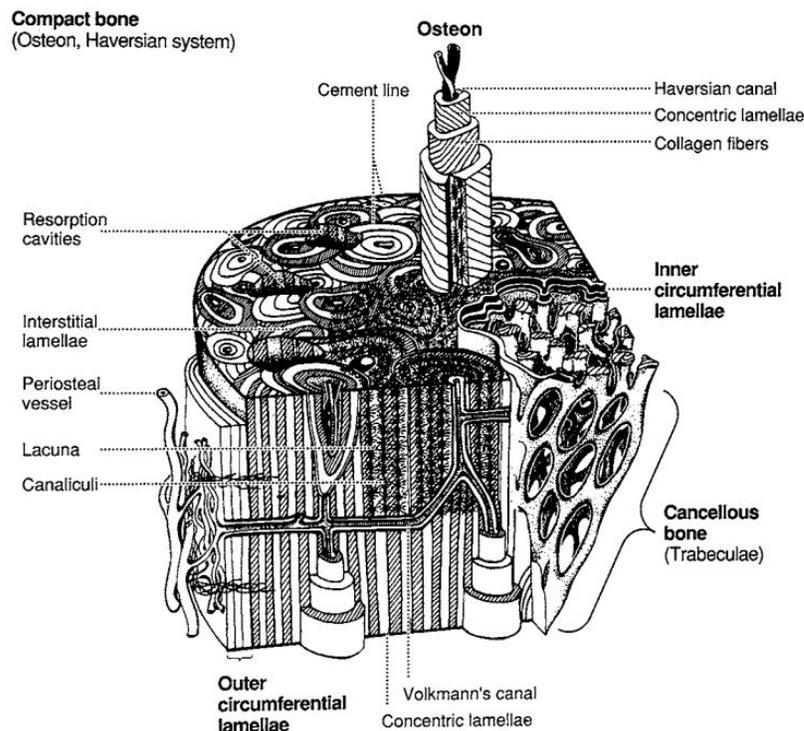


Figura 2.1: Esquema detalles histológicos del tejido óseo [8]

La remodelación del tejido óseo posee 2 principales funciones. La primera función que cumple es un proceso biomecánico, donde se encuentra asociada a un proceso de autoreparación para sanar el microdaño acumulado y así evitar fracturas. La segunda función principal es de regulación metabólica

del esqueleto, para ayudar a controlar los niveles de mineralización y calcificación (homeostásis) [9].

Si bien, en forma general, cuando se habla del tejido óseo se hace referencia al hueso maduro o secundario, esta clasificación basada en la madurez del tejido no es la única. A nivel microscópico, el tejido óseo se clasifica en (i) trabecular y (ii) cortical. El hueso trabecular o esponjoso se compone, principalmente, por una serie de columnas y placas que forman un entramado de baja densidad relativa (20% aprox.). En general, consiste en un mosaico de láminas paralelas orientadas en dirección de la trabécula (o columna) y los grupos de láminas son denominados paquetes trabeculares. Por otro lado, el hueso cortical (o denso) consta de una estructura compacta basada en los osteonas secundarios, alrededor de los canales de Havers, insertos en tejido intersticial con una densidad relativa alta que alcanza el 90 a 95%. Ambos tipos de estructura son posibles de observar en la figura 2.2.

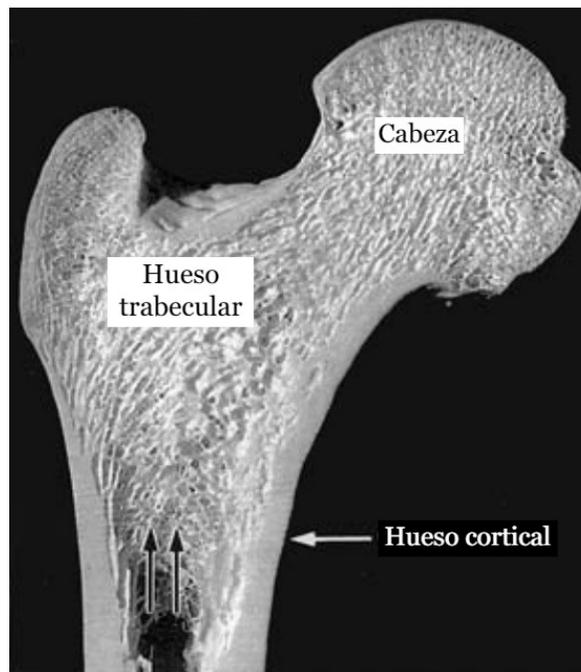


Figura 2.2: Corte proximal de un fémur [8]

Ambos tipos de tejido óseo han sido estudiados en extenso desde la perspectiva de su respuesta mecánica y es aceptado considerar que el hueso cortical posee un módulo elástico (Young) típico de  $20 \text{ GPa}$  [10], mientras que el hueso trabecular posee un módulo típico de  $1.5 \text{ GPa}$  [11]. Sin embargo, dependiendo de diversos factores como origen, talla, género, edad y nivel de actividad, los valores específicos pueden tener gran variabilidad respecto de estos valores de referencia [12].

## 2.2. Biomateriales

Aunque es aparentemente intuitivo, la definición del concepto de *biomaterial* ha producido cierto nivel de controversia a lo largo de la historia. Esto, principalmente asociado a la parte de *bio-*. Este concepto se puede asociar a materiales derivados de la vida, sin embargo, también pueden ser considerados como aquellos materiales utilizados para el beneficio de la vida [13]. Naturalmente, en la medida que el área ha evolucionando, también lo ha hecho la definición misma de este concepto. En la década de 1970, el comité asesor para biomateriales de la Universidad de Clemson definió un biomaterial como “una sustancia sistémica y farmacológicamente inerte diseñada para implantación o incorporación en un sistema vivo” [14]. Sin embargo, se ha argumentado que esta definición impone restricciones arbitrarias e innecesarias, de manera que ha evolucionado y en 2009, Williams ha redefinido el concepto como “una sustancia que ha sido ingeniería para tomar una forma que, en solitario o junto a un sistema complejo, se utiliza de manera directa, mediante el control de la interacción con componentes de sistemas vivos, el curso de algún procedimiento terapéutico o de diagnóstico, en medicina humana o veterinaria” [13], proveyendo una definición mucho más amplia pero a la vez precisa.

La diversidad de biomateriales que existen es vasta tanto en su origen, fabricación y/o utilización. En contraste con los aquellos de origen natural, aquellos de origen sintético se pueden clasificar en 4 principales categorías [15]:

- **Biocerámicos:** Constituidos a partir de pequeñas partículas de estructura no metálica, los biocerámicos son altamente no reactivos, rígidos y frágiles. Mientras exhiben una baja resistencia en tracción, su resistencia en compresión es alta. Su principal uso es en implantes ortopédicos y dentales [16–18].
- **Biocompuestos:** Son materiales fabricados a partir de dos o más materiales de características físicas, mecánicas o morfológicas distintas y son diseñados para mostrar un comportamiento físico, mecánico o químico específico. Normalmente se componen a partir de una matriz polimérica y otros componentes, poliméricos o cerámicos, que son incorporados como refuerzos. Han encontrado su aplicación, principalmente, para administración de medicamentos, ingeniería de tejidos y ortodoncia cosmética [19–21].
- **Biometales:** El uso de metales como biomateriales tiene un uso predominantemente estructural, siendo utilizado principalmente para reemplazo de tejido duro. Los metales más utilizados en aplicaciones biomédicas son aceros inoxidables, molibdeno, aleaciones de cromo-cobalto y titanio. Mientras los metales poseen propiedades mecánicas que exceden las del tejido que reemplazan, en general también exhiben desventajas sobre otros materiales como la susceptibilidad de corrosión y

toxicidad de algunos elementos, en el caso de aceros y aleaciones de cromo-cobalto, respectivamente. Así mismo, la presencia por tiempos prolongados de metales ha sido asociada con el incremento en el riesgo de reacciones por hipersensibilidad cutánea y sistémica [22, 23].

- **Biopolímeros:** Compuestos a partir de la unión covalente de unidades monoméricas encadenadas para formar macromoléculas, pueden ser de origen natural o sintético. En el campo biomédico poseen una amplia gama de utilidades como sistema para la administración de fármacos, fabricación de implantes y dispositivos para la consolidación de heridas producto de sus propiedades, donde destacan la biocompatibilidad, biodegradabilidad, alta bioactividad, la producción de productos finales no tóxicos, como la posibilidad de soportar la proliferación celular junto a baja densidad pero con propiedades mecánicas adecuadas [24, 25].

Una de las cualidades principales que cualquier biomaterial debe cumplir, independiente de su origen o clasificación, es la *biocompatibilidad*, otro concepto que ha evolucionado en el tiempo. En su forma más primitiva, asociada al desarrollo de implantes de primera generación entre las décadas de 1940 y 1980, la biocompatibilidad fue definida en la base de que los dispositivos fueran no tóxicos, no inmunogénicos, no trombogénicos, no cancerígenos, no irritantes, etc. En general, una definición absoluta hecha en una perspectiva en que el biomaterial carezca de interacción con el ambiente donde es inserto [26]. Sin embargo, en conjunto con el concepto de biomateriales esta definición fue revisada en la década de 1980 para considerar un rol activo del dispositivo y su interacción con el entorno como “la capacidad de un material para desempeñarse con una respuesta del huésped, para una aplicación específica”, es decir, una definición relativa asociada a una función específica [27]. Esta misma definición ha sido refinada posteriormente, llegando a la más reciente definición por:

*La habilidad de un biomaterial para desempeñar una función deseada respecto de una terapia médica, sin provocar ningún efecto adverso indeseado local o sistémico en el receptor o beneficiario de dicha terapia, pero generando la respuesta celular o del tejido más beneficiosa o deseada en esa situación específica, optimizando el desempeño clínico relevante de aquella terapia [26].*

Es decir, la habilidad de un material para desempeñar una función específica deseada respecto de una terapia médica, generando una respuesta apropiada en el huésped en una aplicación específica e interactuar con los sistemas vivos sin riesgo de lesiones, toxicidad o efectos inapropiados ya sean locales o sistémicos [28, 29].

## 2.3. Apantallamiento de Tensiones

Tal como se menciona en el apartado 2.1, el hueso es un tejido vivo, cuya estructura y densidad varían en base a los estímulos externos, donde los cambios tanto en la tasa de crecimiento y densidad son controlados por osteoblastos y osteoclastos, como una respuesta biológica adaptativa a la deformación producidas por acciones de las fuerzas externas. Este fenómeno, en el caso de nuevo hueso se denomina *modelado óseo*, mientras que en el hueso maduro se conoce como *remodelado óseo* [30].

En el caso de los metales utilizados como biomateriales, producto de la diferencia de rigidez existente entre los elementos de fijación (i.e: prótesis) y el hueso, se produce un desbalance en la trasferencia de carga sobre la zona afectada, donde casi la totalidad de la carga mecánica es transferida a través del biomaterial, este fenómeno es conocido como apantallamiento de tensiones o *stress shielding* [31, 32]. Mientras que esto es deseable para el caso de recuperación de fracturas, ya que se permite una consolidación del tejido sin riesgos de una nueva lesión, transcurrido el tiempo de consolidación o bien en otros casos, como en reemplazos de articulaciones, se vuelve perjudicial. Durante el proceso de remodelamiento constante del tejido óseo, en las zonas donde el hueso posee baja estimulación mecánica se desencadena un proceso de reabsorción ósea, a la vez que en aquellos puntos donde se concentra la transferencia de carga (i.e: interfaz hueso-implante) se tiene un proceso de hiperdensidad ósea no deseada [32-34].

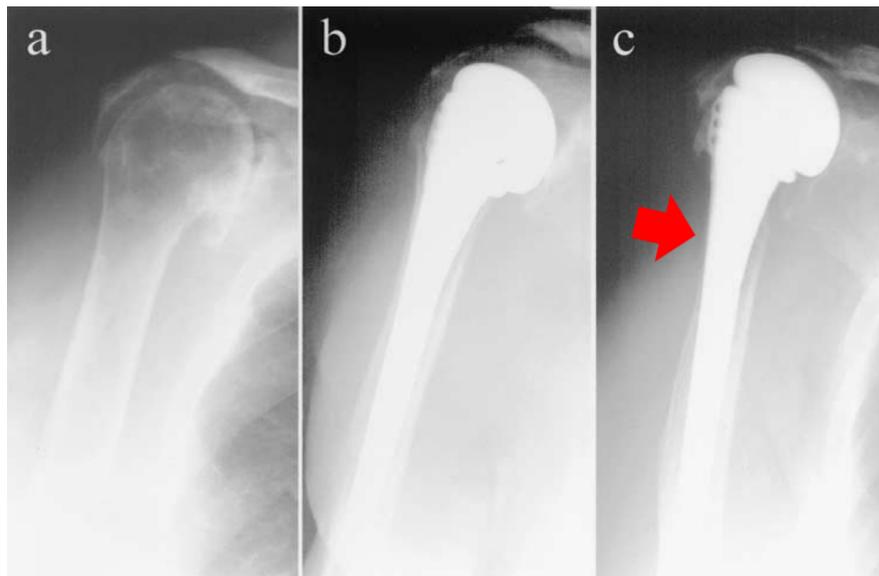


Figura 2.3: Ejemplo de reabsorción ósea por *stress shielding*. (a) Antes de la operación, (b) inmediatamente después de la operación y (c) imagen del paciente 7 años después de la operación. La flecha indica zona de reabsorción ósea [35]

Como se observa en la figura 2.3, para el implante de reemplazo de la articulación de hombro, en la

zona cercana a la articulación, la transferencia de carga desde el vástago del implante hacia el hueso circundante es mínima y, principalmente, por acción de cizalle, o deslizamiento, entre las superficies de la interfaz. En ese contexto, luego de un periodo de 7 años posterior a la cirugía, se aprecia una pérdida de densidad ósea en la zona (indicada con flecha blanca). Por otro lado, la transferencia de carga desde el implante hacia el hueso es máxima en la zona extrema del vástago. En la figura 2.4, se observa que al cabo de 6 años de la operación, se evidencia la hiperdensidad ósea antes descrita como un incremento en la intensidad de color blanco del tejido en la imagen de rayos x.

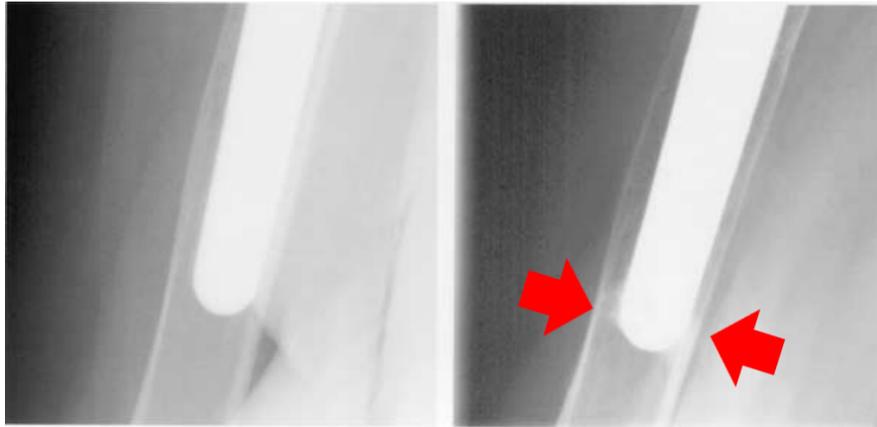


Figura 2.4: Ejemplo de hiperdensidad ósea por *stress shielding*. (a) Inmediatamente después de puesto el implante y (b) crecimiento en la zona del extremo del vástago 6 años después de la operación [35]

Con lo anterior, para implantes que poseen una función estructural, es deseable que exista una distribución de la carga entre el implante y el tejido óseo, es decir, que ambos materiales posean un módulo elástico similar [36].

## 2.4. Materiales Porosos

### 2.4.1. Clasificación Taxonómica

De acuerdo con la descripción de Gibson, muchos materiales exhiben una estructura *celular*, esto es, corresponden a un ensamble de celdas prismáticas o poligonales con aristas y superficies sólidas empaquetadas que llenan el espacio [37]. Dentro de esta categoría se pueden agrupar tanto materiales naturales como corcho, madera y hueso, como también materiales artificiales como espumas poliméricas y metálicas. Aquí, el concepto de *espuma metálica* es utilizado bajo la definición de un material celular fabricado como un material compuesto en base a una matriz metálica y acompañado de una fase vacía, es decir, con un contenido de poros, donde se define la porosidad,  $P$  como el complemento de la densidad relativa ( $\rho/\rho_0$ ), de la forma:

$$P = 1 - \frac{\rho}{\rho_0}, \quad (2.1)$$

donde  $\rho_0$  y  $\rho$  son las densidades del material denso y del material poroso, respectivamente. Se destaca que la definición de *espuma* corresponde a un material obtenido mediante la adición de un agente espumante que al ser calentado es transformado en una gas cuya expansión genera una porción vacía al interior [38], sin embargo, su uso es extensivo en la literatura para materiales celulares obtenidos mediante otros procesos [39].

Debido a que la definición anterior para un material celular agrupa una gran variedad de materiales con características diferentes es preciso incorporar un orden taxonómico para su subclasificación. En su trabajo, Savio et al. entregan una clasificación taxonómica basada en 4 criterios: (i) Estructura, (ii) topología, (iii) geometría y (iv) dimensiones de los elementos de la celda. Esta estructura taxonómica propuesta por Savio et al. es reproducida en la figura 2.5.

Como se muestra en la figura 2.5, dentro de los materiales con estructura aleatoria se identifican los materiales natural, las celdas de Vornoi y las espumas. En este caso particular, cuando la matriz que compone el material es un metal, se conoce como *espuma metálica*. Por otra parte, los materiales pueden ser clasificado en base a la topología de la celda, luego, cuando la celda exhibe poros aislados con una pared completamente definida se habla de una espuma metálica de *celda cerrada* (figura 2.6a), mientras que, cuando la celda exhibe poros con interconexión y una pared discontinua se trata de una espuma metálica de *celda abierta* (figura 2.6b).

De manera general, los materiales porosos de celda abierta suelen exhibir algún grado de porosidad aislada, con un nivel de interconexión entre los poros inferior al 100 %, de manera que, en habitualmente, se trata de una *celda híbrida*. Sin embargo, se suele utilizar el término dominante, ya sea celda abierta o celda cerrada.

En relación a la geometría de la celda, las primeras 3 categorías guardan relación con celdas unitarias clásicas, donde se posee un ordenamiento regular en el espacio, en cambio, las estructuras aleatorias de las espumas metálicas son clasificas dentro del cuarto grupo, esto es, *otras*. Finalmente, el cuarto criterio taxonómico de clasificación permite separar los materiales celular de acuerdo a las dimensiones que poseen los elementos contenidos en la celda. Suponiendo el ejemplo de una espuma metálica, en caso que todos los poros poseen igual dimensión, se habla de una espuma con una distribución *homogénea* de poros, mientras que si los poros exhiben variedad de tamaños, corresponde a una espuma con una distribución *heterogénea* de poros. En el caso en que el tamaño de los poros exhiba una variación gradual y direccionada, entonces corresponde a una espuma metálica con una distribución *gradiente* de poros.

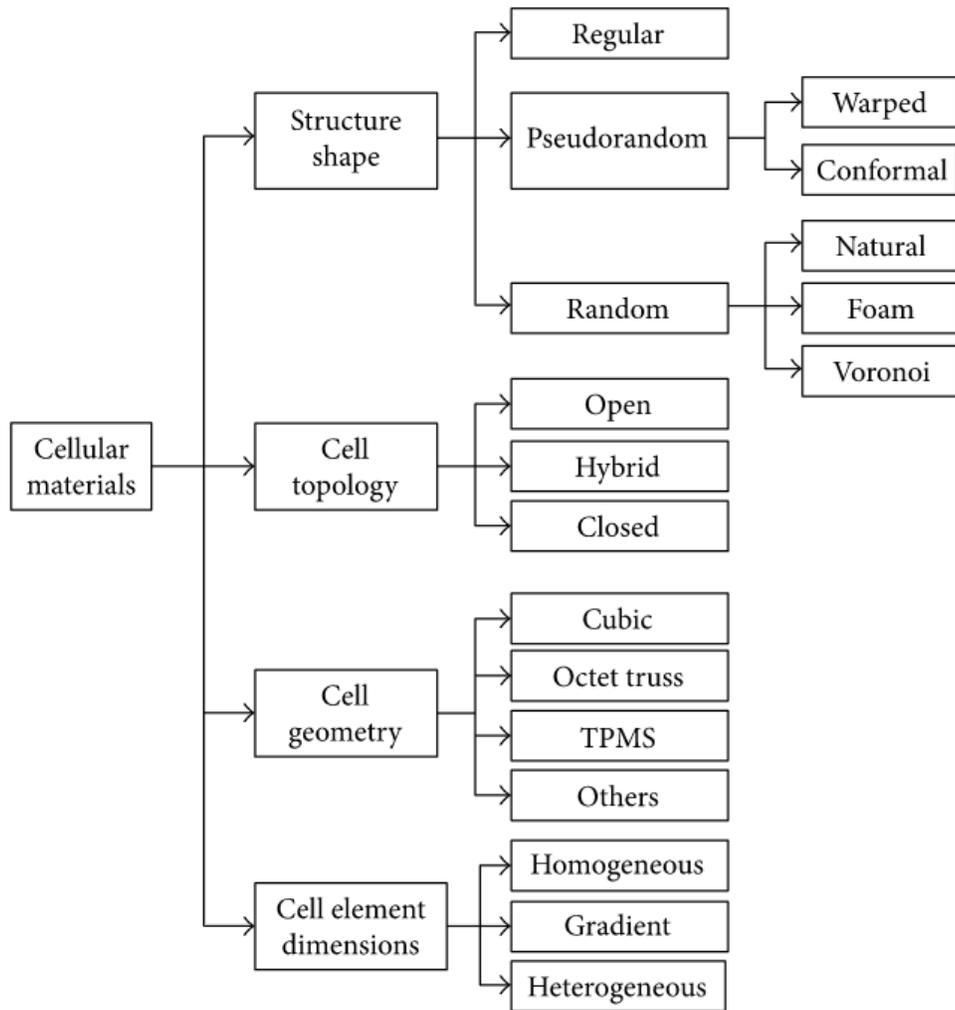


Figura 2.5: Clasificación de los diferentes tipos de materiales celulares [40]

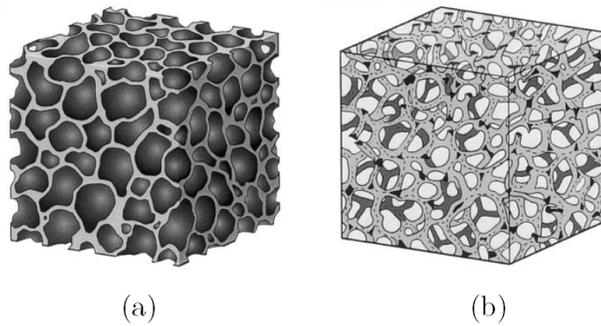


Figura 2.6: Esquemas de tipos de celda de materiales celulares (a) celda cerrada y (b) celda abierta [41]

### 2.4.2. Métodos de Fabricación

La producción de materiales porosos de base metálica (i.e: espumas metálicas) posee registros por cerca de un siglo [42–45]. Habitualmente, estos métodos son clasificados a partir del estado físico en que se encuentra el material base (i.e: Sólido, líquido, gas), como se muestra en la figura 2.7.

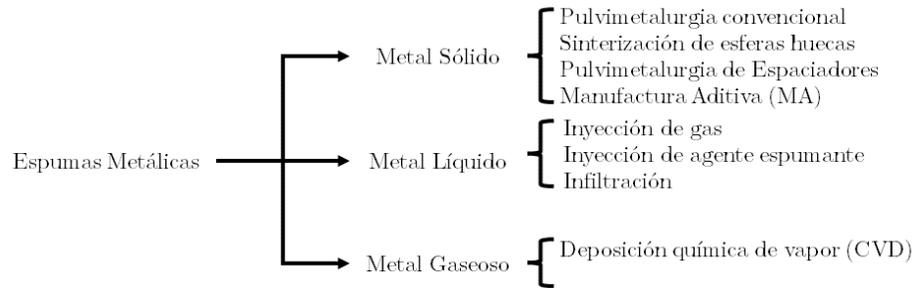


Figura 2.7: Clasificación métodos de fabricación de espumas metálicas de acuerdo con estado del material base

Para cada una de las clasificaciones mostradas en la figura 2.7 se pueden distinguir diversos avances, características y restricciones en relación a las capacidades de cada proceso de manufactura específico, siendo los rangos de porosidad y el tipo de celda posible de obtener las características más habituales [46]. A modo de ejemplo, procesos como la pulvimetalurgia convencional permite obtener porcentajes de porosidad bajos con morfología cerrada y con muy poco control [47] y, en la medida que se aumenta la presión de compactación la máxima porosidad posible de obtener se reduce aún más [48]. Por otro lado, procesos asociados a la manufactura aditiva (MA) como Selective Laser Melting (SLM), Selective Laser Sintering (SLS) o Electron Beam Melting (EBM) permiten obtener espumas con un gran control morfológicos (e.g: tipo de celda y tamaño y forma de los poros) y amplio rango de porosidades [49–51]. Sin embargo, los procesos de MA requieren de una definición *a priori* de la estructura interna de la espuma a generar, por lo que su aplicación se enfoca principalmente en estructuras de pequeño tamaño replicadas en el espacio [52–54]. Adicionalmente, las estructuras habitualmente utilizadas como base para la fabricación mediante MA introduce un grado de anisotropía innecesario en la estructura generada [55]. En 2001, Banhart realizó una revisión extensa donde detalle el estado del arte tanto para los diferentes métodos de fabricación para metales porosos, como también los método destructivo y no destructivo para su caracterización y clasificación para sus usos [56]. En su trabajo, la mayor parte de los datos experimentales provienen de estudios realizados sobre materiales porosos en base a aluminio, magnesio y acero. Nuevas revisiones sobre métodos y técnicas de fabricación continúan siendo publicadas en forma periódica [57–60].

Teniendo en consideración las ventajas comparativas que ofrece el método de pulvimetalurgia de espaciadores y el contexto en el que se desarrolla este trabajo, a continuación sólo se aborda en mayor detalle este método particular.

### Pulvimetalurgia de Espaciadores

La pulvimetalurgia de espaciadores corresponde a un proceso derivado de la pulvimetalurgia convencional. Este proceso se encuentra basado en 4 etapas principales: (i) Mezcla de los polvos metálicos con los espaciadores, (ii) Compactación de la mezcla, (iii) Remoción de los espaciadores y (iv) Sinterizado de la espuma [57, 61, 62]. En la figura 2.8 se muestra la secuencia antes mencionada, donde los pasos (iii) y (iv) han sido combinados bajo el concepto de “tratamientos térmicos”. Sin embargo, el proceso a utilizar para la remoción de los espaciadores depende directamente del tipo de espaciador a utilizar, un proceso térmico como es utilizado para la remoción de espaciadores con bajo punto de fusión o evaporación, como bicarbonato de amonio ( $NH_4HCO_3$ ) [63] o úrea ( $CO(NH_2)_2$ ) [64], mientras que para espaciadores con alto punto de fusión y alta solubilidad, como el cloruro de sodio ( $NaCl$ ), una remoción por disolución en agua es preferida [65].

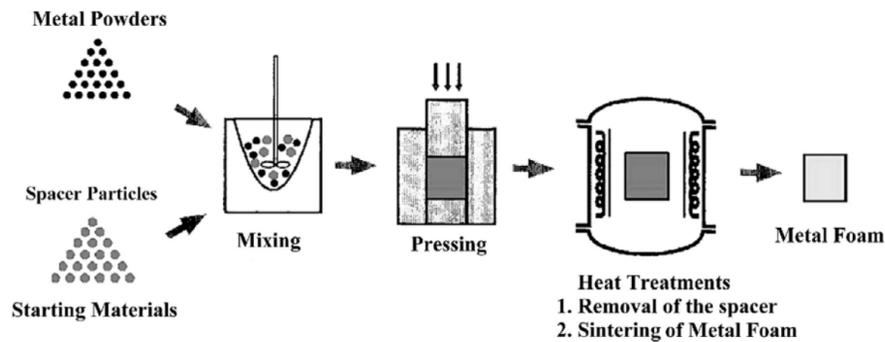


Figura 2.8: Esquema del proceso para la obtención de espumas metálicas mediante pulvimetalurgia de espaciadores [64]

A diferencia de la pulvimetalurgia tradicional, la pulvimetalurgia de espaciadores posee ventajas como la posibilidad de incrementar los porcentajes de porosidad máximos posibles de alcanzar a la vez de controlar en gran medida los parámetros morfológicos de las espumas metálicas resultantes, manteniendo la simplicidad y bajos costos propios de la pulvimetalurgia tradicional [64, 66].

### 2.4.3. Propiedades Mecánicas

Muchas de las propiedades de los materiales, tales como módulo elástico, tenacidad a la fractura o resistencia mecánica, disminuyen con el incremento de la porosidad [67]. Por lo mismo, es posible ajustar estas propiedades mediante su incorporación controlada [68]. Este comportamiento ha sido estudiado desde mediados del siglo XX, dando origen a diversos modelos tanto fenomenológicos como teóricos. Entre los modelos fenomenológicos más antiguos y comunes se encuentra el modelo exponencial de Ryshkewitch [69], propuesto a partir del estudio experimental de alúmina y zirconita porosa. Este modelo posee la forma:

$$\sigma^* = \sigma_0 e^{-bP}, \quad (2.2)$$

donde el límite elástico del material poroso,  $\sigma^*$ , se expresa como una función exponencial que depende de propiedades como el límite elástico del material base (alúmina y zirconita),  $\sigma_0$ , y la porosidad,  $P$ , expresada como fracción y un parámetro experimental de ajuste,  $b$ , evaluado como  $b = 7$  por Duckworth [70]. Aunque el modelo de la ecuación 2.2 fue presentado para el cálculo de la resistencia a la compresión, otros autores como Moulson, Phani y Niyogi y Selçuk y Atkinson han extendido su uso para ajustar datos empíricos en la predicción del módulo elástico de materiales porosos fabricado en base a diferentes aleaciones como nitruro de silicio, óxido de gadolinio, óxido de zirconio, óxido de níquel y óxido de itrio [71–73].

Si bien el modelo exponencial de Ryshkewitch-Duckworth posee una forma cerrada muy simple, diversos estudios han mostrado que este modelo solo exhibe un buen ajuste a datos experimentales en rangos específicos de porosidad, en la medida que el parámetro de ajuste  $b$  de la ecuación 2.2 es establecido de manera ad-hoc a los datos, con valor normalmente inferior al propuesto por Duckworth [74–76].

Por otra parte, Schiller propuso una relación logarítmica para la resistencia de materiales no metálicos frágiles de la forma:

$$\sigma^* = k \ln \left( \frac{P_{cr}}{P} \right), \quad (2.3)$$

donde  $k$  es un parámetro de ajuste experimental,  $P_{cr}$  corresponde a la porosidad a la cual la resistencia del material poroso es prácticamente nula y  $P$  es la correspondiente porosidad. Posteriormente, el mismo Schiller mostraría que su modelo logarítmico es en la práctica equivalente al modelo exponencial de Ryshkewitch, salvo en los valores extremos de porosidad donde, mientras el modelo exponencial sugiere una resistencia residual para porosidades del 100%, su modelo logarítmico sugiere una resistencia

infinita para materiales densos (i.e: con 0% de porosidad) [78]. Otros modelos fenomenológicos han sido propuestos, algunos de ellos fueron discutidos por Rice en la década de 1970, para su aplicación en el estudio de materiales cerámicos [79].

En la década de 1990, Ramakrishnan y Arunachalam [80] propusieron una nueva relación para las propiedades mecánicas exhibidas por materiales porosos, en su trabajo a diferencia de los casos anteriores, los autores tomaron una aproximación teórica donde se incorpora la influencia de ambas constantes elásticas del material base para el desarrollo de expresiones específicas para cada constante elástica de un material poroso de la forma:

$$M^* = M(1 - P)^2 / (1 + b_m P), \quad (2.4)$$

donde la propiedad elástica en el material poroso,  $M^*$ , puede corresponder al módulo de Young,  $E$ , o el módulo de corte,  $G$ , los cuales dependen tanto de la porosidad,  $P$ , como del parámetro  $b_m$  que es función del módulo de Poisson,  $\mu$ , del material base. Entonces, este parámetro puede tomar la forma:

$$\begin{aligned} b_E &= 2 - 3\mu \text{ o} \\ b_G &= \frac{11 - 19\mu}{4(1 + \mu)}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

para el módulo de Young y módulo de corte, respectivamente. Por otra parte, los autores también propusieron una expresión para determinar el módulo de Poisson en el material poroso,  $\mu^*$ , de la forma:

$$\mu^* = \frac{4\mu + 3P - 7\mu P}{4(1 + 2P - 3\mu P)}, \quad (2.6)$$

que, de manera análoga, depende tanto de la porosidad del material poroso, como del módulo de Poisson del material base. Los autores, además, validaron las expresiones propuestas en el análisis de las propiedades mecánicas de diferentes materiales cerámicos, donde expresaron haber mostrado una buena precisión [80, 81]. Posteriormente, Nakajima realizó una revisión enfocada en metales porosos con contenido de poros no esféricos con direccionalidad. En su revisión, el autor destaca que gracias a la gran cantidad de data experimental acumulada en las varias décadas de investigación, se ha podido establecer que, para diferentes propiedades de los materiales porosos, tales como módulo elástico y límite elástico, existe una relación de potencia en función de la porosidad, de la forma:

$$M = M_0(1 - P)^m, \quad (2.7)$$

donde  $M_0$  y  $M$  corresponden a la propiedad física del material denso y del material con porosidad,  $P$ , mientras que el exponente  $m$  es un parámetro que depende tanto del material, como de la propiedad física medida y que debe ser definido de manera experimental [82–85]. En esta línea, diversos autores han realizado subsecuentes revisiones sobre los diferentes modelos para establecer la relación entre porosidad y las propiedades mecánicas ya mencionadas [86]. Uno de los modelos más utilizados corresponde al modelo de **Gibson y Ashby**, con una relación para el módulo de Young de materiales celulares de celda abierta,  $E^*$ , de la forma:

$$E^* = C_1 \cdot E_0 \left( \frac{\rho^*}{\rho_0} \right)^2 = C_1 E_0 (1 - P)^2, \quad (2.8)$$

donde la constante  $C_1$  es definida de forma experimental, con un  $C_1 \sim 1$  [87, 88]. Por otra parte, en 2016, **Stanev et al.** presentó una revisión sobre las diferentes rutas de fabricación para la obtención de metales porosos de celda abierta y sus propiedades [89].

#### 2.4.4. Respuesta Biológica

Para satisfacer los requerimientos de biocompatibilidad, los materiales no solo necesitan cumplir con requerimientos específicos en cuanto a su comportamiento mecánico, sino también respecto de su respuesta biológica. En este último, se espera que el biomaterial sea capaz de promover la colonización y migración celular [90, 91]. Con esto, el biomaterial es capaz de favorecer el flujo de nutrientes y oxígeno a las células, de manera que promueva la formación de nuevo tejido óseo, para así ayudar en la consolidación de la zona de interfaz entre el implante y el tejido que lo aloja [92, 93].

Entre los parámetros que más influyen en esta respuesta biológica se destaca tanto el tamaño de los poros que posee el biomaterial poroso, como interconectividad entre los poros [94, 95]. Estos parámetros tienen un impacto, principalmente en la capacidad de promover el asentamiento, migración, vascularización y transporte de nutrientes desde y para las células del tejido que se reproduzca [92].

Diferentes autores han investigado estos efectos con la intención de definir los rangos de valores que más favorecen este comportamiento. En esa línea, la evidencia ha mostrado que, para obtener una respuesta biológica favorable a la osteointegración en titanio, es deseable contar con rangos de tamaño de poro que se encuentre entre los 300  $\mu\text{m}$  y los 600  $\mu\text{m}$  [96–99], con un alto nivel de porosidad abierta [100] cuyo tamaño de interconexión sea superior a los 50  $\mu\text{m}$  [101].

## 2.5. Aleaciones de Titanio de Baja Rigidez

Para mejorar el ciclo de vida de nuevos implantes, la tendencia en investigación se ha orientado al desarrollo de nuevas aleaciones en base a titanio que posean una baja rigidez y una alta resistencia [102]. En esa línea, el énfasis ha estado en el diseño de nuevas aleaciones de titanio tipo  $\beta$  [103]. La configuración habitual del titanio a temperatura ambiente corresponde a una estructura hexagonal compacta (HCP), conocida como *fase  $\alpha$* . Sin embargo, a altas temperaturas, exhibe una estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo (BCC), conocida como *fase  $\beta$* , tal como se muestra en la figura 2.9. Luego, el concepto de *aleaciones Titanio- $\beta$*  (o  $\beta$ -Ti) hace referencia a cualquier aleación con base de titanio, cuya adición de elementos aleantes permite conservar la fase BCC generada sobre la temperatura de transición entre ambas fases [104].

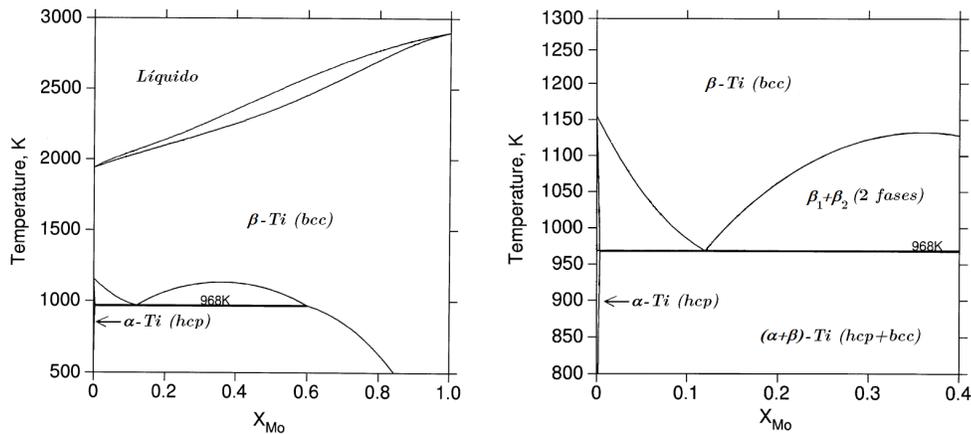


Figura 2.9: Diagrama de fases para el sistema Titanio-Molibdeno [105]

La adición de elementos en una aleación de base titanio tiene un efecto en el diagrama de fases del sistema. Esto se observa como un cambio en la temperatura de transición, entre las fases  $\beta$  y  $\alpha$  durante el enfriamiento. Los diferentes efectos que tienen los elementos aleantes en el titanio se muestran en la figura 2.10. Aquí, los elementos que no tienen mayor influencia sobre las fases se denominan *neutros*, mientras que aquellos que producen un incremento en la temperatura de transición se denominan *estabilizadores- $\alpha$* . Por otro lado, aquellos elementos que con su adición producen un descenso en la temperatura de transición se conocen como *estabilizadores- $\beta$* . Dentro de este último grupo, existen 2 grupos de elementos aleantes, los que se clasifican en función del tipo de transición que generan: (i) Isomórficos, caracterizados por su alta solubilidad en titanio, donde toda la fase  $\beta$  producida a alta temperatura se puede mantener, transformar en fase  $\alpha$ -Ti o descomponer como  $\alpha + \beta$ -Ti y (ii) eutectoides, donde incluso bajos porcentajes de adición pueden llevar a la formación de compuestos intermetálicos, siendo los del primer grupo los más relevantes [106].

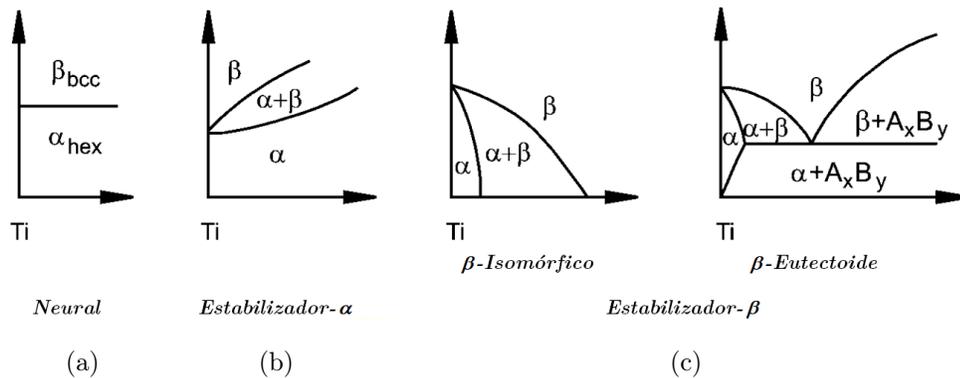


Figura 2.10: Efecto de diferentes elementos aleantes en diagrama de fases del titanio. Adición de elemento (a) neutral, (b) estabilizador- $\alpha$  y (c) estabilizador- $\beta$  [106]

Para que una aleación isomórfica  $\beta$ -Ti pueda conservar el total de la fase  $\beta$ -Ti generada sobre la temperatura de fusión, el porcentaje de adición de elementos aleantes debe ser tal que esa fase se estabilice, suprimiendo la formación de martensita [107]. Esto se obtiene mediante la adición de elementos *estabilizadores- $\beta$* , tales como Tántalo (Ta) y Niobio (Nb) [103, 108, 109]. Como se mencionó anteriormente, en la medida que se incrementa el contenido del elemento estabilizador- $\beta$ , se genera una disminución en la temperatura de transición para la fase  $\beta$ -Ti y, en consecuencia, para la cual se puede generar martensita ( $M_S$ ) y una mezcla de fases  $\alpha + \beta$ , como se muestra en la figura 2.11. Con esto, existe una concentración de estabilizadores a partir de la cual se evita por completo la generación de martensita durante el enfriamiento, este punto es conocido como la concentración de estabilización,  $C_c$ . Adicionalmente, el contenido de estabilizador permite disminuir la temperatura de transición  $T_s$ , pudiéndose lograr una concentración mínima,  $C_s$ , a partir de la cual se obtiene un 100% de estructura  $\beta$ -Ti, luego del enfriamiento. Estas aleaciones son conocidas como *aleaciones  $\beta$ -Ti estables* [110].

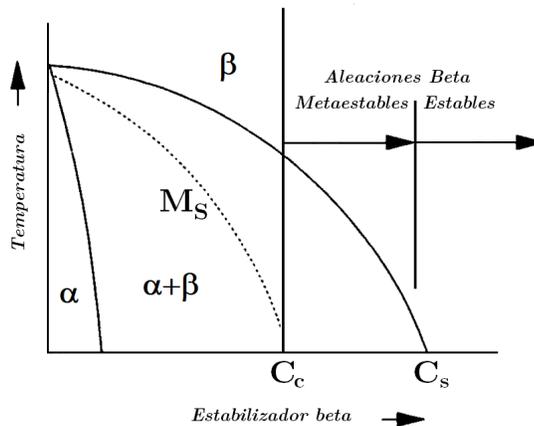


Figura 2.11: Pseudo diagrama de fases binario para titanio y un estabilizador  $\beta$  [110]

Las aleaciones cuya concentración de estabilizador- $\beta$  se encuentra entre  $C_c$  y  $C_s$ , aunque se puede

retener el 100% de la fase  $\beta$ -Ti generada, esta es *metaestable* y se generarán precipitados de fase  $\alpha$  [110, 111]. En la tabla 2.1 se muestran algunos de estos elementos junto al tipo de transformación que producen, su concentraciones de estabilización ( $C_c$ ) y la disminución de temperatura de transición por cada 1% de adición.

Tabla 2.1: Elementos estabilizadores de fase  $\beta$  en el Titanio [110]

Tipo de Transformación	Elemento		Contenido de Estabilización (%)	Disminución Temperatura de Transición ( $^{\circ}C$ )
Isomórfica	Molibdeno	Mo	10.0	-8.3
	Vanadio	V	15.0	-5.5
	Tungsteno	W	22.5	-13.8
	Niobio	Nb	36.0	-10.6
	Tantalo	Ta	45.0	-15.6
Eutectoide	Fierro	Fe	3.5	0
	Cromo	Cr	6.5	-2.8
	Cobre	Cr	13.0	-5.6
	Niquel	Ni	9.0	4.4
	Cobalto	Co	7.0	3.3
	Manganeso	Mn	6.5	4.4
	Silicio	Si	-	21.1

A consecuencia de la estabilización de la fase  $\beta$  (BCC), en reemplazo de la fase  $\alpha$  (HCP), las aleaciones  $\beta$ -Ti poseen propiedades mecánicas diferentes. Esta diferencia ha sido bien documentada, pudiéndose encontrar registros desde hace algunas décadas [112]. En cuanto a la manera en que los estabilizadores- $\beta$  afectan estas propiedades también han sido estudiadas en profundidad y es ampliamente entendido que la fase  $\beta$  (BCC) de las aleaciones  $\beta$ -Ti poseen una ventaja sobre la fase  $\alpha$  del titanio puro (CP-Ti) y aleaciones  $\alpha$ -Ti, para aplicaciones médicas, en cuanto exhiben menores módulos elásticos y mayores límites elásticos [113–115]. Algunas de estas aleaciones en base a titanio que han sido desarrolladas para exhibir baja rigidez se muestran en la siguiente tabla:

Tabla 2.2: Aleaciones en base a titanio de baja rigidez

Aleación	Módulo Elástico	Ref.
Ti-29Nb-13Ta-4.6Zr	65 GPa	[116]
Ti-20Nb-10Ta-5Zr	85 GPa	[117]
Ti-25Nb-10Ta-5Zr	60 GPa	[117]
Ti-29Nb-13Ta-4.6Zr	50 GPa	[118]
Ti-34Nb-2Ta-0.5O	63 GPa	[119]
Ti-34Nb-2Ta-3Zr-0.5O	68 GPa	[119]

En la tabla 2.2 se observa cómo la incorporación de elementos estabilizadores- $\beta$ , como Nb y Ta, en aleaciones  $\beta$ -Ti permiten reducir el módulo elástico en aproximadamente un 50%, respecto del valor exhibido por el titanio en su fase  $\alpha$  ( $\sim 110$  GPa). Para estas aleaciones, si bien el Zr es considerado

un elemento neutral para la estabilidad de fases [106], se considera un elemento estabilizador- $\beta$  en presencia de elementos como Nb y Ta, en combinación con oxígeno [120]. Sin embargo, los valores mínimos obtenidos para módulo elástico se encuentran en el orden de los 60 GPa, aun muy por encima a los valores del hueso (i.e:  $\sim 20$  GPa para el hueso cortical). Adicionalmente, Saito et al. mostraron que este tipo de aleaciones posee, además, la particularidad de exhibir *super propiedades*, esto es, son capaces de mostrar una reducción y estabilidad drástica en módulo elástico y coeficiente de expansión térmica luego de ser sometidas a deformación plástica en frío [121].

Un método alternativo para la producción de aleaciones metálicas sin la necesidad de incorporar calor para elevar la temperatura de los elementos es el proceso de Aleación Mecánica (AM). Esta técnica fue desarrollada por Benjamin, en la década de 1960 para la producción industrial de aleaciones, como una alternativa para superar las desventajas de la pulvimetalurgia tradicional para el tratamiento de polvos muy finos y, con ello, se encontró un proceso que permitía la combinación de materiales con características muy disímiles que no podían ser aleados mediante otras técnicas [122]. Esta es una técnica simple y económica donde no aplica ninguna de las limitaciones impuestas por el diagrama de fases. El proceso de AM se logra generar la aleación mediante la mezcla de los polvos metálicos en un molino de alta energía, las partículas de polvo metálico son deformadas, fracturadas y vueltas a soldar [123].

Con cada impacto entre las bolas, normalmente de acero, se atrapan partículas de polvo metálico que son aplastadas y deformadas, exponiendo una nueva superficies limpia que luego, cuando dos superficies limpias entran en contacto, se sueldan entre si, dando origen a una partícula de mayor tamaño. Luego, entre mayor sea el tamaño de las partículas, mayor es su probabilidad de incluir defectos (e.g: grietas) que contribuyan a su fractura. Con el pasar del tiempo, las partículas se ven endurecidas por deformación plástica, de manera que son menos propensas a deformarse y a fracturarse, produciendo una estabilidad en el sistema [124, 125]. Esta evolución se observa en la figura 2.12.

Basándose en esta técnica, varios autores han explorado su aplicación para la obtención de nuevas aleaciones de baja rigidez [126–129]. En esta línea, Normand et al. utilizaron la AM con sinterización libre (i.e: sin presión) para la producción de una aleación TiNbTaMoZr de alta entalpía, mientras que Chicardi et al. y García-Garrido et al. han utilizado esta técnica para diseñar una aleación en base a titanio con adición de Nb y Ta donde el tiempo y la energía requerido por el proceso de MA se explotan, junto con la independencia de los límites del diagrama de fases, para permitir que una parte de la fase  $\beta$  (BCC) sufra una transformación alotrópica a una fase cubica centrada en la cara (FCC) llamada fase  $\gamma$  obteniendo, en efecto, una aleación ( $\beta + \gamma$ )-TiNbTa con una mejor rigidez (ver tabla 2.2), alcanzando un módulo elástico de 49 GPa [126]. En esta tesis, para el trabajo de simulación se ha tomado como material base la aleación 57Ti-30Nb-13Ta de Chicardi et al., de acuerdo con las

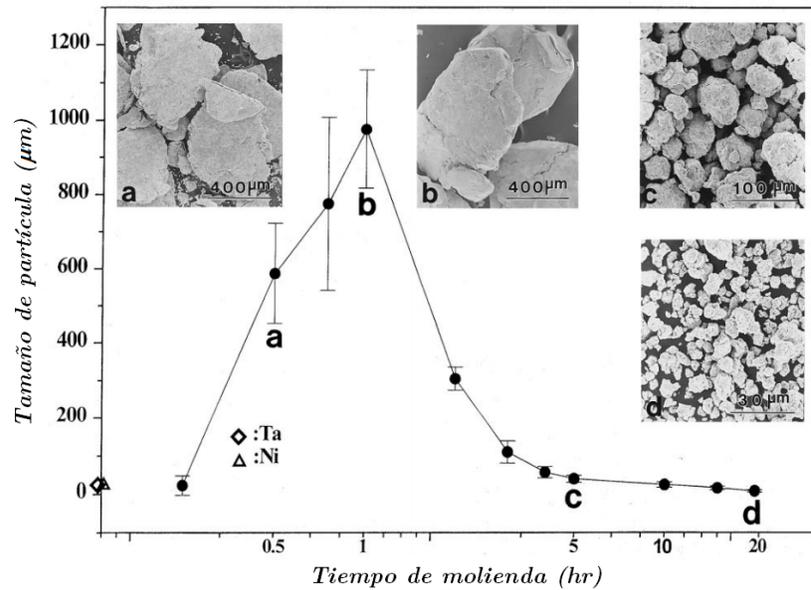


Figura 2.12: Efecto del tiempo de molienda en el tamaño de partícula para el proceso de AM [125]

propiedades mecánicas presentadas en [126] y compartidas por el Dr. Chicardi, cuyos parámetros de producción fueron optimizados por García-Garrido et al. [128].

## 2.6. Materiales Combinados

Aún cuando se han realizado diversos esfuerzos para disminuir los efectos del *stress shielding* en el uso de biomateriales a través del desarrollo de nuevas aleaciones con estructuras cristalinas menos rígidas (como BCC y FCC), en el apartado anterior se mostró que esos esfuerzos no son suficientes para poder eliminarlos por completo y equiparar sus propiedades mecánicas a las del hueso. Como también se mencionó, una ruta alternativa para disminuir la rigidez de los materiales es mediante la incorporación de porosidad.

Una forma para alcanzar una respuesta mecánica que elimine los efectos del *stress shielding*, es mediante la utilización de materiales combinados. En este trabajo, el concepto de *material combinado* se limita a un material diseñado de manera orientada, donde se combine una estructura específica con la incorporación de porosidad, para obtener el comportamiento deseado. La reducción en rigidez que es posible de obtener producto del desarrollo de aleaciones es relativamente limitada ya que, como se mencionó anteriormente, esta depende de la estructura misma de cada fase, pudiendo ser controlada solo dentro de los límites de cada fase y de su proporción. Sin embargo, el control que entrega la incorporación de porosidad es virtualmente completa, de manera que la utilización conjunta de nuevas

aleaciones de baja rigidez que incorporen cierto nivel de porosidad abre una amplia posibilidad de flexibilidad las combinaciones que permitan obtener valores requeridos para aplicaciones específicas y que, en forma adicional, permite obtener beneficios como la mejora en la respuesta biológica del material [130].

En relación con materiales combinados, Nomura et al. presentaron el desarrollo de un material compuesto en base CP-Ti con refuerzo de HA y lo combina con porosidad. En su trabajo, Nomura et al. señalan la adición y remoción de HA en la estructura porosa de CP-Ti posee un efecto menor sobre las propiedades mecánicas del material (i.e: Módulo de Young), sin embargo, dado que la HA esta compuesta por mismos minerales del tejido óseo, su presencia es incluida como una agente que se degrada en la medida que se forma nuevo tejido óseo que favorezca la adhesión en la interfaz hueso-implante. Con esto, los autores utilizaron un material combinado capaz de modificar y disminuir ligeramente su rigidez en el tiempo, luego de su implante [131]. Por otra parte, autores como Esen y Bor, Brailovski et al. y Rao et al. han explorado la fabricación de materiales combinados como espumas en base a aleaciones  $\beta$ -Ti [132–134].

En una línea similar, en este trabajo de tesis se considera el uso de una aleación de baja rigidez (i.e: Aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa de Chicardi et al. [126]), cuyas propiedades mecánicas de material denso han sido gentilmente compartidas por le Dr. Chicardi, en combinación con la incorporación de porosidad controlada para modelar e investigar su comportamiento mecánico.

## 2.7. Materiales Funcionalmente Dirigidos

Los Materiales Funcionalmente Dirigidos (MFD) corresponden a una subclase de Materiales Dirigidos (MD) en los cuales su composición y/o estructura varían gradualmente sobre el volumen, resultando en un cambio en sus propiedades. Aunque los MFD artificiales fueron inicialmente desarrollados como barreras térmicas para estructura aeroespaciales [135], este tipo de materiales tiene aplicaciones en diversos campos, desde componentes electrónicos hasta aplicaciones aeroespaciales y, en especial, biomateriales [136]. Así mismo, si bien los MFD han sido de gran interés en estudio a partir de la década de 1980, su origen está bien establecido en la naturaleza, como por ejemplo, en la estructura de plantas e incluso en huesos y dientes [137].

En la naturaleza, la adaptación para soportar cargas que deriva en una estructura funcionalmente dirigida se muestra en tres categorías. (i) Mediante una variación de la microestructura, (ii) mediante el cambio de forma o el tamaño del cuerpo o (iii) una combinación de las dos categorías anteriores. En la figura 2.13 se muestran ejemplos de estos tres tipos de materiales funcionalmente dirigidos en la

naturaleza.

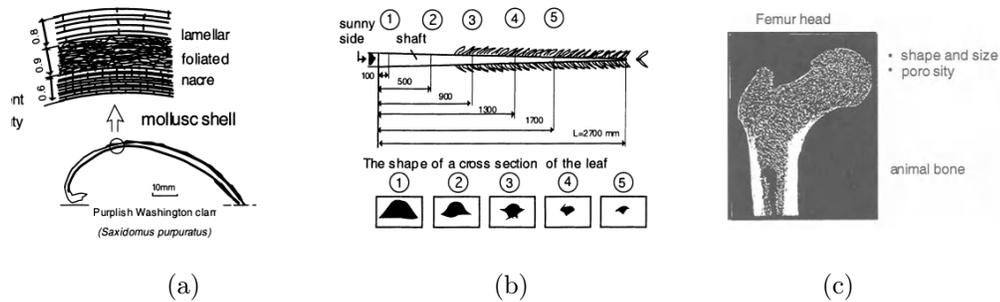


Figura 2.13: Diferentes tipos de materiales funcionalmente dirigidos en la naturaleza según: (a) Variación de la estructura, (b) variación de la forma y (c) combinación de ambas [136]

En relación a los MFD artificiales, si bien su clasificación es similar, existen tres tipos, dependiendo si la variación espacial está asociada a:

- (a) **Composición:** Se produce un cambio suave de la composición al interior del volumen del material, con una variación dinámica de la proporción de los diferentes componentes con la intención de producir una integración continua de las estructuras y así variar las propiedades.
- (b) **Microestructura:** De forma similar al caso anterior, para obtener un MFD con variación de microestructura se ajustan los parámetros de fabricación con el objetivo de tener un cambio espacial en la estructura cristalina del material, manteniendo un único componente.
- (c) **Porosidad:** La densidad relativa con que se produce el material se ajusta y varía al interior del volumen de material generado. Normalmente también en base a un único componente, ya sea metálico, no metálico o aleación.

Esta forma de clasificación es ejemplificada en la figura 2.14.

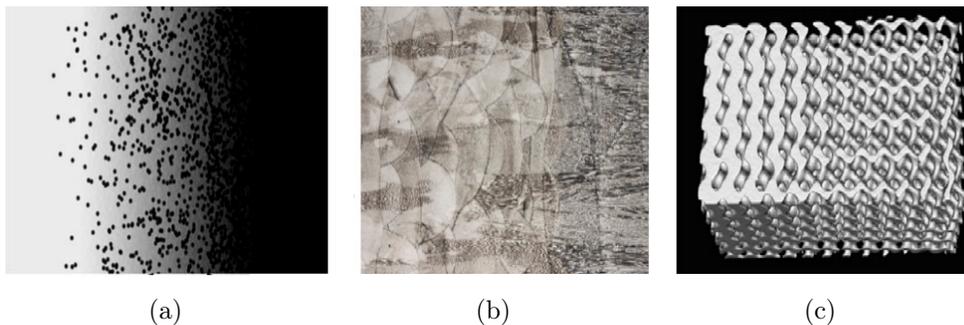


Figura 2.14: Clasificación de MFD artificiales de acuerdo a variación basada en (a) composición, (b) microestructura y (c) porosidad Mahmoud y Elbestawi [138]

En general, la forma de obtener este tipo de materiales varía en función de la ruta específica de fabricación, sin embargo, suele ser un factor común la fabricación secuencial. En la figura 2.15 se muestra un esquema típico de fabricación de un MFD mediante pulvimetalurgia, donde se introduce una transición gradual entre una material A y un material B entre los extremos de un cilindro.

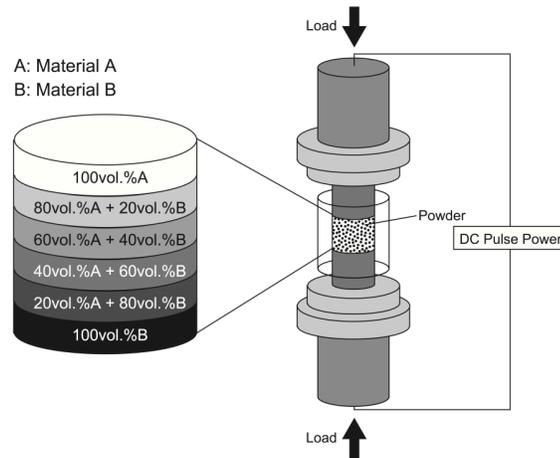


Figura 2.15: Ejemplo esquema de fabricación de un material funcionalmente dirigido por pulvimetalurgia [139])

Autores como [Sola et al.](#) han realizado una revisión exhaustiva en relación a métodos para la fabricación de MFD con aplicación biomédica [140]. Una de las rutas de fabricación de MFD con porosidad funcionalmente dirigida es el método de *Freeze Casting*, sin embargo, este método posee desventajas respecto de la microestructura generada, ya que se obtienen poros elongados en dirección del gradiente [141–143]. Mientras que las rutas de fabricación asociada a la MA permiten tener un control muy preciso sobre el tipo y variación de la microestructura resultante para obtener porosidades gradientes (o con variación continua), como se mencionó anteriormente, estas rutas de fabricación suelen requerir la definición de una celda unitaria que es replicada en forma de grilla en las diferentes direcciones, exhibiendo una tendencia a formar planos de cizalle [138, 144–146]. Siguiendo una ruta diferente, [Jiang et al.](#) fabricaron un material compuesto de Ti-Mg a partir de alambres de CP-Ti e infiltración de Mg fundido, para formar cilindros con un centro macizo de Ti-Mg y bordes exteriores porosos de Ti, donde los autores reportan un comportamiento mecánico cuya rigidez es compatible con la del material óseo [147]. Adicionalmente, este último compuesto cuenta con el beneficio adicional del potencial efecto antiinflamatorio del Mg [148], sin embargo, esta ruta de fabricación requiere de una etapa de baño ácido para producir la capa porosa exterior, volviéndola inapropiada para un mayor control de la direccionalidad del gradiente.

Por otra parte, como la pulvimetalurgia de espaciadores posee una ventaja por sobre los otros métodos de fabricación en cuanto a su facilidad y escalabilidad [149, 150], varios investigadores han abordado

la extensión de esta técnica para su aplicación en la fabricación de espumas funcionalmente dirigidas. Entre ellos, se destaca el trabajo de [Thieme et al.](#) y [Nazari et al.](#), quienes desarrollaron cilindros con porosidad dirigida ajustando el tamaño de las partículas espaciadores en cada capa [151, 152]. En una línea similar, [Trueba et al.](#) desarrollaron un dispositivo para la fabricación de espumas con porosidad dirigida en forma radial [153] y posteriormente en forma axial [154].

Los beneficios de contar con dispositivos ortopédicos que cuenten con estructuras especializadas en base al uso de materiales combinados es tal que en la última década ya se han comenzado a observar publicaciones asociadas al diseño final de este tipo de dispositivos. Ejemplos de ello es la incorporación de cubiertas funcionalmente dirigida en el diseño de prótesis de cadera [155], la incorporación de porosidad axialmente dirigida en el vástago de una prótesis de cadera de CrCo [156] y la incorporación de porosidad funcionalmente dirigida en la zona central del vástago de una prótesis de cadera titanio fabricada mediante MA [157].

# Capítulo 3

## Marco Teórico

En este capítulo se abordan los aspectos teóricos que sustentan la metodología de trabajo utilizada en este trabajo. Estos aspectos más fundamentales corresponden a la teoría del medio continuo que describe el comportamiento mecánico de sólidos y fluidos en una escala definida y la teoría de homogeneización, que permite relacionar los comportamientos mecánicos de los materiales en diferentes escalas micro y macroscópicas.

### 3.1. Teoría del Medio Continuo

La mecánica del medio continuo se ocupa del comportamiento mecánico de sólidos y fluidos en una escala macroscópica, ignorando la naturaleza discreta de la materia mediante un considerando que la materia tiene una distribución uniforme en regiones del espacio. Así, es posible definir cantidades como densidad, desplazamiento y velocidad como funciones continuas (o localmente continuas) de la posición [158].

#### 3.1.1. Esfuerzo y Deformación

##### Cinemática del medio continuo

El movimiento de una partícula típica  $P$  perteneciente a un medio continuo es descrito por su vector de posición  $\mathbf{x}$ , respecto de algún sistema de referencias. Este vector es una función tanto de la posición inicial de la partícula,  $\mathbf{x}$ , como del tiempo,  $t$ . En notación por componentes, se tiene:

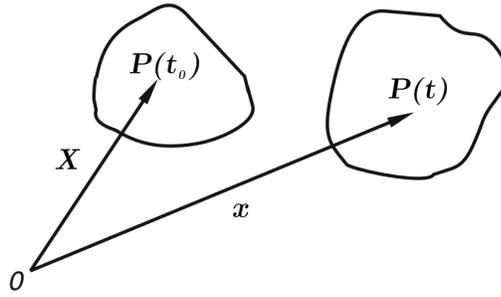


Figura 3.1: Movimiento de una partícula típica  $P$  entre los tiempos  $t_0$  y  $t$  [159]

$$x_i(t) = x_i(X_j, t). \quad (3.1)$$

Esta es conocida como la *descripción material* del sistema, la que a su vez puede ser descrita mediante una transformación

$$x_i = \Psi_{ij} X_j, \quad (3.2)$$

donde  $\Psi_{ij}$  es conocido como la función de deformación la cual debe ser biyectiva, con  $\det(\nabla\Psi) > 0$ . Lo anterior permite asegurar que la transformación  $\Psi$  sea admisible ya que, además de ser invertible, es continua y previene el colapso de un punto material.

Así mismo, se definen las derivadas de la posición en descripción material por:

$$\begin{aligned} v_i &= \frac{D\mathbf{x}}{Dt} = \frac{\partial x_i}{\partial t} \\ a_i &= \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Las expresiones de la velocidad y aceleración de la ecuación 3.3 corresponden a la primera y segunda *derivada material* de la posición. Luego, el desplazamiento,  $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$ , que experimenta la partícula durante el periodo de tiempo típico  $[t_0, t)$  está definido por la diferencia de posiciones entre el instante de tiempo final  $t$  y el instante de tiempo inicial  $t_0$ , como:

$$u_i = x_i - X_i, \quad (3.4)$$

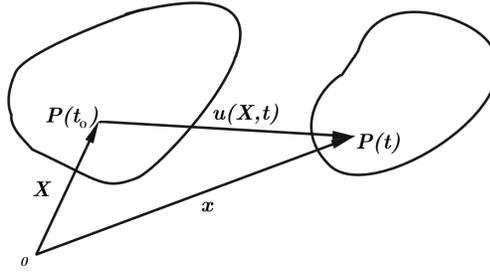


Figura 3.2: Desplazamiento  $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = u_i$  de una partícula típica  $P$  entre los instantes de tiempo inicial  $t_0$  y actual  $t$  [159]

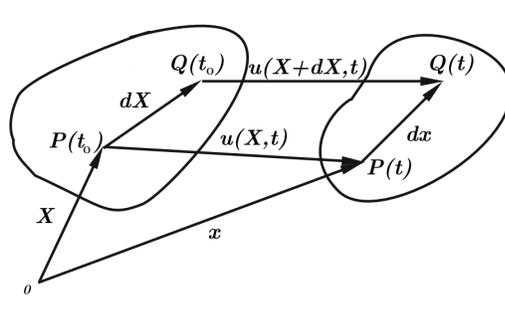


Figura 3.3: Movimiento relativo entre dos partículas típicas  $P$  y  $Q$  entre el tiempo inicial  $t_0$  y el tiempo actual  $t$  [159]

a partir de lo que se define el *campo de desplazamientos* al interior del medio continuo. Luego, la distancia relativa,  $d\mathbf{x}$ , entre dos puntos próximos  $P_{t_0}$  y  $Q_{t_0}$ , originalmente separados por un vector  $d\mathbf{X}$ , es definido como

$$\begin{aligned} dx_i &= dX_i + u_i(X_j + dX_j) - u_i(X_j) \\ &= dX_i + \nabla u_{ij} dX_j, \end{aligned} \quad (3.5)$$

donde  $\nabla u_{ij}$  es conocido como el *tensor gradiente de desplazamiento*, definido por:

$$\nabla u_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial X_j}. \quad (3.6)$$

Luego, la ecuación 3.5, se puede reescribir como:

$$\begin{aligned}
dx_i &= (\delta_{ij} + \nabla u_{ij})dX_j \\
&= F_{ij}dX_j,
\end{aligned} \tag{3.7}$$

donde  $F_{ij} = \delta_{ij} + \nabla u_{ij}$  es el tensor *gradiente de deformación* y  $\delta_{ij}$  corresponde a las componentes del tensor identidad dadas por el *delta de Kronecker*. A partir del tensor gradiente de deformación, con la función que cuantifica el cambio de la unidad de longitud en cada una de las direcciones producto del movimiento, se define la longitud de  $dx$  en el tiempo actual,  $ds$ , mediante el producto interior:

$$\begin{aligned}
ds^2 &= dx_k dx_k \\
&= (F_{ki} X_i)(F_{kj} X_j) \\
&= X_i F_{ik} F_{kj} X_j \\
&= X_i C_{ij} X_j.
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Donde  $C_{ij} = F_{ji} F_{ij}$  es el *tensor de deformación derecho de Cauchy-Green*. De lo anterior, es evidente que en el caso en que  $C_{ij} = \delta_{ij}$ , el movimiento corresponde a un desplazamiento de cuerpo rígido ya que  $ds^2 = dS^2$ . Así mismo, a partir del tensor de deformación de Cauchy-Green se tiene:

$$\begin{aligned}
C_{ij} &= F_{ji} F_{ij} = (\delta_{ji} + \nabla u_{ij})(\delta_{ij} + \nabla u_{ij}) \\
&= \delta_{ij} + (\nabla u_{ji})(\nabla u_{ij}) + \nabla u_{ij} + \nabla u_{ji}.
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Definiendo el *tensor de deformación de Lagrange* mediante

$$E_{ij}^* = \frac{1}{2}(\nabla u_{ij} + \nabla u_{ji} + (\nabla u_{ji})(\nabla u_{ij})), \tag{3.10}$$

se tiene que  $C_{ij} = \delta_{ij} + 2E_{ij}^*$ . Luego, bajo la hipótesis de pequeñas deformaciones, las componentes del tensor gradiente de desplazamientos,  $\nabla u_{ij}$ , son pequeñas, por cuanto los términos de segundo orden,  $\nabla u_{ij} \nabla u_{ji}$  pueden ser despreciados. Con esto, se define el *tensor de deformación infinitesimal*:

$$E = \frac{1}{2}(\nabla u_{ij} + \nabla u_{ji}), \tag{3.11}$$

como la parte simétrica del tensor gradiente de desplazamientos. Esto es:

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} \right). \quad (3.12)$$

Para el caso en que se tiene un campo de deformaciones  $E(\mathbf{X}, t)$  dado, no siempre es posible encontrar un campo de desplazamientos  $u(\mathbf{X}, t)$  tal que  $E(\mathbf{X}, t)$  sea su campo de deformación infinitesimal. Para que el problema anterior tenga solución, el campo de deformación infinitesimal debe cumplir con las denominadas *ecuaciones de compatibilidad*. Este sistema de ecuaciones involucra la solución de un sistema de ecuaciones formado a partir de las segundas derivadas del campo de deformación infinitesimal. Un sistema de 36 ecuaciones y 30 derivadas incógnitas diferentes. Luego, en las 6 ecuaciones donde no intervienen las terceras derivadas,  $\partial^3 u_i / \partial X_j \partial X_k \partial X_l$ , pero si las segundas derivadas  $\partial^2 E_{ij} / \partial X_k \partial X_l$  se tiene:

$$\frac{\partial^2 E_{ij}}{\partial X_k \partial X_l} + \frac{\partial^2 E_{kl}}{\partial X_i \partial X_j} - \frac{\partial^2 E_{ik}}{\partial X_j \partial X_l} - \frac{\partial^2 E_{jl}}{\partial X_i \partial X_k} = 0. \quad (3.13)$$

El sistema de ecuaciones anterior se conoce como las ecuaciones de compatibilidad para el tensor de deformación infinitesimal y asegura que dado un campo de deformación infinitesimal,  $E(\mathbf{X}, t)$ , exista un campo de desplazamientos,  $u(\mathbf{X}, t)$  tal que  $E$  sea su tensor de deformación infinitesimal.

### Esfuerzo y Equilibrio

Considerando un cuerpo arbitrario definido por un medio continuo sujeto a una sistema de fuerzas externo en equilibrio, como el mostrado en la figura 3.4, y que este cuerpo es intersectado por un plano arbitrario que lo divide en dos mediante el plano  $S$  con vector normal  $\mathbf{n}$ . La condición de equilibrio requiere que cada una de las partes mantiene su equilibrio, por cuanto, sobre la superficie de contacto,  $S$ , entre ambas porciones existe una distribución de fuerza interna que asegura esta condición.

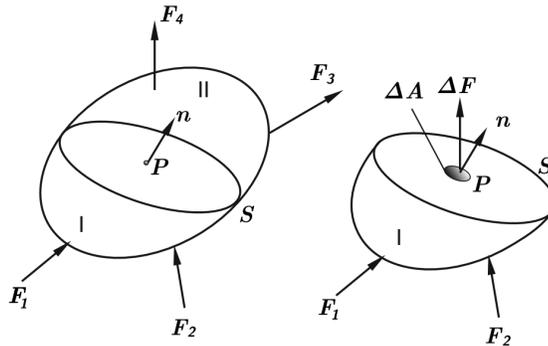


Figura 3.4: Equilibrio de un cuerpo arbitrario definido por un medio continuo [159]

Luego, sobre cada elemento  $\Delta A$  de la superficie  $\mathbf{S}$ , existe una fuerza  $\Delta \mathbf{F}$ . Se define el vector de esfuerzos,  $\mathbf{t}_n$ , como la relación  $\Delta \mathbf{F}/\Delta A$ , en el límite cuando  $\Delta A$  tiende a cero, esto es:

$$t_{(n)i} = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta F_i}{\Delta A}. \quad (3.14)$$

En forma recíproca, sobre la superficie complementaria,  $\mathbf{S}'$ , con vector normal  $-n_i$ , actúa una fuerza recíproca con lo que  $t_{(-n)i} = -t_{(n)i}$ . Generalizando el desarrollo anterior a una superficie arbitraria que pasa por el punto P, se define el vector de esfuerzo de Cauchy, en función de la fuerza resultante  $\Delta \mathbf{F}$  sobre una pequeña superficie  $\Delta \mathbf{S}$  como:

$$t_i = \lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta S}. \quad (3.15)$$

Luego, mediante el principio de esfuerzo de Cauchy, el vector de esfuerzo de la ecuación 3.15 es dependiente tanto de la posición,  $X_i$ , como del tiempo,  $t$ , como de la dirección del vector normal a la superficie,  $n_i$ , en cual es proyectado. Con lo anterior, el vector de esfuerzo puede ser escrito mediante la transformación:

$$t_i = T_{ij}n_j, \quad (3.16)$$

Considerando un pequeño tetraedro con vértice en un punto P y tres de los lados tales que sus vectores normales exteriores quedan definidos por los vectores unitarios  $-e_i$ , como se muestra en la figura 3.5.

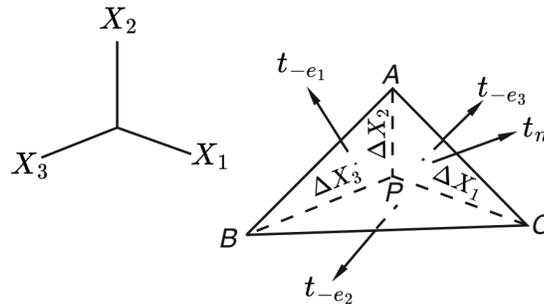


Figura 3.5: Equilibrio de un tetraedro en el punto típico P [159]

Del diagrama de sólido libre del tetraedro de la figura 3.5 y considerando que el plano inclinado posee vector unitario  $\mathbf{n} = n_i e_i$ , las superficies en los diferentes planos quedan definidos por  $\Delta A_i = n_i \Delta A_n$ , de manera que la ecuación de equilibrio de Newton para el tetraedro queda definida en forma explícita por:

$$\sum \mathbf{F} = \mathbf{t}_{\mathbf{e}_1} n_1 \mathbf{e}_1 \Delta A_n + \mathbf{t}_{\mathbf{e}_2} n_2 \mathbf{e}_2 \Delta A_n + \mathbf{t}_{\mathbf{e}_3} n_3 \mathbf{e}_3 \Delta A_n + \mathbf{t}_{\mathbf{n}} = 0. \quad (3.17)$$

Luego, simplificando la expresión anterior se obtiene:

$$\mathbf{t}_{\mathbf{n}} = \mathbf{t}_{\mathbf{e}_1} n_1 + \mathbf{t}_{\mathbf{e}_2} n_2 + \mathbf{t}_{\mathbf{e}_3} n_3. \quad (3.18)$$

La expresión anterior, puede ser reescrita de manera compacta como:

$$t_{e_i} = T_{mi} e_i, \quad (3.19)$$

cuya forma es equivalente a la transformación de la ecuación 3.15. A partir de lo anterior es evidente que las componentes de los diferentes vectores de esfuerzo están dados por las componentes del tensor de esfuerzo de Cauchy ya que:

$$(t_{e_j})_i n_i = T_{ji} n_j n_i = T_{ji}, \quad (3.20)$$

donde la transformación  $T_{ij}$  es un tensor de segundo orden llamado *tensor de esfuerzo de Cauchy* simbolizado por  $\sigma_{ij}$ . Finalmente, el estado de esfuerzo en un punto arbitrario P, queda definido por el tensor de segundo orden de Cauchy,  $\sigma_{ij}$ , cuyas componentes cartesianas quedan definidas en función del las dos direcciones asociadas,  $e_i$  y  $e_j$ , de acuerdo con la figura 3.6

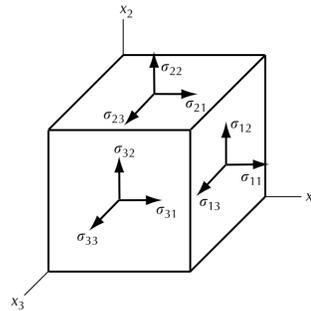


Figura 3.6: Tensor de esfuerzo para un punto típico P [160])

### 3.1.2. Leyes de Conservación

#### Conservación de Masa

Para cualquier medio continuo que en un instante de tiempo inicial típico,  $t_0$ , utiliza un volumen,  $V$ , es inmediato que su masa total es cuantificada por:

$$m_0 = \int \rho_0 dV, \quad (3.21)$$

donde  $\rho_0 = \rho(x, 0)$  corresponde a su densidad inicial, como función de la posición de cada partícula que lo contiene. Luego, en un instante de tiempo siguiente,  $t$ , el volumen,  $v$  utilizado por las mismas partículas de manera que instantáneamente su masa será:

$$m = \int \rho dv. \quad (3.22)$$

Naturalmente, al considerar el mismo conjunto de partículas en ambos instantes de tiempos se requiere que el cambio en la masa sea nulo, es decir, se conserve. En términos de las expresiones anteriores se requiere que  $\frac{dm}{dt} = 0$ . Recordando que el elemento de volumen  $dV$  se transforma como  $dv = JdV$ , donde,  $J = \det(\mathbf{F})$ , se tiene:

$$m = \int \rho J dV, \quad (3.23)$$

luego, como  $m_0 = m$ , para que exista conservación de la masa se requiere que la densidad  $\rho = \rho(x, t)$  se transforme como:

$$\rho = J\rho_0. \quad (3.24)$$

La ecuación 3.24 se conoce como la formulación material de conservación de masa. Esta ecuación posee una formulación equivalente bajo la descripción espacial dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial_i}(\rho v_i) = 0. \quad (3.25)$$

La ecuación 3.25 es válida para cualquier elemento de volumen diferencial  $dv$ .

### Conservación de Momentum Lineal

Para un instante de tiempo típico,  $t$ , un dominio,  $\Omega$ , que ocupa un volumen,  $V$ , posee un momentum lineal dado por:

$$p_i = \int_{\Omega} \rho v_i dv. \quad (3.26)$$

Por otro lado, la fuerza neta,  $f$  que actúa sobre el dominio,  $\Omega$  están definidas tanto por las fuerzas de cuerpo,  $b_i$  como por las fuerzas de superficie  $t_i = \sigma_{ij}n_j$ , esto es:

$$\begin{aligned} f_i &= \int_{\Omega} \rho b_i dv + \int_{\partial\Omega} t_i dS \\ &= \int_{\Omega} \rho b_i dv + \int_{\Omega} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} dv. \end{aligned} \quad (3.27)$$

El principio de conservación de momentum lineal establece que, su razón de cambio,  $dp_i/dt$ , es igual a la fuerza neta,  $f_i$ , por cuanto se debe cumplir:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho v_i dv = \int_{\Omega} \rho b_i dv + \int_{\Omega} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} dv, \quad (3.28)$$

la que puede ser reescrita de la forma:

$$\int_{\Omega} \left( \rho \frac{dv_i}{dt} - \rho b_i - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \right) dv = 0. \quad (3.29)$$

La ecuación 3.29 debe ser válida para cualquier dominio,  $\Omega$ , lo que requiere que el integrando sea nulo, esto es:

$$\rho \frac{dv_i}{dt} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho b_i. \quad (3.30)$$

La ecuación 3.30 se conoce como la formulación local de la ecuación de Cauchy.

Considerando una porción arbitraria de un medio continuo que en un instante de tiempo  $t$  utiliza un volumen  $v$  cuyas partículas se ubican en una posición  $x_i$ , el principio de conservación de momentum lineal establece que la razón de cambio del momentum lineal de un cuerpo es igual a la suma de fuerzas

que actúan sobre este. Esto es:

$$\frac{d}{dt} \int \rho v_i dV = \int \sigma_{ji} n_j dS + \int \rho b_i dv, \quad (3.31)$$

donde  $\sigma_{ji} n_j$  son las fuerzas de superficie evaluadas mediante el vector de esfuerzos de Cauchy y  $b_i$  corresponde a las fuerzas de cuerpo. Luego, por virtud del teorema de divergencia de Gauss se tiene x:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int \rho v_i dv &= \int \left( \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} + b_i \right) dv \\ \int \left( \frac{d}{dt} (\rho v_i) - \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} - b_i \right) dv &= 0, \end{aligned} \quad (3.32)$$

donde la ecuación 3.32 se cumple para cualquier volumen arbitrario  $V$ . Esta ecuación corresponde a la formulación global de la ecuación de Cauchy, la cual es equivalente a la ecuación 3.30.

### Conservación de Momentum Angular

El principio de conservación de momentum angular establece que la razón de cambio de este momentum angular es igual al momento de las fuerzas que actúan sobre el volumen, esto es:

$$\frac{d}{dt} \int \epsilon_{ijk} x_j \rho v_k dv = \int \epsilon_{ijk} x_j \rho b_k dv + \int \epsilon_{ijk} x_j \sigma_{lk} n_l ds \quad (3.33)$$

donde  $\epsilon_{ijk}$  son las componentes del tensor de Levi-Civita y nuevamente  $b_k$  y  $\sigma_{ij} n_i$  representan las fuerzas de cuerpo sobre el volumen  $v$  y las fuerzas de superficie en la superficie  $s$ , respectivamente. Luego, por virtud del teorema de divergencia de Gauss, de la ecuación 3.33 se tiene:

$$\begin{aligned} \int \epsilon_{ijk} x_j \sigma_{lk} n_l ds &= \int \frac{\partial}{\partial x_l} (\epsilon_{ijk} x_j \sigma_{kl}) dv \\ &= \int \epsilon_{jkl} x_j \sigma_{kl} dv + \int \epsilon_{ijk} \sigma_{jk} dv \end{aligned} \quad (3.34)$$

Con lo anterior, la ecuación 3.33 se puede reescribir como:

$$\frac{d}{dt} \int \epsilon_{ijk} x_j \rho v_k dv = \int \epsilon_{ijk} x_j (\rho b_k + \frac{\partial \sigma_{lk}}{\partial x_l}) dV + \int \epsilon_{ijk} \sigma_{jk} dv \quad (3.35)$$

o bien:

$$\int \epsilon_{ijk} x_j \left[ \frac{d}{dt}(\rho v_k) - \rho b_k - \frac{\partial \sigma_{lk}}{\partial x_l} \right] dv - \int \epsilon_{ijk} \sigma_{jk} dv = 0 \quad (3.36)$$

Como ya se mostró en la ecuación 3.32, el primer integrando es idénticamente nulo, ya que corresponde a la ecuación de Cauchy, quedando sólo el segundo integrando. Luego como la ecuación 3.36 se debe cumplir para cualquier volumen arbitrario  $v$ , es necesario que  $\epsilon_{ijk} \sigma_{kl} = 0$ . Esto es:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} - \sigma_{ji} &= 0 \\ \sigma_{ij} &= \sigma_{ji}. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Con lo anterior, se muestra que el tensor de esfuerzo de Cauchy es simétrico bajo cualquier condición.

Debido a que en ciertas situaciones es deseable contar con una medida para el esfuerzo en base a la configuración de referencia en tiempo inicial  $t_0$ , se requiere una alternativa para el tensor de esfuerzo de Cauchy,  $\sigma_{ij}$ . Esta alternativa corresponde a los tensores de Piola-Kirchhoff. Considerando el diferencial de fuerza,  $df_i$  que actúa en un tiempo  $t$ , sobre un diferencial de área,  $da$ , dado por:

$$df_i = t_i da = \sigma_{ji} n_j da = \sigma_{ij} da_j \quad (3.38)$$

donde  $da_i = da n_i$ . Recordando que un elemento diferencial de area se transforma entre la configuración actual y la configuración de referencia mediante:

$$da_i = J \frac{\partial X_R}{\partial x_i} dA_R \quad (3.39)$$

se tiene:

$$df_i = \sigma_{ji} J \frac{\partial X_R}{\partial x_i} dA_R. \quad (3.40)$$

Luego, se define el *primer tensor de esfuerzo de Piola-Kirchhoff* (PK1) como:

$$T_{Ri} = J \frac{\partial X_R}{\partial x_i} \sigma_{ji}, \quad (3.41)$$

o en su forma matricial  $\mathbf{T} = J\mathbf{F}^{-1}\sigma$ , donde  $F_{Ri}^{-1} = \partial X_R/\partial x_i$  es el tensor gradiente de deformación inverso. Con lo anterior, se establece que el tensor PK1 permite establecer el vector de esfuerzo  $dp_i$  en términos del diferencial de área en la configuración de referencia como  $df_i = T_{Ri}N_R dA$ . A raíz de lo anterior, el tensor PK1 también recibe el nombre de tensor de esfuerzo lagrangiano o *nominal*. El vector de fuerza  $dF_i = T_{Ri}N_R$  posee la misma dirección que  $df_i$  pero con una magnitud diferente. Adicionalmente, a diferencia del tensor de esfuerzo de Cauchy, debido a que  $F_{Ri}$  no es estrictamente simétrico, el PK1 tampoco es estrictamente simétrico. Para evitar problemas en la utilización del PK1 en la formulación de relaciones constitutivas debido a su falta de simetría, se introduce la definición del segundo tensor de Piola-Kichhhoff (PK2). Considerando la introducción de una fuerza ficticia  $d\tilde{F}_R$  en la configuración de referencia correspondiente a la transformación del vector de fuerza  $df_i$  como:

$$d\tilde{F}_R = \frac{\partial X_R}{\partial x_i} df_i. \quad (3.42)$$

Incorporando la definición del PK1 de la ecuación 3.41, se tiene:

$$\begin{aligned} d\tilde{F}_R &= \frac{\partial X_R}{\partial x_i} \sigma_{ji} da_j \\ &= \frac{\partial X_R}{\partial x_i} \sigma_{ji} J \frac{X_S}{\partial x_i} dA_S. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Luego, las componentes del PK2 quedan definidas por:

$$P_{RS} = \frac{\partial X_R}{\partial x_i} \frac{X_S}{\partial x_j} J \sigma_{ij}, \quad (3.44)$$

o en forma matricial por  $\mathbf{P} = J\mathbf{F}^{-T}\sigma\mathbf{F}^T$ . A partir de lo anterior es claro que el PK2, definido en la ecuación 3.44, si corresponde a un tensor de orden 2 simétrico definido en el sistema de coordenadas para la configuración de referencia.

### 3.1.3. Elasticidad Lineal

Considerando un cuerpo arbitrario de volumen  $V$ , la ecuación de equilibrio de Cauchy (ecuación 3.31) que describe la conservación de momentum lineal puede ser descrita desde una perspectiva local por:

$$\rho \frac{dv_i}{dt} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho b_i, \quad (3.45)$$

donde  $b_i$  corresponde a las fuerzas de cuerpo por unidad de volumen. La ecuación 3.45 es válida dentro

de todos los puntos del volumen, como se mostro en la ecuación 3.31. Adicionalmente, considerando el campo de deformaciones dado por el tensor de deformación infinitesimal,  $E$ , (ecuación 3.12) y la ecuación de conservación de masa forman un sistema de ecuaciones abierto. Para cerrar el sistema de ecuaciones anterior, se debe considerar la incorporación de una ecuación adicional que relacionen las componente del tensor de esfuerzo,  $\sigma_{ij}$  con las componentes del tensor de deformación infinitesimal,  $E_{ij}$ . Esta ecuación adicional se conoce como *relación constitutiva*.

Asumiendo la consideración de la hipótesis de pequeñas deformaciones (i.e: la validez del tensor de deformación infinitesimal como cuantificador de la deformación), una relación lineal entre las el tensor de esfuerzo y el tensor de deformación requiere que:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}E_{kl}. \quad (3.46)$$

Luego, condición de balance de momentum angular, que establece la simetría de las componentes del tensor de esfuerzo obligan a que, en la relación anterior se cumpla:

$$C_{ijkl} = C_{jikl}. \quad (3.47)$$

Por otro lado, dado que el tensor de deformación infinitesimal es igual la parte simétrica del tensor gradiente de deformación, obliga a que también se cumpla:

$$C_{ijkl} = C_{ijlk}. \quad (3.48)$$

Adicionalmente, considerando un sólido elástico, es decir, una vez removida la carga, el material recupera su configuración original, requiere que el sistema sea conservativo. A consecuencia de lo anterior, es necesario que exista una función potencial cuya derivada respecto de la deformación sea igual al esfuerzo, esto es:

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial U}{\partial E_{ij}}, \quad (3.49)$$

y con con esto, derivando la expresión anterior respecto de las otras componentes del tensor de formación, se obtiene:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial E_m} = \frac{\partial}{\partial E_{mn}} (C_{ijkl} E_{kl}) = C_{ijkl} \underbrace{\frac{\partial E_{kl}}{E_{mn}}}_{\delta_{km} \delta_{ln}} = C_{ijmn}, \quad (3.50)$$

mientras que, por otro lado, se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial E_{mn}} &= \frac{\partial U}{\partial E_{mn}} = \frac{\partial^2 U}{\partial E_{mn} \partial E_{ij}} \\ &= \frac{\partial U}{\partial E_{il} \partial E_{mn}} = \frac{\partial \sigma_{mn}}{\partial E_{ij}}. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Como consecuencia de lo anterior, se tiene:

$$C_{ijkl} = C_{klij}. \quad (3.52)$$

Con esto, las 3 simetrías antes mostrados establecen la necesidad de que de las 81 componentes del tensor constitutivo de orden 4,  $C_{ijkl}$ , solo 21 sean independientes. Esta corresponde a la relación constitutiva para un sólido elástico lineal general.

Luego, para el caso particular de un sólido elástico lineal, para que este sea isotropico, las componente del tensor constitutivo,  $C_{ijkl}$ , deben corresponder a una suma de todas las posibles combinaciones de deltas de Kronecker, esto es:

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu \delta_{ik} \delta_{jl} + \eta \delta_{il} \delta_{jk}, \quad (3.53)$$

lo que se cumple si y sólo si  $\mu = \eta$ , debido a las simetrías de  $C_{ijkl}$ . Con lo anterior, la relación constitutiva elástica lineal e isotrópica queda descrita mediante 2 parámetros de la forma:

$$\sigma_{ij} = \underbrace{(\lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu [\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}])}_{C_{ijkl}} E_{kl}, \quad (3.54)$$

donde los parámetros  $\lambda$  y  $\mu$  son conocidos como las constantes de Lammé. Finalmente, es sabido que existe una relación directa entre las constantes de Lammé y las constantes elásticas ingenieriles ( $E, \nu, G$ ), mediante la relación:

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \\ \mu &= G = \frac{E}{2(1+\nu)},\end{aligned}\tag{3.55}$$

o en su forma inversa:

$$\begin{aligned}E &= \frac{\mu(3\lambda+2\mu)}{\lambda+\mu} \\ \nu &= \frac{\lambda}{2(\lambda+\mu)} \\ G &= \mu.\end{aligned}\tag{3.56}$$

Luego, para un sólido elástico lineal isotrópico las componentes no nulas del tensor constitutivo,  $C_{ijkl}$ , pueden ser descritas en función de las constantes elásticas ingenieriles como:

$$\begin{aligned}C_{iiii} &= \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \\ C_{iijj} &= \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \\ C_{ijij} &= \frac{E}{2(1-\nu)} = G.\end{aligned}\tag{3.57}$$

En forma adicional, se puede escribir la relación inversa, de la forma  $E_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl}$ , donde las componentes no nulas del tensor de rigidez,  $S_{ijkl}$ , quedan descritas por:

$$\begin{aligned}S_{iiii} &= \frac{1}{E} \\ S_{iijj} &= \frac{-\nu}{E} \\ S_{ijij} &= \frac{(1-\nu)}{2E} = \frac{1}{4G}.\end{aligned}\tag{3.58}$$

## 3.2. Teoría de Homogeneización

El concepto básico de homogeneización se encuentra basado en el trabajo de Sánchez-Palencia y Levy, para el estudio del comportamiento de un medio, originalmente periódico, constituido a partir de dos o más elementos con propiedades altamente disímiles. En principio, este método utiliza el método de expansión asintótica en dos escalas para encontrar las ecuaciones homogeneizadas, como también para aproximar los diferentes campos físicos como el de desplazamientos y esfuerzos, en el caso de elasticidad [161]. El propósito de la teoría de homogeneización es, entonces, el estudio de del comportamiento de un medio que permite reemplazar el medio original, altamente heterogéneo, caracterizado por fluctuaciones rápidamente oscilatorias en los campos físicos, por un medio efectivo, homogéneo, caracterizado por campos con coeficientes constantes [162].

Este problema ha sido abordado por diversos autores quienes han propuesto variadas estrategias de solución. Desde la perspectiva analítica, los intentos más primitivos para dar solución a este problema corresponde a la aplicación de la regla de mezclas. En estas aproximaciones, también conocidas como las los límites de Voigt [163] y Reuss [164], las propiedades equivalentes del material son obtenidas a través de la suposición de deformación homogénea (media aritmética) y esfuerzo homogéneo (media armónica), respectivamente. Se sabe, y está bien documentado, que estas aproximaciones imponen un límite superior e inferior, respectivamente, a las constantes elásticas equivalentes [165, 166].

En la década de 1950, el método auto-consistente de Hill, originalmente propuesto por Hershey y Kroner para cristales aglomerados, aborda el problema desde una base un problema auxiliar. En este, las propiedades equivalente del material compuesto son obtenidas mediante la solución al problema del estado de esfuerzo para una inclusión contenida en un medio infinito [167–169].

Sobre la misma base del método auto-consistente, Hashin y Shtrikman desarrollaron un una solución basada en los principios variacionales para la solución al problema elástico lineal anterior. Haciendo uso de los principios de mínima energía potencial y mínima energía potencial complementaria, Hashin y Shtrikman propusieron nuevos límites para las propiedades equivalentes de materiales compuestos [170]. Diversos investigadores han mostrado que estos límites corresponden a un conjunto de límites más estrictos a los establecidos mediante la aproximación de Voigt y Reuss [171–173].

En la década de 1970, Mori y Tanaka desarrollaron un método que permite calcular el estado de esfuerzo promedio en la matriz de un material compuesto, que contiene inclusiones (precipitados) uniformemente distribuidas [174]. Sobre esta base, Benveniste ha realizado una extensión para su aplicación en el calculo de las propiedades mecánicas equivalentes de materiales compuestos, bajo la aplicación de condiciones de borde uniformes tradicionales (Dirichlet y Neumann) [175].

El método de expansión asintótica se fundamenta en la suposición de que cualquier campo definido sobre un dominio puede ser descrito mediante una expansión algebraica que, al ser incorporada en las ecuaciones que gobiernan el fenómeno, permiten obtener las propiedades efectivas del material [176–179]. Un ejemplo de la aplicación de este concepto es la aproximación asintótica para el campo de desplazamientos al interior de un solido elástico, de la forma:

$$u(x) = u_0 + \delta u_1 + \delta^2 u_2 + \dots, \quad (3.59)$$

donde las funciones  $u_i = u_i(x, y = x/\delta)$  son periódicas en  $y$  con periodo  $\delta$ . Luego, considerando de forma explícita los términos hasta el orden de  $\delta$ , el tensor de deformación infinitesimal,  $\mathbf{E}$ , puede ser descrito como:

$$\begin{aligned}
E &= \frac{1}{2} [\nabla u(x) + \nabla u^T(x)] \\
&= \frac{1}{2} \left[ \sum (\nabla u_i(x) + \nabla u_i^T(x)) \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ (\nabla u_0(x) + \nabla u_0^T(x)) + (\nabla u_1(x) + \nabla u_1^T(x)) \right] + \mathcal{O}(\delta).
\end{aligned} \tag{3.60}$$

En la ecuación 3.60, el primer término,  $\frac{1}{2}(\nabla u_0(x) + \nabla u_0^T(x))$ , corresponde a la deformación unitaria promedio en las coordenadas macroscópicas, mientras que los siguientes términos corresponden a las deformaciones locales que fluctúan de manera periódica al interior del dominio. Adicionalmente, la cantidad de términos considerados en la expansión da origen a diferentes ordenes de aproximación [180].

Luego, el campo de esfuerzos al interior del dominio se puede representar a través de una expansión asintótica, de manera análoga a la ecuación 3.60, de la forma:

$$\begin{aligned}
\sigma &= \sigma_0 + \delta\sigma_1 + \dots + \delta^{(n-1)}\sigma_n \\
&= \sigma_0 + \delta\sigma_1 + \mathcal{O}(\delta).
\end{aligned} \tag{3.61}$$

Con lo anterior, se plantea el problema elástico equivalente, para el orden deseado, donde cada una de las funciones  $u_n$  y  $\sigma_n$  son periódicas al interior del dominio [181]. Una de las grandes desventajas del método de expansión asintótica radica en las limitaciones que deben ser impuestas al dominio, ya que este método sólo garantiza una solución rigurosa, tanto para la escala microscópica como para la escala macroscópica, cuando el dominio mismo presenta una microestructura periódica y las funciones  $u_i$  poseen el mismo periodo de la microestructura [182]. Sin embargo, permite obtener ecuaciones explícitas tanto para las propiedades macroscópicas como para los campos microscópicos locales.

Como una alternativa para superar las limitaciones de la expansión asintótica, los métodos micromecánicos plantean un enfoque centrado en el análisis de una microestructura compleja, cuyo comportamiento es exportado a las escalas superiores. Dentro de estos métodos se pueden diferenciar entre los los métodos de relación micro-macro directa y los métodos de celda unitaria. Mientras los primeros se centran en subdividir el dominio de microestructura explícita en pequeñas porciones las que son analizadas una a una, los métodos de celda unitaria se basan en la principio de repetibilidad (para microestructuras simples o periódicas) o de representatividad estadística (para estructuras complejas o no periódicas).

Las espumas metálicas, y todos los materiales celulares en general, poseen una microestructura compleja

en el sentido de cómo se conforma, ya sea que cuentan con una matriz sólida donde una fracción vacía (i.e: poros) se encuentra disueltos de manera no estructurada con y sin interconexión entre ellos, como en el caso de las espumas, o bien coexisten diferentes elementos sólidos con un ordenamiento claro o no, en el caso de los materiales compuestos. Cualquiera sea el caso, en la definición de estos materiales híbridos, el concepto de *material* como un *medio* se define desde una perspectiva donde los elementos que constituyen su microestructura son indistinguibles o, al menos, la escala espacial de los elementos constituyentes es inferior a la escala de interés.

Esta situación, compartida por la mecánica del medio continuo, sugiere la existencia de un subdominio, en adelante llamado *Elemento de Volumen Representativo* (RVE), donde el comportamiento del material como un continuo se vuelve indistinguible de sus componentes. Así, este RVE que representa el rol del punto matemático del campo continuo y que aproxima la microestructura real del material. Ambos conceptos anteriores se basan en la idea de la existencia de *separación de escalas*, la cual se grafica en la figura 3.7. En esta figura, se muestra la existencia de una escala espacial,  $l$ , asociada a la microestructura explícita, una escala intermedia,  $a$ , asociada al RVE y una tercera escala mayor,  $L$ , de tipo macroscópica [181].

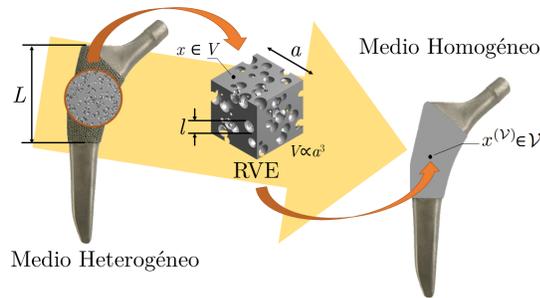


Figura 3.7: Esquema de un medio heterogéneo representado por un medio *homogeneizado* equivalente

De esta manera, se cumple que:

$$\begin{aligned} l < a \ll L \quad \text{o bien} \\ l \ll a \ll L. \end{aligned} \tag{3.62}$$

Las inecuaciones mostradas en la ecuación 3.62 establecen el principio de separación de escalas. La primera de estas inecuaciones,  $l < a$ , corresponde a una proposición de separación débil entre la escala de la microestructura y el RVE, la cual es aplicable a microestructuras con baja diferencia entre propiedades mecánicas y estructuras relativamente ordenadas. En el caso de espumas, donde existe una gran diferencia entre las propiedades mecánicas de la matriz y la fase vacía y, adicionalmente, se

cuenta con una distribución espacial altamente no-estructurada, es necesario establecer la proposición de separación entre escalas más fuerte, de la forma  $l \ll a$ . En consecuencia, se define el parámetro de relación entre escalas,  $\delta$ , como:

$$\delta = \frac{a}{l}. \quad (3.63)$$

Independiente del tipo de proposición para la separación entre escalas a considerar, este principio no establece ningún criterio cuantitativo específico respecto de la relación entre escalas,  $\delta$ , y, en consecuencia, para el tamaño a considerar en un RVE. Para microestructuras simples y ordenadas que exhiben simetría y periodicidad, la elección del RVE es evidente y corresponde a la celda unitaria que es replicada en las diferentes direcciones. Ejemplos de algunas celdas unitarias se muestran en la figura 3.8.

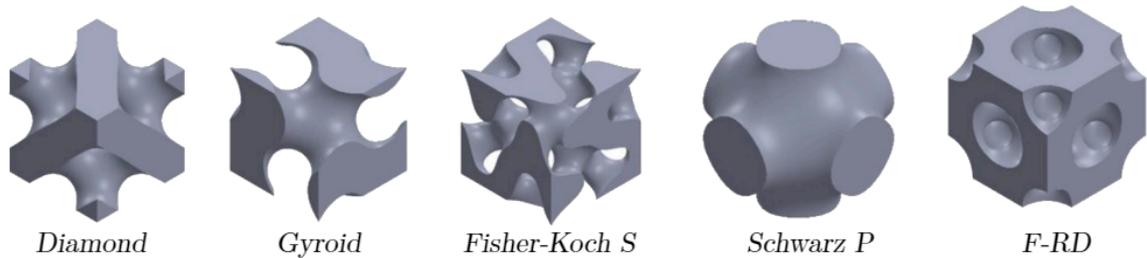


Figura 3.8: Ejemplos de diferentes tipos de celdas unitarias utilizadas para homogeneización de materiales compuestos y porosos que exhiben triple periodicidad espacial, donde sólo se muestra el volumen de una de las fases [55]

En base a lo anterior, en el marco de estructuras periódicas, diferentes métodos y aproximaciones, tanto teóricas como numéricas han sido propuestas para modelar el comportamiento mecánico de materiales compuestos y porosos. Algunos de los modelos teóricos más destacados corresponden a los modelos de Mori-Tanaka [174], Nielsen [183], Hashin [184], Ramakrishnan [80, 81] y Gibson [88]. Una ventaja de estos esquemas es que entregan expresiones con formas cerradas para la determinación de los diferentes coeficientes que constituyen el medio heterogéneo, en función de las propiedades de sus elementos constituyentes. Sin embargo, suelen ser desarrollados bajo premisas específicas, como que el medio está constituido por dos componentes con propiedades mecánicas explícitas o un análisis basado en la composición de una celda unitaria conformada por un entramado de columnas de Euler.

Por otra parte, para materiales que exhiben gran desorden en su microestructura, no es posible establecer un RVE en base a una celda unitaria y una definición más general es necesaria para ello, como una porción del medio que contenga una cantidad de heterogeneidades suficientemente extensa para ser *estadísticamente* representativo [181]. A consecuencia de la alta complejidad de los dominios a considerar bajo esta definición, el análisis mediante técnicas numéricas se convierte en la única alternativa realmente

viable para estructuras de tipo.

Se ha establecido de forma clara la influencia que tienen las condiciones de borde utilizadas en la modelación para homogeneización numérica. Mientras las condiciones de borde de estáticas uniformes (Dirichlet) establecen un límite superior para los coeficientes del tensor constitutivo elástico,  $C_{ijkl}$ , las condiciones de borde dinámicas uniformes (Neumann) establecen un límite inferior [171, 185]. Estos límites corresponden a los límites de Voigt y Reuss y se sabe que son convergentes, en la medida que el tamaño del RVE crece, sin embargo, estos límites no son necesariamente simétricos respecto de la asíntota, el mismo comportamiento convergente ha sido establecido para los límites más estrictos de Hashin y Shtrikman [181, 186, 187].

En cualquier caso, los resultados obtenidos deben ser independientes de las condiciones de borde considerada y, en consecuencia, la selección de un tamaño adecuado para el dominio, al igual que el tipo de condiciones de borde a utilizar, es de gran importancia para la obtención de resultados consistentes y adecuados, donde se evite sobreestimar, como también subestimar, los valores numéricos de los coeficientes del tensor elástico en el medio equivalente [188, 189]. Adicionalmente, el tensor elástico equivalente debe asegurar el principio de equivalencia energética de Hill-Mandel [190] que asegura que el medio homogeneizado absorbe la misma energía de deformación que el medio original, durante el proceso de deformación. A consecuencia de lo anterior, y a través del principio de trabajo virtual, se tiene que:

$$\langle \sigma \cdot \varepsilon \rangle = \langle \sigma \rangle \langle \varepsilon \rangle, \quad (3.64)$$

donde los paréntesis angulados,  $\langle \cdot \rangle$ , simbolizan el promedio sobre un volumen. La relación anterior asegura que la energía de deformación promedio de un volumen puede ser calculada a través de la multiplicación de los tensores de esfuerzo y deformación promedio evaluados sobre el mismo [191, 192]. Luego, los tensores promedio son definidos como:

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle &= \frac{1}{V} \int_V \sigma dV, \\ \langle \varepsilon \rangle &= \frac{1}{V} \int_V \varepsilon dV. \end{aligned} \quad (3.65)$$

# Capítulo 4

## Métodos Numéricos

En esta capítulo, se realiza una descripción teórica de los métodos numéricos utilizados en el desarrollo de este trabajo. Entre estos, se aborda una técnica para el análisis de sistemas sólidos granulares, como el Método de los Elementos Discretos, una para el análisis de sólidos elásticos, como el Método de los Elementos Finitos, y una para análisis de sistemas aleatorios como la Simulación de Monte Carlo.

### 4.1. Método de los Elementos Discretos

Originalmente introducido como el Método de Elementos Distintos por [Cundall y Strack](#) a fines de la década de 1970, el Método de Elementos Discretos (DEM) ha entregado una herramienta numérica para la simulación de flujos granulares, en el que la interacción entre partículas y con el entorno es modelado a través del uso de una ley de fuerza de contacto adecuada [\[194\]](#). Así, el medio granular se asume como una colección de partículas semi-rígidas regulares e irregulares cuyo movimiento se encuentra gobernado principalmente por las fuerzas de contacto existentes con las partículas vecinas [\[193, 194\]](#). Este método se encuentra basado en el uso de un esquema numérico explícito donde la interacción de las partículas, con otras y con el entorno, es monitoreada contacto a contacto y partícula a partícula. Cuando la distancia entre dos elementos es tal que entran en contacto, se da origen a un traslape permitido, cuya magnitud es pequeña en comparación al tamaño de las partículas. La magnitud de la fuerza de interacción entre dos elementos estará determinada, principalmente, por el traslape existente entre ellos [\[193\]](#).

El proceso de solución típico para el DEM consta de 3 etapas fundamentales: (i) La cuantificación de

la fuerza neta sobre cada partícula; (ii) la integración numérica de las ecuaciones de movimiento de Newton sobre cada partícula para calcular las nuevas posiciones y (iii) la identificación de los pares de contacto para el siguiente paso temporal [195].

#### 4.1.1. Cuantificación Fuerza Neta

Para su evaluación, las fuerzas internas (o de contacto) son separadas en una componente normal a la superficie de contacto y otra tangencial. Habitualmente, la fuerza de contacto es modelada mediante un sistema resorte-amortiguador para la componente normal en conjunto a un sistema de resorte-amortiguador-deslizador para la componente tangencial. La formulación más utilizada por códigos DEM para cuantificar la fuerza de contacto corresponde al modelo de Hertz-Mindlin, para combinar la elasticidad no lineal de Hertz en dirección normal con el modelo de no deslizamiento de Mindlin [196] en dirección tangencial, permitiendo una relación fuerza-desplazamiento tangencial dependiente del historial de carga en ambas direcciones [197]. Finalmente, la magnitud de las fuerzas de contacto se encuentran determinadas por la magnitud del traslape existente entre las partículas.

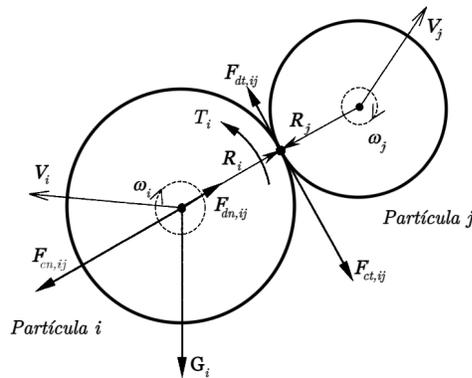


Figura 4.1: Esquema de distribución de fuerza de interacción entre partículas [198]

En la figura 4.1 se muestra el esquema con los principales vectores que intervienen en la cinemática de la interacción entre dos partículas circulares. Como se observa en ella, en la interacción entre dos partículas típicas (i.e: partícula  $i$  y  $j$ ), da origen a la fuerza de contacto, formando un par de acción y reacción. Esta fuerza de contacto es separada en sus componentes normal,  $F_{n,ij}$ , y tangencial,  $F_{t,ij}$ , las que a su vez poseen una componente debido al contacto entre ambas partículas ( $F_{cn,ij}$  y  $F_{ct,ij}$ ), y una componente de disipación viscosa ( $F_{dn,ij}$  y  $F_{dt,ij}$ ). Debido a que la componente normal posee su línea de acción sobre la recta que une los centros de las partículas, su efecto se encuentra exclusivamente asociado a la variación del momento lineal de las partículas (i.e:  $V_i$ ,  $V_j$ ), mientras que la componente tangencial de la fuerza posee su línea de acción perpendicular a esta línea, siendo paralela

a la superficie de las partículas, con lo que su efecto está asociado a la variación del momento angular (i.e:  $\omega_i, \omega_j$ ), a través del momento  $T_i$ . Como se mencionó anteriormente, la formulación para fuerza de contacto de Hertz-Mindlin considera esta separación en las componentes para establecer un modelo tipo resorte-amortiguador para la componente normal y un modelo tipo resorte-amortiguador-deslizador para la componente tangencial, como se muestra en la figura 4.2.

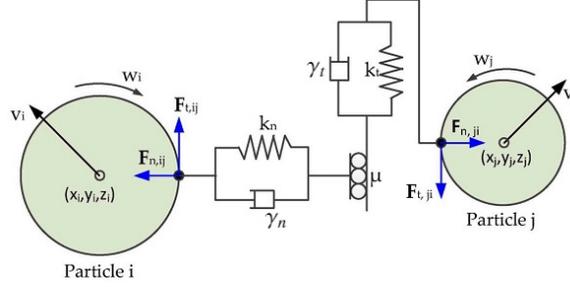


Figura 4.2: Esquema de modelo para fuerza de interacción entre partículas [199]

En el modelo de fuerza de contacto descrito en la figura 4.2, la magnitud de la componente normal de la fuerza es proporcional tanto a la magnitud del traslape existente entre las partículas,  $\delta_{ij}$ , como a la velocidad normal relativa entre ellas,  $V_{ij}^n$ .

$$\begin{aligned}
 F_{n,ij} &= F_{cn,ij} + F_{dn,ij} \\
 &= (k_n \delta_{ij} - \gamma_n v_{ij}^n) \\
 &= k_n \delta_{ij} - \gamma_n (v_j \cdot R_{ji} - v_i \cdot R_{ij}).
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Por otra parte, la magnitud de la componente tangencial de la fuerza de contacto es, a su vez, proporcional al deslizamiento existente en el punto de contacto,  $s_{ij}$ , y a la diferencia de velocidad tangencial relativa,  $\dot{s}_{ij}$ .

$$\begin{aligned}
 F_{t,ij} &= F_{ct,ij} + F_{dt,ij} \\
 &= k_t s_{ij} - \gamma_t \dot{s}_{ij},
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

donde la velocidad tangencial relativa,  $\dot{s}_{ij}$ , está definida por:

$$\dot{s}_{ij} = \mathbf{v}_{ij} - (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij}) \mathbf{n}_{ij}. \tag{4.3}$$

Así mismo, la velocidad superficial,  $\mathbf{v}_{ij}$ , está definida por:

$$\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j + \mathbf{r}_i \times \boldsymbol{\omega}_i + \mathbf{r}_j \times \boldsymbol{\omega}_j. \quad (4.4)$$

Adicionalmente, el deslizador con coeficiente  $\mu$  limita el máximo valor que puede alcanzar la fuerza tangencial, con lo que la ecuación 4.2 toma como valor final:

$$F_{t,ij} = MIN \left\{ k_t s_{ij} - \gamma_t \dot{s}_{ij}^t, \mu F_{n,ij} \right\} \quad (4.5)$$

### 4.1.2. Integración Ecuaciones de Movimiento

El movimiento de cada partícula es descrito a través de las ecuaciones de *Newton-Euler*, a través de una descripción fuerza-aceleración, de acuerdo con:

$$\begin{aligned} m_i \ddot{\mathbf{x}}_i &= F_{n,i} = \sum_j F_{n,ij}, \\ I_i \ddot{\boldsymbol{\theta}}_i &= T_i = \sum_j T_{ij} = \sum_j \mathbf{r}_i \times F_{t,ij}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

donde  $F_{n,ij}$  y  $F_{t,ij}$  corresponden a las componentes normal y tangencial, respectivamente, de las fuerza de contacto entre las partículas  $i$  y  $j$ , y  $r_i$  el radio de la partícula  $i$ , que permite establecer el momento  $T_{ij}$  que ejerce la fuerza de contacto  $F_{t,ij}$  sobre su centroide [200]. Así, las fuerzas y momentos externos son cuantificados para establecer determinar las aceleraciones lineal,  $\ddot{\mathbf{x}}_i$ , y angular,  $\ddot{\boldsymbol{\theta}}_i$ , de cada partícula.

Las ecuaciones de movimiento, definidas por la ecuación 4.6, son discretizadas en tiempo e integradas en un intervalo de tiempo,  $(0, T]$ , mediante un esquema numérico normalmente explícito. Uno de los esquemas más comúnmente utilizados es el método de diferencia central en tiempo, para ambas componentes de la aceleración, con el objetivo de calcular la posición futura de cada partícula [201], de manera que su estabilidad debe ser asegurada mediante el control del máximo incremento temporal [193, 202, 203].

Mediante un esquema de Diferencia Finita Central (DFC) de segundo orden, la segunda derivada temporal de la posición para la partícula típica  $i$  se aproxima mediante la expansión en serie de Taylor tanto para el instante de tiempo siguiente,  $t + \Delta t$ , como para el instante de tiempo anterior,  $t - \Delta t$ .

$$\begin{aligned}
f(t_0 + \Delta t) &= f(t_0) + f'(t_0) + \frac{\Delta t^2}{2} f^{(2)}(t_0) + \frac{\Delta t^2}{6} f^{(3)}(t_0) + \mathcal{O}(\Delta t^4) \\
f(t_0 - \Delta t) &= f(t_0) - f'(t_0) + \frac{\Delta t^2}{2} f^{(2)}(t_0) - \frac{\Delta t^2}{6} f^{(3)}(t_0) + \mathcal{O}(\Delta t^4)
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Luego, con la suma de ambas expresiones de la ecuación 4.7 se obtiene:

$$f(t_0 + \Delta t) + f(t_0 - \Delta t) = 2 f(t_0) + 2 \frac{\Delta t^2}{2} f^{(2)}(t_0) + \mathcal{O}(\Delta t^4). \tag{4.8}$$

De la expresión anterior, al despreciar los términos de orden superior,  $\mathcal{O}(\Delta t^4)$ , se obtiene la forma explícita para la segunda derivada temporal:

$$f^{(2)}(t_0) = \frac{1}{\Delta t^2} (2 f(t_0) - f(t_0 + \Delta t) - f(t_0 - \Delta t)). \tag{4.9}$$

El esquema de la ecuación 4.9 es posteriormente utilizado para discretizar la ecuación 4.6, tanto en su parte traslacional como para la parte rotacional:

$$\begin{aligned}
\mathbf{x}_i^{t+1} &= 2 \cdot \mathbf{x}_i^t - \mathbf{x}_i^{t-1} + \frac{1}{m_i} \mathbf{F}_{n,i}^t \Delta t^2 \\
\boldsymbol{\theta}_i^{t+1} &= 2 \cdot \boldsymbol{\theta}_i^t - \boldsymbol{\theta}_i^{t-1} + \frac{1}{I_i} \mathbf{T}_i^t \Delta t^2,
\end{aligned} \tag{4.10}$$

y las componentes para la velocidad son calculadas mediante:

$$\begin{aligned}
\dot{\mathbf{x}}_i^t &= (\mathbf{x}_i^{t+1} - \mathbf{x}_i^{t-1}) / 2 \Delta t, \\
\dot{\boldsymbol{\theta}}_i^t &= (\boldsymbol{\theta}_i^{t+1} - \boldsymbol{\theta}_i^{t-1}) / 2 \Delta t.
\end{aligned} \tag{4.11}$$

El esquema numérico conformado por las ecuaciones 4.10 y 4.11 se conoce como el *esquema de integración de Verlet* [204], y una de sus principales ventajas está en la simpleza de su implementación. Una limitación evidente del esquema de Verlet se encuentra en su aplicación para modelos de contacto que consideran fuerza viscosa, proporcional a la velocidad relativa entre partículas, ya que esta última es calculada sólo para el tiempo actual,  $t$ , en forma posterior al cálculo de la posición en tiempo siguiente,  $t + 1$ , donde la velocidad para el tiempo actual es requerida para la aceleración. La solución más

simple para este problema, consta de utilizar una discretización temporal desplazada en  $\frac{\Delta t}{2}$ , donde se evalúen las componentes de velocidad,  $\dot{x}$  y  $\dot{\theta}$ , mediante un esquema de DFC de primer orden. Con esto, asumiendo que durante incremento temporal  $\Delta t$ , la fuerzas de contacto,  $F_{n,i}^t$  y  $F_{t,ij}^t$ , sobre las partículas son constantes, se obtienen las formas:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}}_i^{t+1/2} &= \dot{\mathbf{x}}_i^{t-1/2} + \frac{1}{m_i} \mathbf{F}_{n,i}^t \Delta t \\ \dot{\boldsymbol{\theta}}_i^{t+1/2} &= \dot{\boldsymbol{\theta}}_i^{t-1/2} + \frac{1}{I_i} \left( \sum_j \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_{t,ij}^t \right) \Delta t.\end{aligned}\tag{4.12}$$

Con lo anterior, se tiene una forma explícita tanto para la posición, como para la velocidad de cada partícula en cada paso de tiempo. De manera compacta, se tiene el siguiente esquema:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}}_i^{t+1/2} &= \dot{\mathbf{x}}_i^{t-1/2} + \frac{1}{m_i} \mathbf{F}_{n,i}^t \Delta t \\ \dot{\boldsymbol{\theta}}_i^{t+1/2} &= \dot{\boldsymbol{\theta}}_i^{t-1/2} + \frac{1}{I_i} \left( \sum_j \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_{t,ij}^t \right) \Delta t \\ \mathbf{x}_i^{t+1} &= \mathbf{x}_i^t + \dot{\mathbf{x}}_i^{t+1/2} \Delta t \\ \boldsymbol{\theta}_i^{t+1} &= \boldsymbol{\theta}_i^t + \dot{\boldsymbol{\theta}}_i^{t+1/2} \Delta t.\end{aligned}\tag{4.13}$$

En este esquema se considera que tanto la fuerza  $F_i$  como el par de torsión  $T_i$  que actúan sobre la partícula típica  $i$  son constantes durante el intervalo de tiempo típico  $\Delta t$ . Una de las principales características de este esquema es la conservación de energía cinética del sistema, y la estabilidad del sistema es una consecuencia del control en la propagación temporal del error de truncamiento asociado a la aproximación de segundo orden. El origen se ha trazado hasta Newton en su *Principia Mathematica*, aunque también es conocido como el algoritmo de *leapfrog* [205].

### 4.1.3. Identificación del Contacto

En la fase de detección de contactos, es esencial contar con una estrategia computacional optimizada que permita reducir el número de potenciales pares de contacto a verificar en cada paso de cálculo. La forma más básica para identificar los pares de contacto es la estrategia de comparación directa, también denominada *fuerza bruta*, donde cada una de las  $n$  partículas del sistema es comparada con las demás. Esta estrategia requiere un total de  $\frac{1}{2}n(n+1)$  operaciones de comparación, esto es,  $\mathcal{O}(n^2)$ .

Como método para optimizar el tiempo de cálculo en un factor de orden de 10, en su trabajo original [Verlet](#) sugiere realizar esta comparación en el primer paso de cálculo e identificar las partículas cercanas y en contacto en una lista (i.e. lista de vecinos), la que es actualizada en periódica, cada  $k$  pasos de cálculo. Luego, esta lista es reutilizada por los siguientes  $k - 1$  pasos de cálculo [\[204\]](#).

### Listas de Vecinos

La estrategia más común para establecer una lista de vecinos consiste en definir la distancia máxima para la vecindad de la partícula de interés, luego, al comparar la distancia de cada partícula del sistema con las demás, todas aquellas partículas cuya distancia las posiciones dentro de el radio de influencia definido son consideradas como vecinas e incluidas en la lista, descartando a aquellas que, a priori, se encuentren muy lejanas [\[206\]](#). Diferentes métodos se encuentran disponibles para construir estas listas, entre los más comunes se encuentran la lista de Velvet [\[204\]](#), el método de lista enlazada [\[207\]](#), búsqueda no binaria [\[208\]](#) y el algoritmo lineal de detección de contactos de Munjiza-Rougier [\[209\]](#). Códigos comunes como LIGGGHTS [\[210\]](#) permiten controlar la periodicidad con que estas listas son actualizadas.

### Algoritmos para acelerar búsqueda de contacto

Como se mencionó en la sección anterior, la estrategia de comparación directa es altamente costosa y requiere la realización de  $\mathcal{O}(n^2)$  operaciones de comparación entre partículas en cada paso de cálculo. Incorporando las listas de vecinos que son actualizadas cada  $k$  pasos de cálculo, se mejora la cantidad de operaciones necesarias en un orden de magnitud, sin embargo, la cantidad de operaciones de comparación sigue siendo proporcional a  $n^2$ . Para mejorar esta dependencia, se han desarrollado diferentes algoritmos que permiten obtener los mismos resultados con estrategias más eficientes, respecto de la cantidad de operaciones requeridas, principalmente de orden  $\mathcal{O}(n \log(n))$  [\[211, 212\]](#). Entre estos se encuentran algoritmos como el de Grilla Lógica Monotónica (Monotonic Logical Grid) [\[213\]](#), árbol digital alternante (Alternating Digital Tree, ADT) [\[212\]](#).

Una de las estrategias más recientes y eficientes para generar estas listas de contacto es el algoritmo de búsqueda no-binaria (NBS), propuesto por [Munjiza y Andrews](#) en la década de 1990, ha sido originalmente presentado para el caso plano (2D) y permite establecer los pares de contacto con un número de operaciones del orden  $\mathcal{O}(n)$  [\[208\]](#). Este algoritmo ha sido generalizado una década más tarde para su aplicación en el espacio (3D) y es conocido como el algoritmo de Munjiza-Rugier [\[209\]](#).

El algoritmo básico para NBS consta de 4 pasos básicos. Primero, el dominio es descompuesto en

cuadros con tamaño de arista igual a  $2r$  (donde  $r$  corresponde al radio de la partícula de mayor tamaño), de manera tal que ninguna partícula pueda tener su centro fuera de esta descomposición, como se muestra en la figura 4.3.

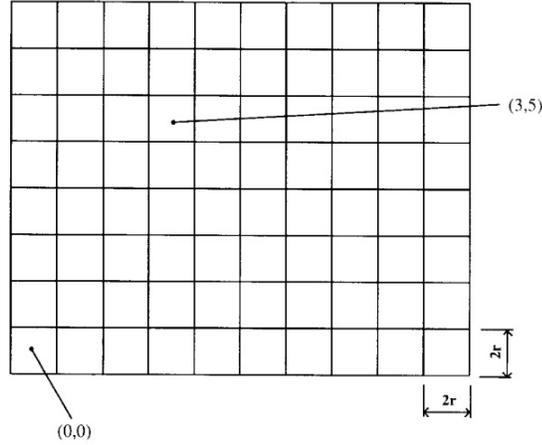


Figura 4.3: Discretización del dominio y mapeo de discos para NBS [208]

Con lo anterior, cada dirección del dominio tiene asociado un máximo número de celdas dado por:

$$\begin{aligned} ncell_x &= \text{piso} \left( \frac{x_{max} - x_{min}}{2r} \right) \\ ncell_y &= \text{piso} \left( \frac{y_{max} - y_{min}}{2r} \right) \end{aligned} \quad (4.14)$$

A partir de la grilla establecida por la descomposición del dominio, a cada partícula se le asigna un par coordenado entero que identifica la celda a la pertenece su centro. Naturalmente, los pares coordenados enteros  $(ix, iy) \in \{(0, ncell_x - 1), (0, ncell_y - 1)\}$ , de manera que el par correspondiente a cada partícula queda definido por:

$$\begin{aligned} ix &= \text{piso} \left( \frac{x_i - x_{min}}{2r} \right) \\ iy &= \text{piso} \left( \frac{y_i - y_{min}}{2r} \right), \end{aligned} \quad (4.15)$$

como se muestra en la figura 4.4.

De esta manera, cada partícula es mapeada a una y solo una celda del dominio descompuesto. Una vez

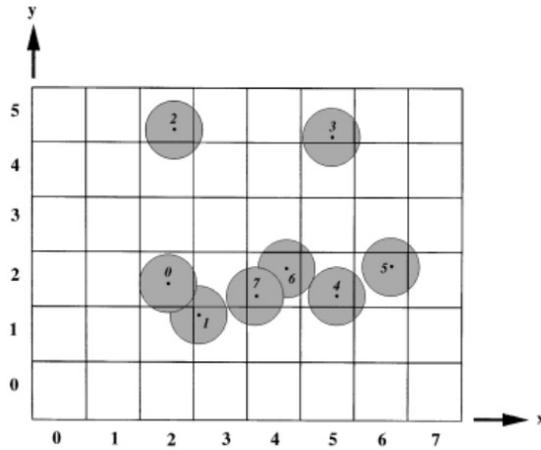


Figura 4.4: Discretización del dominio y mapeo de discos para NBS [208]

que cada celda es mapeada, dos listas simplemente enlazadas son creadas, una con el objetivo de realizar el ordenamiento de las partículas en función de las filas (i.e:  $Y_{iy}$ ) y una para realizar el ordenamiento de las partículas en función de las columnas (i.e:  $X_{ix}$ ). Los elementos son ordenados en la lista iterando en dirección ascendente, verificando su coordenada entera y “empujándolos” en la lista enlazada. En este contexto, las listas enlazadas se generan utilizando 2 arreglos que operan en conjunto (i.e: un arreglo de “cabecera” y uno de “cola”), los que se inicializan con un valor nulo de referencia (habitualmente -1). Luego, al iterar sobre las partículas y verificar la coordenada entera de la partícula, se verifica el elemento correspondiente en el arreglo de cabecera y, si este se encuentra vacío (con valor -1), la celda toma el índice de la partícula, en cambio, si la cabecera se encuentra utilizada (i.e: valor distinto a -1), la cabecera toma el valor del índice de la partícula y el elemento correspondiente a la partícula en el arreglo de cola toma el valor de la partícula que originalmente se encontraba en la cabecera, sirviendo de puntero hacia la siguiente partícula contenida en la fila. Una vez que todas las partículas han sido ordenadas en sus filas, se realiza el mismo procedimiento para las columnas, iterando nuevamente sobre todas las partículas, esta vez en sentido descendente.

En el algoritmo NBS, la detección del contacto es realizada a partir de la revisión de cada partícula con aquellas existente en la misma celda y las celdas contiguas. Como estrategia para evitar la redundancia en las operaciones de chequeo, al evaluar el contacto en las partículas contenidas en una celda específica, sólo se verifican las celdas cuyos índices sean iguales o menores a los de la que contiene la partícula en cuestión, como se muestra en la figura 4.5. Con esta estrategia, solo se deben evaluar las partículas que estén en un máximo de 5 celdas, y no 9, cada vez.

Los contactos se evalúan en orden ascendente, en función del número de identificación de cada partícula. Una vez que se han evaluado todos los posibles contactos de esta partícula, se procede a la evaluación de

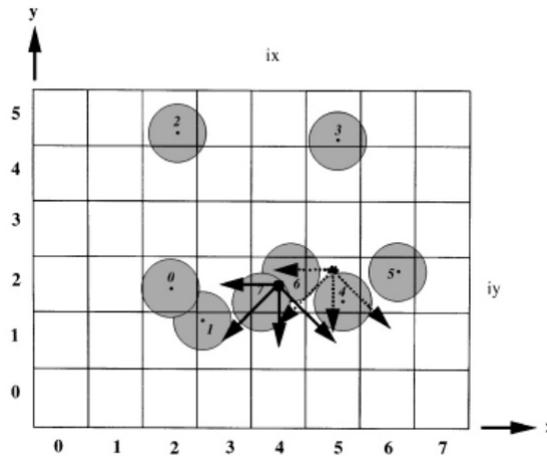


Figura 4.5: Detección de contactos en NBS [208]

los contactos para cualquier otra partícula cuyo centro esté contenido en la misma celda. Al comienzo del proceso de evaluación de contactos en cada paso de cálculo, todas las listas que contienen al menos una partícula son marcadas como “nueva”, luego, al finalizar la evaluación de los contactos con foco en todas las partículas contenidas en una celda, esta lista es marcada como “vieja”, indicando que la lista no debe ser vuelta a evaluar en el correspondiente paso de cálculo, durante la iteración ascendente sobre los índices de las partículas. A diferencia de NBS, el algoritmo de Munjiza-Rugier utiliza listas doblemente enlazadas cerradas para el ordenamiento de los elementos [209].

Si bien el uso de listas enlazadas y el algoritmo de Munjiza-Rougier son ampliamente utilizados para agilizar la búsqueda de contactos entre partículas tanto en Dinámica Molecular (DM) como DEM, otros algoritmos y técnicas se han desarrollado en forma posterior. Ejemplos de ellos son la incorporación de listas de Verlet pareadas [214] y las pseudo listas de Verlet [215], cuyos enfoques están en la optimización del uso de memoria en implementaciones paralelizadas sobre procesadores múltiples (CPU multithread) y unidades de procesamiento gráfico (GPU).

## 4.2. Método de los Elementos Finitos

En esta técnica numérica, un problema descrito por ecuaciones diferenciales es resuelto mediante una aproximación numérica a través de la representación del dominio en forma discreta, por *elementos finitos*. La solución es determinada a partir de valores nodales en principio desconocidos. Mientras una aproximación por partes entrega buena precisión incluso para funciones de aproximación simples, la localidad de la aproximación genera sistema de ecuaciones disperso, permitiendo resolver problemas que incluyen un gran número de incógnitas nodales [216].

A continuación, se presenta la formulación de Galerkin, para evaluación de los residuos ponderados, debido a que es la formulación más habitual [217–219]. Por simplicidad de escritura, representación gráfica y generalización para el caso tridimensional, a en este capítulo se describe la formulación bidimensional para el método de elementos finitos (FEM).

### 4.2.1. Forma Variacional del Problema

Considerando un problema de valor en la frontera (PVF) estacionario gobernado por la Ecuación Diferencial en derivadas Parciales (EDP) de la forma

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left( a_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{12} \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( a_{21} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{22} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + a_0 = f \quad (4.16)$$

definida en un dominio  $\Omega$  en  $\mathbb{R}^2$  con las funciones  $a_{ij}(x, y)$  y  $f(x, y)$  conocidas, sujeto a las condiciones de borde de de Dirichlet  $u(x, y) = u_0$  en  $\Omega^d$  y de Neumann  $a \frac{\partial u}{\partial n} = g(x, y)$  en  $\Omega^n$ . Luego, introduciendo una función arbitraria,  $\omega$ , perteneciente al espacio de Hilbert de orden 2 (i.e:  $\omega \in H^2$ ), para la integral ponderada de la EDP (ecuación 4.16):

$$\int_{\Omega^k} \omega \left[ -\frac{\partial}{\partial x} \left( a_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{12} \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( a_{21} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{22} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + a_0 u - f \right] dx dy = 0, \quad (4.17)$$

sobre algún subdominio  $\Omega^k \subset \Omega$ . Luego, definiendo las funciones auxiliares:

$$\begin{aligned} F_1 &= a_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{12} \frac{\partial u}{\partial y} \text{ y} \\ F_2 &= a_{21} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{22} \frac{\partial u}{\partial y}, \end{aligned} \quad (4.18)$$

es posible reescribir la ecuación 4.17 como:

$$\int_{\Omega^k} \left( \frac{\partial F_1}{\partial x} - \frac{\partial F_2}{\partial y} \right) dx dy = \int_{\Omega^k} \left( \frac{\partial \omega}{\partial x} F_1 + \frac{\partial \omega}{\partial y} F_2 - \frac{\partial}{\partial x} (\omega F_1) - \frac{\partial}{\partial y} (\omega F_2) \right) dx dy. \quad (4.19)$$

Mediante la utilización del teorema de la divergencia de Gauss, la ecuación anterior es reescrita como:

$$\int_{\Omega^k} \left[ \frac{\partial \omega}{\partial x} \left( a_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{12} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial \omega}{\partial y} \left( a_{21} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{22} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + a_0 \omega u - f \right] dx dy - \int_{\partial \Omega^k} \omega \left[ \left( a_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{12} \frac{\partial u}{\partial y} \right) n_x + \left( a_{21} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{22} \frac{\partial u}{\partial y} \right) n_y \right] dl = 0 \quad (4.20)$$

Finalmente, para la ecuación anterior, se define el flujo,  $q_n$ , como:

$$q_n = \left( a_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{12} \frac{\partial u}{\partial y} \right) n_x + \left( a_{21} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{22} \frac{\partial u}{\partial y} \right) n_y, \quad (4.21)$$

o en su forma vectorial:

$$q_n = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} \end{pmatrix} \cdot \hat{n}. \quad (4.22)$$

Con lo anterior, se define la estructura final de la forma débil de la EDP de la ecuación 4.16:

$$\int_{\Omega^k} \left[ \frac{\partial \omega}{\partial x} \left( a_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{12} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial \omega}{\partial y} \left( a_{21} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{22} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + a_0 \omega u - \omega f \right] dx dy - \int_{\partial \Omega^k} \omega q_n dl = 0. \quad (4.23)$$

A partir de la forma débil de la EDP (ecuación 4.23, se expresa el problema en su forma variacional ( $B(\omega, u) = L(\omega)$ ) donde:

$$\begin{aligned} B(\omega, u) &= \int_{\Omega^k} \left[ \frac{\partial \omega}{\partial x} \left( a_{11} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{12} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial \omega}{\partial y} \left( a_{21} \frac{\partial u}{\partial x} + a_{22} \frac{\partial u}{\partial y} \right) + a_0 \omega u \right] dx dy \\ L(\omega) &= \int_{\Omega^k} \omega f dx dy + \int_{\partial \Omega^k} \omega q_n dl, \end{aligned} \quad (4.24)$$

donde  $B(\omega, u)$  es un funcional bilineal simétrico y  $L(\omega)$  un funcional lineal. Con lo anterior, el problema diferencial descrito por la EDP de la ecuación 4.16 es reescrito como el problema variacional en la forma de la ecuación 4.24, el cual debe ser resuelto para todos los subdominios  $\Omega^k$ .

### 4.2.2. Discretización del Dominio

Para un dominio  $\Omega$  definido en el espacio euclidiano, e.g:  $\Omega \in \mathbb{R}^2$ , con frontera  $\partial\Omega$  de Lipschitz sujeta a las condiciones de borde de Dirichlet,  $\partial\Omega^D$ , de Neumann,  $\partial\Omega^N$  y/o de Robin,  $\partial\Omega^R$  de manera tal que  $\partial\Omega = \partial\Omega^D \cup \partial\Omega^N \cup \partial\Omega^R$  (i.e: Corresponden a una partición de  $\partial\Omega$ ) se define su discretización como la unión en  $n$  subdominios tal que  $\Omega = \bigcup_{k=1}^n \Omega^k + \mathcal{E}$  sujeto a  $\Omega^i \cap \Omega^j = \emptyset \forall i, j$  donde el error de discretización,  $\mathcal{E}$ , es suficientemente pequeño en la frontera, como se muestra en la figura 4.6.

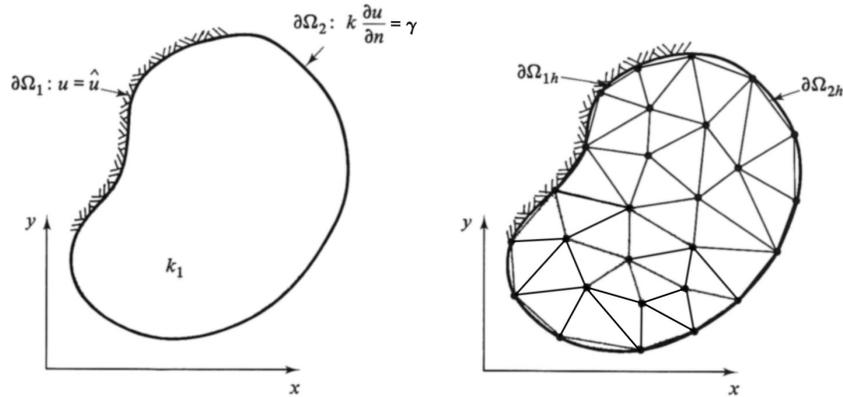


Figura 4.6: Discretización de un dominio  $\Omega$  mediante  $n$  elementos finitos  $\Omega^k$  [220]

En otra forma, el interior del dominio  $\Omega$  es teselado por el mallado de elementos finitos  $\Omega^e = \bigcup_{k=1}^n \Omega^k$ . La discretización, o mallado, es generada a partir de la definición del conjunto de nodos que definen en forma única cada uno de los elementos, o subdominios. Evidentemente, cuando la frontera del dominio,  $\partial\Omega$  es curva, la discretización mediante segmentos rectos no es capaz de coincidir con ella incorporando un *error de discretización*, el cual es posible de reducir mediante la incorporación de una mayor concentración de nodos y, en consecuencia, elementos en la zona.

En la figura 4.6, cada vértice que definen los diferentes triángulos son denominados *nodos*, mientras que cada triángulo es denominado *elemento*. En relación al problema variacional dado por la forma débil del PVF descrito en la ecuación 4.24, cada triángulo o *elemento* corresponde a los subdominios  $\Omega^k$ . El conjunto de elementos recibe el nombre de *mallado*. En una aproximación mediante FEM, a cada nodo se le permite tener componente de la solución en las diferentes direcciones, en el caso bidimensional, en dirección  $x$  e  $y$ . Estas componentes son denominadas *grados de libertad* (DOF) cuyo significado físico se encuentra asociado a la naturaleza del problema que se intenta resolver. Con lo anterior, para el caso plano, cada nodo posee 2 DOF.

Los mallados que discretizan un dominio para una aproximación por FEM no se encuentran limitados a triangulaciones en el caso bidimensional, la cantidad de nodos con los que se establece cada elementos

varían según la dimensionalidad del dominio y el orden de la aproximación local a utilizar. Sin embargo, para que una discretización sea aceptable debe cumplir con, al menos, dos condiciones [221]:

- Dos elementos pueden tener nodos comunes solo en su contorno común, si ese contorno existe.
- El conjunto de elementos debe cubrir el dominio de la forma más cercana posible.

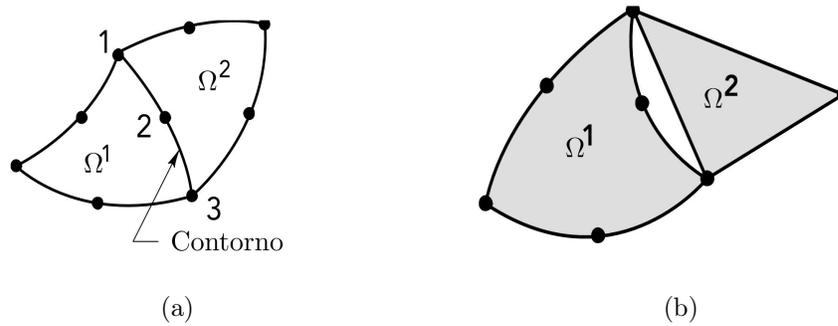


Figura 4.7: Condición en el contorno de dos elementos finitos (a) aceptable y (b) no aceptable [221]

A consecuencia de lo anterior, y como se observa en la figura 4.7b, cada elemento queda individualizado y caracterizado por las coordenadas del conjunto de nodos que lo componen mientras que su contorno está definido por un conjunto de entidades de una clase menor a la del elemento, es decir, para un elemento plano (2D) su contorno está definido por un conjunto de curvas (1D) mientras que para un elemento volumétrico (3D), el contorno se compone de un conjunto de superficies (2D).

### 4.2.3. Ecuaciones para un Elemento

#### Numeración global y local

La cantidad de nodos y el orden de la aproximación a utilizar en cada elemento de un mallado de elementos finitos depende tanto de la naturaleza del problema como del dominio de interés. En la figura 4.8, se muestra una colección de elementos comúnmente utilizados para discretizar dominios de distintas dimensionalidades, desde elementos de línea para problemas unidimensionales hasta elementos de volumen en el caso tridimensional. De la figura, se observa que el número de nodos que contiene el elemento se encuentra asociado con el orden de la aproximación a utilizar.

En una discretización cualquiera de elementos finitos, a cada uno de los elementos se le asigna un identificador único (i.e: identificador de elemento) y con esto cada elementos, o subdominio, es individualizado como,  $\Omega^k$  con  $j = \{1..N\}$  donde  $N$  es el número de elementos de la discretización, como

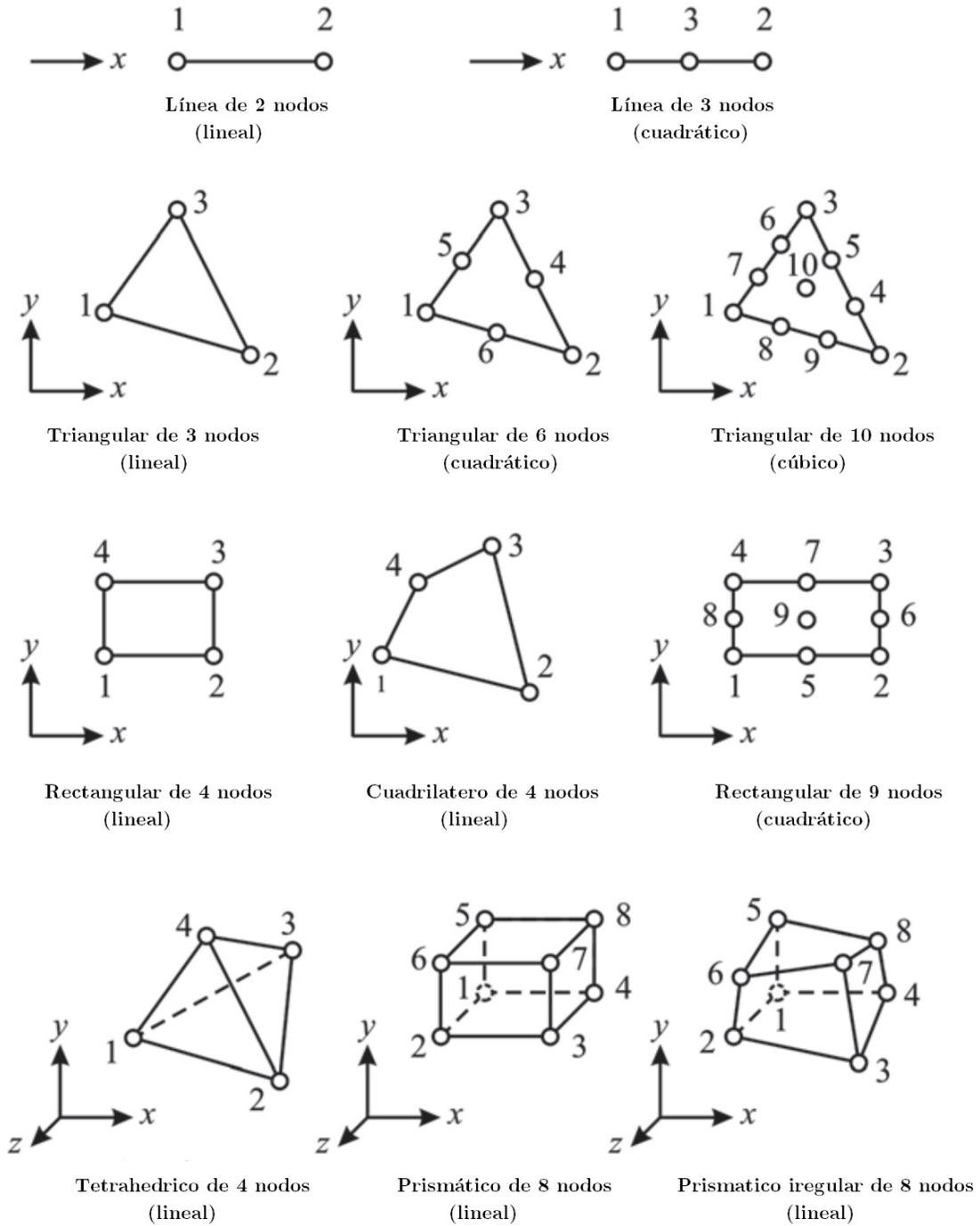


Figura 4.8: Tipos de elementos comúnmente utilizados en discretizaciones para elementos finitos [219]

se muestra en la figura 4.9. Adicionalmente, cada nodo de la discretización recibe un identificador único, llamado *identificador nodal global*, a los cuales se les permite tener un desplazamiento en cada uno de las dimensiones donde esté contenido el problema [219]. Cada uno de estos desplazamientos es un DOF y su numeración se encuentra relacionada al identificador nodal global del nodo que representa. En el caso bidimensional de la figura 4.9 cada nodo posee 2 DOF, luego, los DOF asociados al  $j$ -ésimo nodo, el DOF de desplazamiento en dirección X toma la numeración impar (i.e:  $U_{2j-1}$ ) mientras que el DOF asociado a desplazamiento en dirección y toma la numeración par (i.e:  $U_{2j}$ ).

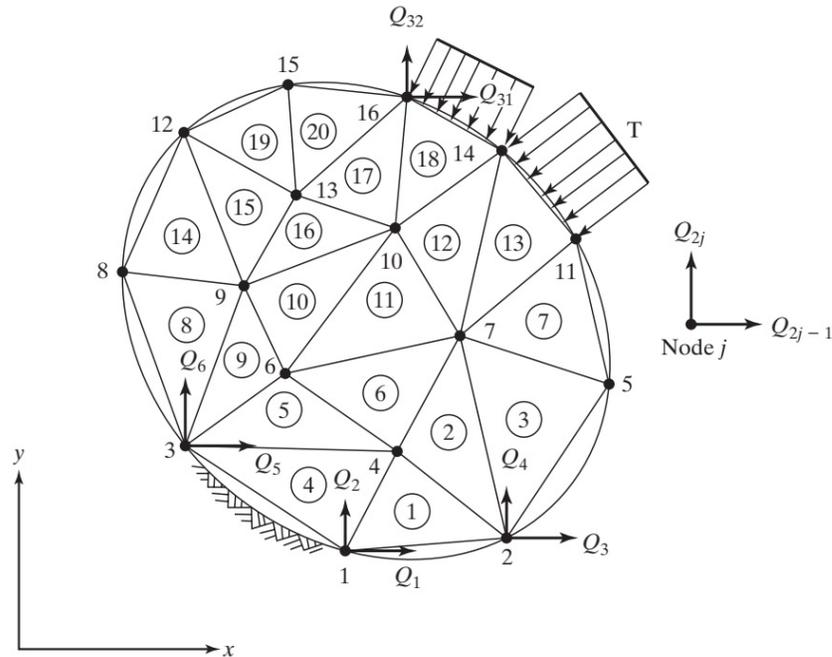


Figura 4.9: Asignación de identificadores de elementos e identificadores nodales globales [217]

Con lo anterior, para un mallado bidimensional con  $n$  nodos, se tiene un vector de desplazamientos global definido por  $U = [U_1 \dots U_{2n}]^T$ , donde el total de DOF es igual a  $2n$ . Para el caso tridimensional, como cada nodo posee 3 DOF, la dimensión del vector  $U$  será igual a  $3n$ . Por otra parte, cada elemento se encuentra definido por un conjunto de nodos los cuales reciben una identificación local denominada *identificador nodal local*. Estos identificadores nodales locales son asignados de una manera específica, debido a que cumple un rol importante en los cálculos siguientes. Para el caso bidimensional mostrado en la figura 4.10, la asignación ascendente de los identificadores nodales locales es realizada en sentido antihorario.

En conjunto a la asignación de los identificadores nodales locales, cada uno de los DOF asociados a los desplazamientos locales,  $u_i$ , es identificado utilizando el mismo esquema con que se identifican los DOF globales,  $Q_j$ . Luego, los DOF asociados al  $j$ -ésimo nodo local toman la numeración  $u_{2j-1}$  en dirección x

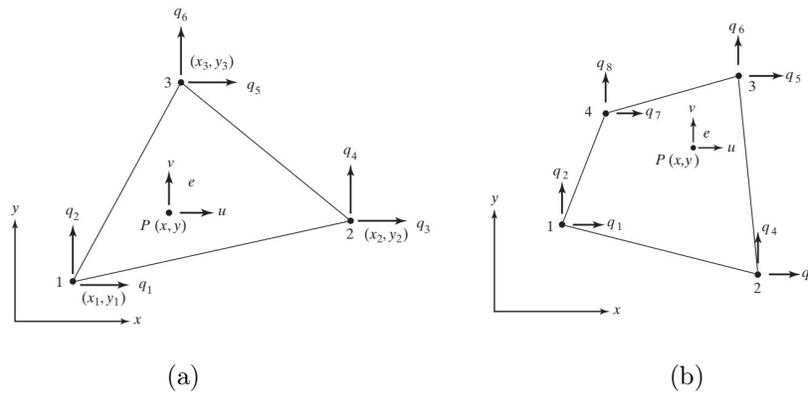


Figura 4.10: Asignación de identificadores nodales locales para (a) un elemento triangular de 3 nodos y (b) un elemento cuadrilátero de 4 nodos [217]

y  $u_{2j}$  en dirección  $y$ . Así, en el caso plano, para cada elemento se define el vector de desplazamientos nodales  $u = [u_1 \dots u_{2m}]^T$  donde  $m$  es el número de nodos de cada elemento.

**Aproximación para un elemento**

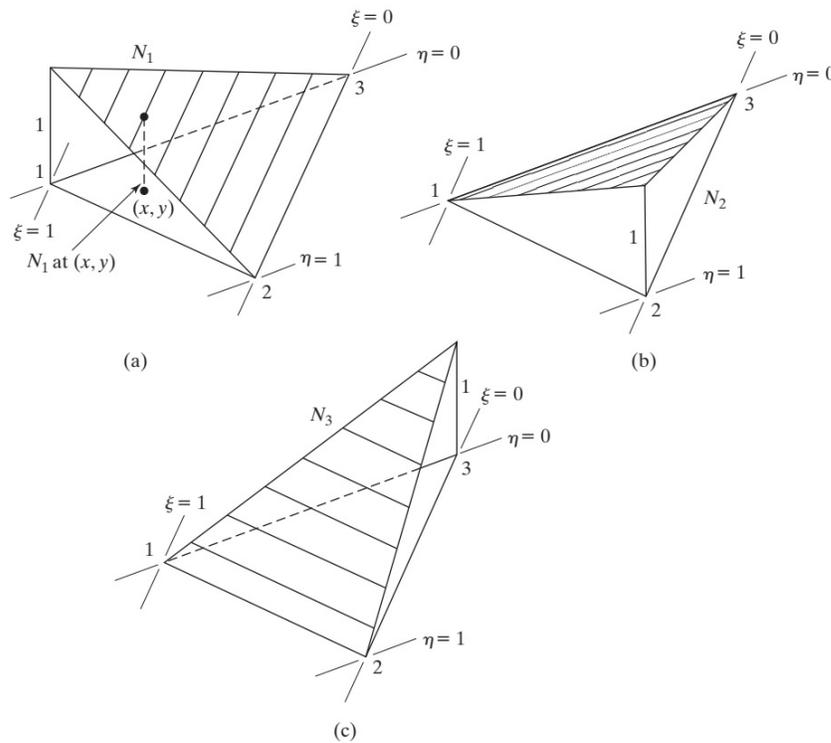


Figura 4.11: Funciones de forma para un elemento triangular de 3 nodos [217]

La aproximación al campo variacional que se calcula sobre cada elemento,  $U^k$ , en una aproximación

por FEM, es obtenida a través de la elección de funciones interpolantes apropiadas,  $\psi_j$ , ponderadas por los valores nodales,  $u^e$ , tal que:

$$U^k = \sum_{j=1}^n u_j^k \psi_j, \quad (4.25)$$

donde  $n$  es el número de nodos contenidos en el elemento y las funciones interpolantes,  $\psi_j$ , cumplen con la condición  $\psi_i(x_j) = \delta_{ij}$  (delta de Kronecker) al interior del elemento  $\Omega^k$ .

Independientemente del orden de la aproximación a utilizar en cada elemento, las funciones interpolantes a seleccionar deben cumplir con 4 condiciones para asegurar que la solución sea monotónicamente convergente. (i) La función de aproximación debe ser continua al interior del elemento, (ii) Debe existir compatibilidad entre los nodos, contornos o superficies entre elementos adyacentes, (iii) exhibir completitud, permitiendo movimiento de cuerpo rígido y asegurar una variación constante del campo y sus derivadas al interior del elemento y (iv) isotropía geométrica para el mismo comportamiento en cada dirección.

Una forma simple de satisfacer los 4 requerimientos anteriores es mediante la utilización de polinomios de la forma:

$$P_n(x) = \sum_{k=1}^{\frac{(n+1)(n+2)}{2}} a_k x^i y^j \quad i + j \leq n. \quad (4.26)$$

Los coeficientes  $a_k$  de los polinomios de la ecuación 4.26 son denominados *coordenadas generalizadas* y son parámetros independientes que reflejan una combinación lineal de los valores nodales de los DOF al interior de un elemento. Adicionalmente, al interior de cada elemento se definen las *coordenadas naturales*, que corresponden a un sistema coordenado local especificado mediante un parámetro adimensional que no excede la unidad en ninguna dirección, con el propósito de describir la ubicación de los puntos en el elemento, en términos de las coordenada asociadas a los nodos del mismo. Con lo anterior, en el caso de un elemento triangular de 3 nodos cualquier punto  $P(x, y)$  al interior del elemento puede ser descrito de la forma:

$$\begin{aligned} x &= a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3, \\ y &= a_1 y_1 + a_2 y_2 + a_3 y_3, \end{aligned} \quad (4.27)$$

donde los pares  $(x_i, y_i)$  corresponden a las coordenadas globales del  $i$ -ésimo nodo del elemento. Dado

que los parámetros  $a_i$  no son linealmente independientes, se cumple que  $a_1 + a_2 + a_3 = A^k$  donde  $A^k$  corresponde al área del elemento. Luego, se puede probar que los coeficientes  $a_i$  que satisfacen el sistema en los diferentes nodos son:

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{2A^k}(\alpha_1 u_1^k + \alpha_2 u_2^k + \alpha_3 u_3^k), \\ a_2 &= \frac{1}{2A^k}(\beta_1 u_1^k + \beta_2 u_2^k + \beta_3 u_3^k), \\ a_3 &= \frac{1}{2A^k}(\gamma_1 u_1^k + \gamma_2 u_2^k + \gamma_3 u_3^k), \end{aligned} \quad (4.28)$$

donde  $\alpha_i = x_j y_k - x_k y_j$ ,  $\beta_i = y_j - y_k$  y  $\gamma_i = x_k - x_j$ . Con esto, las funciones de forma  $\psi_i$  toman la forma:

$$\psi_i^k = \frac{1}{2A^k}(\alpha_i^k + \beta_i^k x + \gamma_i^k y) \quad i = 1, 2, 3, \quad (4.29)$$

para construir la aproximación variacional  $U^k$  dentro del elemento  $\Omega^k$ . Después, recordando la forma débil de la EDP, ecuación 4.23, aplicando el método de Rayleigh-Ritz con la aproximación  $U^k$  y los pesos como las funciones de forma  $\psi_i^k$ , se tiene:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^k} \left[ \frac{\partial \psi_i^k}{\partial x} \left( a_{11} \sum_{j=1}^n u_j^k \frac{\partial \psi_j^k}{\partial x} + a_{12} \sum_{j=1}^n u_j^k \frac{\partial \psi_j^k}{\partial y} \right) + \frac{\partial \psi_i^k}{\partial y} \left( a_{21} \sum_{j=1}^n u_j^k \frac{\partial \psi_j^k}{\partial x} + a_{22} \sum_{j=1}^n u_j^k \frac{\partial \psi_j^k}{\partial y} \right) \right. \\ \left. + a_0 \psi_i^k \sum_{j=1}^n u_j \psi_j^k - \psi_i^k f \right] dx dy - \int_{\partial \Omega^k} \psi_i^k q_n dl = 0 \quad i = \{1..n\}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Luego, agrupando los términos en la ecuación 4.30 en  $u_i^k$ ,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n \left[ \int_{\Omega^k} \left( \frac{\partial \psi_i^k}{\partial x} \left( a_{11} \frac{\partial \psi_j^k}{\partial x} + a_{12} \frac{\partial \psi_j^k}{\partial y} \right) + \frac{\partial \psi_i^k}{\partial y} \left( a_{21} \frac{\partial \psi_j^k}{\partial x} + a_{22} \frac{\partial \psi_j^k}{\partial y} \right) + a_0 \psi_i^k \psi_j^k \right) dx dy \right] u_i^k \\ - \int_{\Omega^k} f \psi_i^k dx dy - \int_{\partial \Omega^k} \psi_i^k q_n dl = 0 \quad i = \{1..n\}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

La ecuación 4.31 toma la forma compacta:

$$\sum_j K_{ij}^k u_j^k = F_i^k + Q_i^k \quad i = \{1..n\}. \quad (4.32)$$

#### 4.2.4. Ensamble de las Ecuaciones

Considerando dos elementos genéricos  $\Omega^m, \Omega^n$ , como se muestran en la figura 4.12, donde el elemento  $\Omega^m$  está definido por los nodos globales 1, 2 y 4, mientras que el elemento  $\Omega^n$  está definido por los nodos globales 2, 3 y 4.

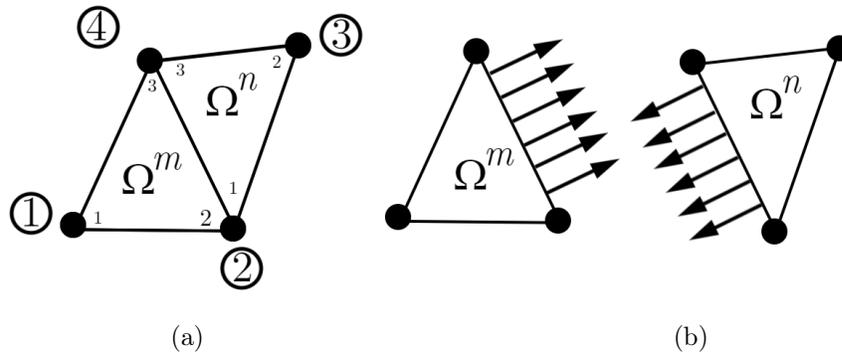


Figura 4.12: (a) Ensamble de 2 elementos finitos  $\Omega^m$  y  $\Omega^n$  que comparten los nodos globales 2 y 4 y (b) el correspondiente flujo entre ambos en el lado común

Así como existe una correspondencia entre los nodos locales (numerados al interior de cada elemento en la figura 4.12a) y la numeración de los nodos globales, existe una correspondencia entre las variables locales,  $u_i^m$  y  $u_i^n$  y las variables globales  $U^k$  de acuerdo con:

$$\begin{aligned} u_1^1 &= U^1 & ; & & u_2^1 &= u_1^2 &= U^2 \\ u_2^2 &= U^3 & ; & & u_3^1 &= u_3^2 &= U^4 \end{aligned}$$

Luego, recordando la forma compacta para las ecuaciones sobre un elemento, dada por la ecuación 4.32, cada elemento tiene asociado un sistema ecuaciones como:

$$\left. \begin{aligned} k_{11}^m u_1^m + k_{12}^m u_2^m + k_{13}^m u_3^m &= F_1^m + Q_1^m \\ k_{21}^m u_1^m + k_{22}^m u_2^m + k_{23}^m u_3^m &= F_2^m + Q_2^m \\ k_{31}^m u_1^m + k_{32}^m u_2^m + k_{33}^m u_3^m &= F_3^m + Q_3^m \end{aligned} \right\} \Omega^m$$

$$\left. \begin{aligned} k_{11}^n u_1^n + k_{12}^n u_2^n + k_{13}^n u_3^n &= F_1^n + Q_1^n \\ k_{21}^n u_1^n + k_{22}^n u_2^n + k_{23}^n u_3^n &= F_2^n + Q_2^n \\ k_{31}^n u_1^n + k_{32}^n u_2^n + k_{33}^n u_3^n &= F_3^n + Q_3^n \end{aligned} \right\} \Omega^n$$

Luego, las ecuaciones anteriores se pueden reescribir en términos de las variables globales  $U^k$  como:

$$\left. \begin{aligned} k_{11}^m U^1 + k_{12}^m U^2 + k_{13}^m U^4 &= F_1^m + Q_1^m \\ k_{21}^m U^1 + k_{22}^m U^2 + k_{23}^m U^4 &= F_2^m + Q_2^m \\ k_{31}^m U^1 + k_{32}^m U^2 + k_{33}^m U^4 &= F_3^m + Q_3^m \end{aligned} \right\} \Omega^m$$

$$\left. \begin{aligned} k_{11}^n U^2 + k_{12}^n U^3 + k_{13}^n U^4 &= F_1^n + Q_1^n \\ k_{21}^n U^2 + k_{22}^n U^3 + k_{23}^n U^4 &= F_2^n + Q_2^n \\ k_{31}^n U^2 + k_{32}^n U^3 + k_{33}^n U^4 &= F_3^n + Q_3^n \end{aligned} \right\} \Omega^n.$$

A partir de lo anterior se obtiene el sistema de ecuaciones en términos de las variables globales

$$\begin{aligned} k_{11}^m U^1 + k_{12}^n U^2 + k_{13}^n U^4 &= F_1^n + Q_1^n \\ k_{21}^m U^1 + (k_{22}^m + k_{11}^n) U^2 + k_{12}^n U^3 + (k_{23}^m + k_{13}^n) U^4 &= F_2^m + F_1^n + Q_2^m + Q_1^n \\ k_{31}^m U^1 + (k_{32}^m + k_{31}^n) U^2 + k_{32}^n U^3 + (k_{33}^m + k_{33}^n) U^4 &= F_3^m + F_3^n + Q_3^m + Q_3^n \\ k_{21}^n U^2 + k_{22}^n U^3 + k_{23}^n U^4 &= F_2^n + Q_2^n \end{aligned}$$

Finalmente, la ecuación 4.2.4 se puede escribir en forma matricial como:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} k_{11}^m & k_{12}^m & k_{13}^m \\ k_{21}^m & (k_{22}^m + k_{11}^n) & k_{12}^n & (k_{23}^m + k_{13}^n) \\ k_{31}^m & (k_{32}^m + k_{31}^n) & k_{32}^n & (k_{33}^m + k_{33}^n) \\ & k_{21}^n & k_{22}^n & k_{23}^n \end{bmatrix}}_{\mathbf{K}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} U^1 \\ U^2 \\ U^3 \\ U^4 \end{pmatrix}}_{\mathbf{U}} = \underbrace{\begin{pmatrix} F_1^n \\ F_2^m + F_1^n \\ F_3^m + F_3^n \\ F_2^n \end{pmatrix}}_{\mathbf{F}} + \underbrace{\begin{pmatrix} Q_1^n \\ Q_2^m + Q_1^n \\ Q_3^m + Q_3^n \\ Q_2^n \end{pmatrix}}_{\mathbf{Q}} \quad (4.33)$$

Así, finalmente, la ecuación 4.33 para el sistema completo posee la misma forma  $\mathbf{K} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{F} + \mathbf{Q}$  de la ecuación 4.32, donde  $\mathbf{K}$  se conoce como *matriz de rigidez* del sistema y los vectores  $\mathbf{U}, \mathbf{F}, \mathbf{Q}$

corresponden a los *vectores de incógnitas, fuerzas y flujo*, respectivamente. Adicionalmente, se recuerda que, por condición de continuidad, en las fronteras comunes de los elementos se cumple que los flujos  $Q_i^m$  y  $Q_j^n$  son iguales en magnitud e inversos en signo, y en conclusión las componentes del vector  $\mathbf{Q}$  correspondiente a los  $k$ -ésimos DOF asociados a la frontera son nulas, esto es  $Q_k = 0$ .

En la práctica, el ensamble de las ecuaciones se realiza mediante un algoritmo que permite relacionar las ecuaciones locales con las globales [222]. Esto se realiza introduciendo el concepto de la matriz de conectividad,  $\mathbf{A}$ , que provee la correlación para la numeración entre los dof locales y globales de cada elemento, de la forma:

$$\mathbf{U}_d = \mathbf{A}\mathbf{U}, \quad (4.34)$$

donde el vector de incógnitas locales compuesto,  $\mathbf{U}_d$ , posee la forma  $\mathbf{U}_d = \{\mathbf{U}^1 \mathbf{U}^2 \dots\}$ . Luego, tanto el ensamble de la matriz de rigidez como de los vectores de fuerzas y flujos de la ecuación 4.33 pueden ser descritos mediante la relación:

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= \mathbf{A}^T \mathbf{K}_d \mathbf{A}, \\ \mathbf{F} &= \mathbf{A}^T \mathbf{F}_d, \\ \mathbf{Q} &= \mathbf{A}^T \mathbf{Q}_d, \end{aligned} \quad (4.35)$$

donde  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{F}$  y  $\mathbf{Q}$  corresponden a la matriz de rigidez y los vectores de fuerzas y flujos globales, respectivamente y  $\mathbf{K}_d$ ,  $\mathbf{F}_d$  y  $\mathbf{Q}_d$  a la matriz compuesta por las matrices de rigidez de los elementos y los vectores de fuerzas y flujos compuestos por los vectores de los elementos, todos de la forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_d &= \begin{bmatrix} \mathbf{K}^1 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{K}^2 & 0 \\ 0 & 0 & \dots \end{bmatrix}, \\ \mathbf{F}_d &= \{\mathbf{F}^1 \mathbf{F}^2 \dots\} \\ \mathbf{Q}_d &= \{\mathbf{Q}^1 \mathbf{Q}^2 \dots\}. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Con lo anterior, la ecuación 4.33 puede ser reescrita como:

$$\mathbf{A}^T \mathbf{K}_d \mathbf{A} \mathbf{U} = \mathbf{A}^T (\mathbf{F}_d + \mathbf{Q}_d). \quad (4.37)$$

Aquí, la matriz de conectividad  $\mathbf{A}$  corresponde a una matriz dispersa, cuyos componentes no nulos (i.e:  $A_{ij} = 1$ ) son muy pocos, en comparación a sus dimensiones, por lo que rara vez es utilizada de manera explícita [222].

#### 4.2.5. Condiciones de Contorno

Es importante mencionar que el sistema de ecuaciones de la ecuación 4.33 ha sido desarrollado sin imponer ningún tipo de condiciones de contorno. Debido a esto, la matriz de rigidez,  $\mathbf{K}$ , de la ecuación 4.33 es una matriz singular, de modo que es imposible de invertir para obtener una solución única.

Para obtener una solución única a un problema de valor en la frontera, cualquiera de los tipos de condición de contorno tradicionales se puede aplicar a la ecuación 4.33. En forma general, la frontera  $\partial\Omega$  se divide en una partición de la forma  $\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N \cup \partial\Omega_R$ , donde:  $\partial\Omega_d$ ,  $\partial\Omega_n$  y  $\partial\Omega_r$  corresponden a las secciones donde se imponen condiciones de borde de Dirichlet, Neumann y Robin, respectivamente [220].

- Condición de Dirichlet:

$$u(x) = u_0 \quad \forall x \in \partial\Omega_d$$

En términos del modelo de elementos finitos de la ecuación 4.33, este tipo de condiciones de borde, donde se prescribe el valor de la variable  $u$  sobre una porción del contorno, es aplicada de manera directa sobre los DOF,  $U^i$ , correspondientes, de manera que la  $i$ -ésima fila del sistema es eliminada, mientras que en las demás filas, el  $j$ -ésimo término del vector de fuerzas,  $\mathbf{F}$ , incorpora un término adicional de la forma  $-K_{ij}U^i$ . Adicionalmente, el término de flujo  $Q^i$  queda definido como una variable secundaria, la cual requiere su evaluación luego de encontrada la solución del sistema. Este procedimiento deriva como consecuencia del *método de eliminación* para la aplicación de condiciones de borde. A consecuencia de lo anterior, el sistema de la ecuación 4.33 se ve reducido, produciendo una matriz de rigidez  $\mathbf{K}'$  no singular, con lo que se tiene una solución única.

- Condición de Neumann:

$$\frac{\partial u}{\partial n} = Q_0 \quad \forall x \in \partial\Omega_N$$

En este caso, la condición de borde establece un valor para la derivada de la variable de interés en dirección normal al contorno,  $\frac{\partial u}{\partial n}$ . Esta condición es aplicada mediante la especificación del flujo,  $Q^i = Q_0$ , sobre el  $i$ -ésimo DOF correspondiente. En el caso específico de análisis elástico de un sólido, este tipo de condiciones de borde no garantizan la supresión de los

movimiento de cuerpo rígido, por cuanto la matriz de rigidez del sistema,  $\mathbf{K}$  sigue siendo singular. Para prevenir los movimientos de cuerpo rígido y obtener una solución única al sistema de ecuaciones, adicionalmente se deben fijar los DOF asociados a, al menos, un nodo bajo condición de Dirichlet.

- Condición de Robin:

$$a \frac{\partial u}{\partial x} + bu = \beta \quad \forall x \in \partial\Omega_R$$

- Las condiciones de borde mixtas corresponde al caso general que donde, sobre el contorno se prescribe una combinación lineal entre el valor de la variable de interés,  $u$ , y su derivada,  $\frac{\partial u}{\partial n}$ . Para este tipo de condición de contorno, el procedimiento es análogo a la combinación de los casos anteriores y, al igual que para condiciones de Neumann, para los casos en que la matriz de rigidez del sistema,  $\mathbf{K}'$  es singular, la fijación adicional de los DOF asociado a al menos 1 nodo deben adicionada para prevenir movimientos de cuerpo rígido y reducir el sistema cuya matriz de rigidez sea no singular.

#### 4.2.6. Formulación del Problema de Elasticidad Lineal

Para utilizar el FEM como herramienta numérica en la solución del equilibrio mecánico de un sólido elástico, es necesario describir el problema descrito por la EDP en los términos matriciales del método. Para lograr este objetivo, se hace comienza por recordar el potencial elástico,  $\Pi$ , de un sólido elástico:

$$\Pi = \int_v \varepsilon \sigma dv - \int_v U^\top f^b dv - \int_{\partial v} U^{s\top} f^s dS - \sum_i U^{i\top} R_C^i. \quad (4.38)$$

Aquí, en la ecuación 4.38, el primer término,  $\varepsilon \sigma$ , representa la densidad de energía de deformación interna del sólido, mientras que los siguientes términos representan el trabajo externo producto de las fuerzas de cuerpo, superficie y fuerzas concentradas, respectivamente.

Luego, en estado de equilibrio corresponde con un estado estacionario del potencial,  $\Pi$ , es decir:

$$\frac{\partial \Pi}{\partial U_i} = 0. \quad (4.39)$$

Con esto, una perturbación de este estado estacionario satisface la condición del principio de trabajo virtual que establece que, el trabajo virtual interno es igual al trabajo virtual externo, para cualquier conjunto de desplazamientos virtuales con un incremento nulo del potencial, es decir,  $\delta\Pi = 0$ . Luego, se obtiene el principio de trabajo virtual como:

$$\int_v \delta \bar{\varepsilon}^\top \sigma dv = \int_v \delta \bar{U}^\top f^b dv + \int_{\partial v} \delta \bar{U}^{s\top} f^s dS + \sum_i \delta \bar{U}^{i\top} R_C^i, \quad (4.40)$$

donde los términos  $\delta \bar{U}$  y  $\delta \bar{\varepsilon}$  corresponden a los desplazamientos virtuales y deformaciones asociadas a los mismos desplazamientos virtuales. Los tres requerimientos fundamentales de la mecánica del medio continuo sobre equilibrio, compatibilidad y relación constitutiva son satisfechos en el principio de trabajo virtual, para cualquier conjunto de desplazamientos virtuales, con el campo de esfuerzos debidamente obtenido a través del campo de desplazamientos continuo,  $U$ , que satisfaga las condiciones de contorno. En consecuencia, se tiene que:

$$\delta \bar{\varepsilon} \equiv \varepsilon \quad ; \quad \delta \bar{U} \equiv U \quad ; \quad \delta \bar{U}^s \equiv U^s \quad ; \quad \delta \bar{U}^i \equiv U^i. \quad (4.41)$$

Recordando la relación constitutiva para uno sólido,  $\sigma = \mathbf{C}\varepsilon$ , el principio de trabajo virtual de la ecuación 4.40 se puede reescribir como:

$$\frac{1}{2} \int_v \varepsilon^\top C \varepsilon dv = \int_v U^\top f^b dv + \int_{\partial v} U^{s\top} f^s dS + \sum_i U^{i\top} R_C^i. \quad (4.42)$$

Luego, bajo notación de Voigt, los tensores de esfuerzo,  $\sigma_{ij}$  y deformación,  $\varepsilon_{ij}$ , son expresados como vectores de la forma:

$$\begin{aligned} \sigma &= \{\sigma_1 \quad \sigma_2 \quad \sigma_3 \quad \tau_{23} \quad \tau_{13} \quad \tau_{12}\}^\top, \\ \varepsilon &= \{\varepsilon_1 \quad \varepsilon_2 \quad \varepsilon_3 \quad \gamma_{23} \quad \gamma_{13} \quad \gamma_{12}\}^\top. \end{aligned} \quad (4.43)$$

A su vez, el vector de deformaciones  $\varepsilon$  puede ser descrito en término de los desplazamientos como:

$$\varepsilon = \left\{ \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \quad \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \quad \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \quad \frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \quad \frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \quad \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right\}^\top. \quad (4.44)$$

Con lo anterior, la relación esfuerzo-deformación queda descrita en forma vectorial por la relación lineal:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon}, \quad (4.45)$$

donde la matriz  $\mathbf{D}$  es una matriz de dimensión  $6 \times 6$  que contiene los coeficientes no nulos del tensor

constitutivo elástico lineal  $C_{ijkl}$ .

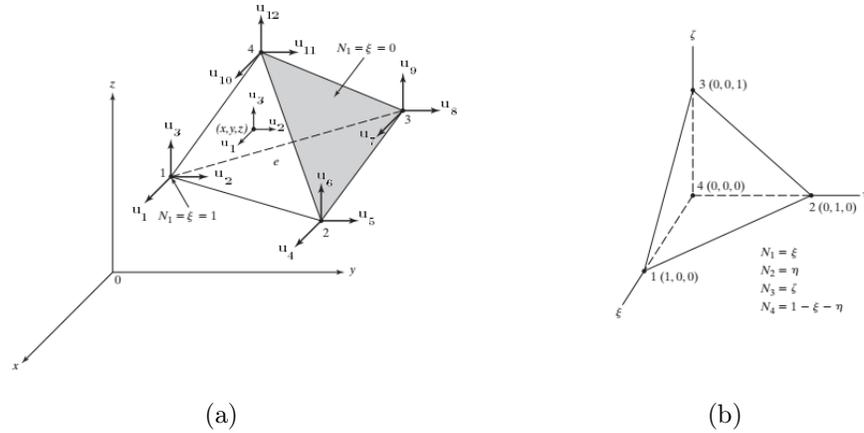


Figura 4.13: (a) Elemento tridimensional tetraédrico de 4 nodos y (b) elemento maestro para funciones de forma

Luego, para una discretización de elementos finitos tridimensional, considerando un subdominio (elemento) genérico tetraédrico de 4 nodos,  $\Omega^m$ , como el de la figura 4.13, se tiene el conjunto de desplazamientos nodales,  $u^m$ , como:

$$u^m = \{u_{11} \quad u_{12} \quad \dots \quad u_{nl}\}^T, \quad (4.46)$$

donde la dimensión de  $u^m$ ,  $nl$ , corresponde a la multiplicación entre el número de nodo del elemento,  $n$ , y el número de DOF de cada nodo,  $l$ , de manera que, para el caso tridimensional, un elemento tetraédrico de 4 nodos  $n \cdot l = 4 \cdot 3 = 12$ .

Luego, el campo de desplazamientos al interior del elemento  $\bar{u}_i$  puede ser descrito como función de los desplazamientos nodales,  $u^m$ , de la forma:

$$\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{N} \mathbf{u}^m, \quad (4.47)$$

donde la matriz  $\mathbf{N}$  está compuesta por las funciones de forma

$$N_1 = \xi \quad N_2 = \eta \quad N_3 = \zeta \quad N_4 = 1 - \xi - \eta - \zeta, \quad (4.48)$$

tal que:

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & N_3 & 0 & 0 & N_4 & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & N_3 & 0 & 0 & N_4 & 0 \\ 0 & 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & N_3 & 0 & 0 & N_4 \end{bmatrix}. \quad (4.49)$$

Con lo anterior, es claro que las componentes del campo de desplazamientos al interior del elemento quedan definidas por una combinación lineal de los desplazamientos nodales. Luego, recordando el uso de la regla de la cadena para la transformación de coordenadas entre las coordenadas espaciales,  $u_i$ , y las coordenadas locales del elemento,  $\xi, \eta, \zeta$ , a través de la transformación Jacobiana:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \xi} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \eta} & \frac{\partial x_2}{\partial \eta} & \frac{\partial x_3}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \zeta} & \frac{\partial x_2}{\partial \zeta} & \frac{\partial x_3}{\partial \zeta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{1(14)} & x_{2(14)} & x_{3(14)} \\ x_{1(24)} & x_{2(24)} & x_{3(24)} \\ x_{1(34)} & x_{2(34)} & x_{3(34)} \end{bmatrix} \quad (4.50)$$

donde  $x_{i(jk)} = x_{i(j)} - x_{i(k)}$  corresponde a la diferencia en la  $i$ -ésima componente del campo de desplazamientos entre los nodos  $j$  y  $k$  del elemento. Cabe destacar que, de la transformación Jacobiana anterior se tiene:

$$\det \mathbf{J} = \frac{1}{6} |V_e|, \quad (4.51)$$

donde  $V_e$  corresponde al volumen del elemento tridimensional, resultado que puede ser comprobado mediante la aplicación de las fórmulas de integración polinomial en coordenadas naturales [223]. Después, considerando la relación inversa a la ecuación 4.50, con  $\mathbf{A} = \mathbf{J}^{-1}$ , el vector de deformaciones,  $\boldsymbol{\varepsilon}$ , se puede describir en función de los desplazamientos nodales mediante:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B}\mathbf{u}^m, \quad (4.52)$$

donde la matriz  $\mathbf{B}$  es una matriz de dimensión  $6 \times 12$  de la forma:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 & 0 & A_{12} & 0 & 0 & A_{13} & 0 & 0 & -\tilde{A}_1 & 0 & 0 \\ 0 & A_{21} & 0 & 0 & A_{22} & 0 & 0 & A_{23} & 0 & 0 & -\tilde{A}_2 & 0 \\ 0 & 0 & A_{31} & 0 & 0 & A_{32} & 0 & 0 & A_{33} & 0 & 0 & -\tilde{A}_1 \\ 0 & A_{31} & A_{21} & 0 & A_{32} & A_{22} & 0 & A_{33} & A_{23} & 0 & -\tilde{A}_3 & -\tilde{A}_2 \\ A_{31} & 0 & A_{11} & A_{32} & 0 & A_{12} & A_{33} & 0 & A_{13} & -\tilde{A}_3 & 0 & -\tilde{A}_1 \\ A_{21} & A_{11} & 0 & A_{22} & A_{12} & 0 & A_{23} & A_{13} & 0 & -\tilde{A}_3 & -\tilde{A}_2 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.53)$$

donde  $\tilde{A}_i = A_{ij}$ . Esta expresión permite calcular las 6 componentes independientes del vector de deformaciones a partir de una combinación lineal de los  $4 \cdot 3 = 12$  valores nodales del campo de desplazamientos tridimensional. Con todo lo anterior, las diferentes matrices del sistema de ecuaciones para una formulación en cada subdominio,  $\Omega^m$ , de una discretización de elementos finitos planteado en la ecuación 4.33, para un problema de elasticidad lineal tridimensional, son derivados a partir de los correspondientes potenciales asociados al principio de trabajo virtual (ecuación 4.42). Así, la matriz de rigidez para un elemento se establece a partir del potencial elástico del elemento,  $\mathbb{U}_m$ , como:

$$\begin{aligned}\mathbb{U}_m &= \frac{1}{2} \int_{\Omega^m} \boldsymbol{\varepsilon}^\top \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon} dv \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{u}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{D} \mathbf{B} \mathbf{u} \int_{\Omega_m} dv \\ &= \frac{1}{2} V_m \mathbf{u}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{D} \mathbf{B} \mathbf{u} \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{u}^\top \mathbf{k}^m \mathbf{u}.\end{aligned}\tag{4.54}$$

De lo anterior, la matriz de rigidez para el elemento,  $\Omega_m$ , queda definida como  $\mathbf{k}^m = V_e \mathbf{B}^\top \mathbf{D} \mathbf{B}$ . De forma análoga, el vector de fuerzas de cuerpo,  $f^b$ , se obtiene a partir del potencial asociado, de la forma:

$$\begin{aligned}\int_{\Omega_m} \mathbf{u}^\top f^b dv &= \iiint_{\Omega_m} \mathbf{N}^\top \mathbf{f} \det \mathbf{J} d\xi d\eta d\zeta \\ &= \mathbf{u}^\top \mathbf{f}^b,\end{aligned}\tag{4.55}$$

de donde, utilizando las formulas de integración polinomial se tiene que:

$$\mathbf{f}^b = \frac{V_m}{4} \{f_1^b \quad f_2^b \quad f_3^b \quad \dots \quad f_3^b\}^\top,\tag{4.56}$$

con dimensión  $12 \times 1$ , para el caso de un elemento tetraédrico de 4 nodos. En la expresión anterior, los términos  $f_i^b$  corresponden a la  $i$ -ésima componente de la fuerza de cuerpo por unidad de volumen, en dirección  $x_i$ . Así mismo, el vector de fuerzas de superficie, para una fuerza uniformemente distribuida sobre la superficie,  $s1$ , de área  $A_{s1}$ , definida por los nodos 1, 2 y 3 de un elemento tetraédrico de 4 nodos, queda establecido por:

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega^m} \mathbf{u}^\top \mathbf{f}^s dA &= \mathbf{u}^\top \int_{\partial\Omega^m} \mathbf{N}^\top \mathbf{f}^s dA \\ &= \mathbf{u}^\top \mathbf{f}^{(s1)}, \end{aligned} \quad (4.57)$$

de manera que el vector de fuerzas de superficie elemental,  $\mathbf{f}_i^{m(s1)}$ , queda definido en forma explícita por:

$$\mathbf{f}^{(s1)} = \frac{A_{s1}}{3} \{\mathbf{f}_1^s \quad \mathbf{f}_2^s \quad \mathbf{f}_3^s \quad \mathbf{f}_1^s \quad \mathbf{f}_2^s \quad \mathbf{f}_3^s \quad 0 \quad 0 \quad 0\}^\top. \quad (4.58)$$

En la expresión anterior, las las ultimas 3 componentes toman valor 0 ya que, como se mencionó, la fuerza de superficie se distribuye sobre la superficie definida por los nodos 1, 2 y 3, y no sobre el nodo 4. Luego, el vector de fuerzas de superficie elemental completo,  $\mathbf{f}^m$ , queda definido por la suma de las componentes en las  $n$  diferentes superficies del elemento, esto es:

$$\mathbf{f}^s = \mathbf{f}^{(s1)} + \mathbf{f}^{(s2)} + \dots + \mathbf{f}^{(sn)} = \sum_{i=1}^n \mathbf{f}^{(si)}. \quad (4.59)$$

Finalmente, el ensamblaje de las ecuaciones para el sistema completo se realiza tal como se detalló en la sección anterior.

### 4.3. Simulación Directa de Monte Carlo

Los métodos de Monte Carlo pertenecen a una rama de las matemáticas experimentales cuyo enfoque son los experimentos aleatorios. Estos métodos se ocupan de resolver problemas de dos clases: (i) probabilísticos o (ii) determinísticos. En la primera clase, simplemente se observa el comportamiento de una variable aleatoria definida de manera que simule el comportamiento del problema original con el objetivo de obtener conclusiones sobre el comportamiento de la variable de análisis. Por otro lado, para la resolución de problemas determinísticos, los métodos de Monte Carlo buscan explotar las fortalezas del formalismo de las matemáticas teóricas evitando sus debilidades al reemplazar los complejos cálculos teóricos por la experimentación, entregando así una respuesta numérica [224].

### 4.3.1. Conceptos Generales

En la formulación típica de la simulación de Monte Carlo, para la resolución de un problema determinístico, un conjunto de  $N$  variables aleatorias de Bernoulli,  $X_j^N$  son definidas en un dominio,  $\Omega$ . Cada una de estas variables es definida como un vector  $n$ -dimensional de coordenadas aleatorias perteneciente al subespacio  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  donde se define el problema. Con esto:

$$X_j^N \in \Omega \subset \mathbb{R}^n \quad \forall j \in \{1..N\}. \quad (4.60)$$

A modo de ejemplo, en la figura 4.14a se muestra el dominio para el cálculo del número pi. Aquí, el dominio se encuentra definido por el primer cuadrante, es decir,  $\Omega \subset \mathbb{R}^2 | \{x, y\} \in [0, 1]$  y dentro de él, se define un cuarto de círculo unitario. En este problema, la razón entre el área del cuarto de círculo,  $A_{cir} = \pi r^2/4$ , y el área del cuadrado que los inscribe,  $A_{cuad} = r^2$ , permanece constante como  $R = A_{cir}/A_{cuad} = \pi/4$ , de modo que el número pi puede ser determinado como  $\pi = 4R$ .

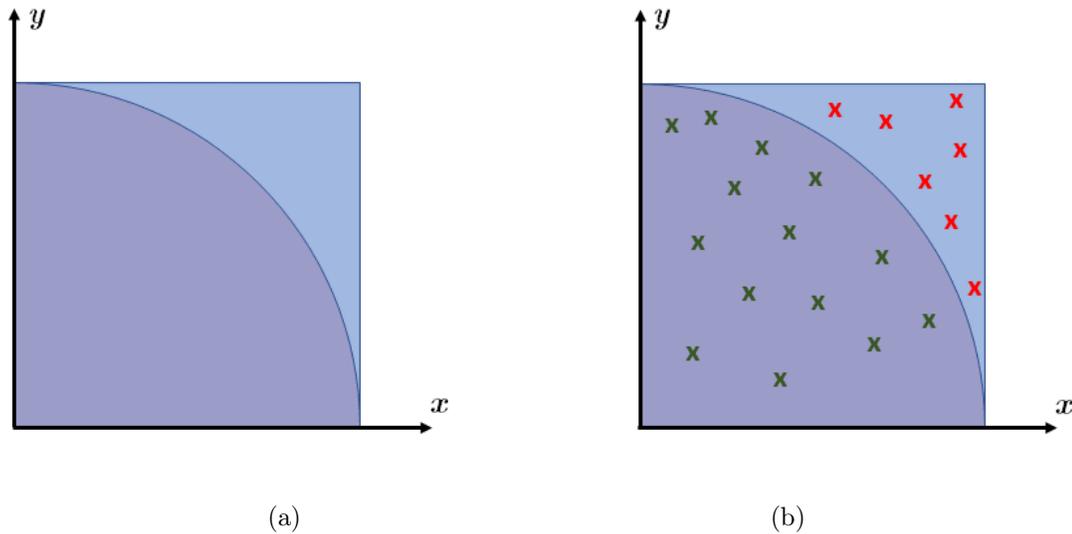


Figura 4.14: Cálculo de  $\pi$  mediante simulación de Monte Carlo (a) definición del dominio de análisis (azul) y zona de definición para *éxito* de los ensayos de Monte Carlo y (b) ejemplo de ensayos independientes realizados con ensayos de *éxito* (verde) y *fracaso* (rojo).

Luego, cada variable aleatoria,  $X_j^N$ , es llamada un *ensayo* y es evaluada de acuerdo con una función de distribución de probabilidad dada por:

$$f(\mathbf{X}) = \begin{cases} 1 & \text{en caso de éxito} \\ 0 & \text{en caso de fracaso} \end{cases}. \quad (4.61)$$

En la función de distribución de probabilidad de la ecuación 4.61, los conceptos de *éxito* y *fracaso* son definidos en forma arbitraria y *ad-hoc*, de acuerdo con el experimento a realizar. Para el ejemplo, la función de distribución de probabilidad se define de manera que el caso de *éxito* corresponde a los puntos ubicados al interior del sector circular, mientras que el caso de *fracaso* corresponde a los puntos que se encuentre fuera de él, esto es:

$$f(\mathbf{X}) = \begin{cases} 1 & \text{si } x^2 + y^2 \leq 1 \\ 0 & \text{en caso de fracaso} \end{cases}. \quad (4.62)$$

En la figura 4.14b, se muestra el resultado de los diferentes ensayos aleatorios donde cada cruz corresponde a un ensayo independiente. Aquí, las cruces verdes son identificadas como *éxito* y las cruces rojas como *fracaso*.

Para un número definido arbitrario de  $N$  ensayos independientes de Bernoulli que se realicen sobre la misma población, se sabe que siguen una distribución binomial, donde el estimador  $\lambda_N$  de la esperanza,  $\lambda = Np$ , es determinado como el producto de la probabilidad de éxito,  $p$ , y el número de ensayos independientes,  $N$ , con esto,  $\mathbf{X}_j^N \sim B(N, p)$  [225]. Aquí, la esperanza,  $\lambda$  representa el número esperado de éxitos contenidos en una muestra aleatoria de tamaño  $N$ . Luego, la desconocida probabilidad de éxito es estimada a partir del estimador muestral de la esperanza,  $\lambda_N$ , y el tamaño de la muestra,  $N$ , según:

$$p_N = \frac{\lambda_N}{N}. \quad (4.63)$$

Adicionalmente, se sabe que el estimador para la probabilidad de éxito,  $p_N$  tiende al valor real,  $p$ , de la distribución binomial en el límite cuando el tamaño de muestra,  $N$ , crece, es decir:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} p_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\lambda_N}{N} = p. \quad (4.64)$$

Para evaluar la función de probabilidad de la ecuación 4.63, se define un algoritmo en base a la función de distribución de probabilidad de la ecuación 4.61, denominado *oráculo*. Este algoritmo contiene toda la información conocida *a priori* sobre el dominio matemático y es llamado para evaluar cada uno de los ensayos independientes, luego, el algoritmo retorna el valor de la función de distribución de probabilidad,  $f(X)$ , como un valor binario (1 o 0). En el caso del ejemplo, el oráculo está definido por la función de la ecuación 4.62.

Finalmente, para el ejemplo mostrado, en la figura 4.15 se muestra un ejemplo del valor de  $\pi$  calculado

utilizando la simulación de Monte Carlo a través de experimentos con diferente número de ensayos. En esta figura se puede observar que, en la medida que el número de ensayos aumenta, la tendencia general es a una mayor precisión en el cálculo realizado.

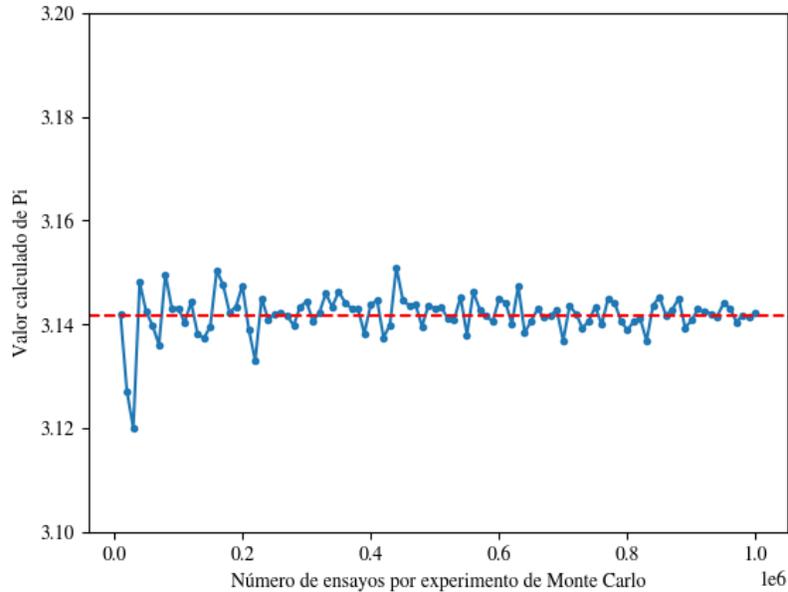


Figura 4.15: Valor calculado de  $\pi$  utilizando simulación de Monte Carlo para experimentos con diferente número de ensayos independientes

### 4.3.2. Generación Aleatoria de Puntos

Como se mencionó en la sección anterior, cada ensayo de Bernoulli,  $\mathbf{X}_j^N$ , corresponde a un vector aleatorio definido al interior del dominio del problema. Si bien cada uno de los puntos definidos por estos vectores puede ser generado en forma aleatoria, existen estrategias que permiten mejorar la eficiencia y el rendimiento computacional de la simulación de Monte Carlo, una de estas estrategias es la de muestreo por hipercubo latino (o *Latin Hypercube Sampling*, LHS) [226]. Aquí, cada una de las dimensiones del dominio se divide en un total de  $m$  estratos equiprobables,  $\mathbf{S}_{ijk} \dots$ . Recordando el ejemplo de la sección anterior para el cálculo del número  $\pi$ , el dominio  $\Omega \subset \mathbb{R}^2 | \{x, y\} \in [0, 1]$  es estratificado en de manera que cada estrato,  $\mathbf{S}_{ij}$ , queda definido como:

$$\mathbf{S}_{ij} = \{x, y\} \subset \mathbb{R}^2 | \{x, y\} \in \left\{ \left[ \frac{i}{m}, \frac{(i+1)}{m} \right], \left[ \frac{j}{m}, \frac{(j+1)}{m} \right] \right\} \text{ para } \{x, y\} \in [0, \dots, m-1], \quad (4.65)$$

como se muestra en la figura 4.16a.

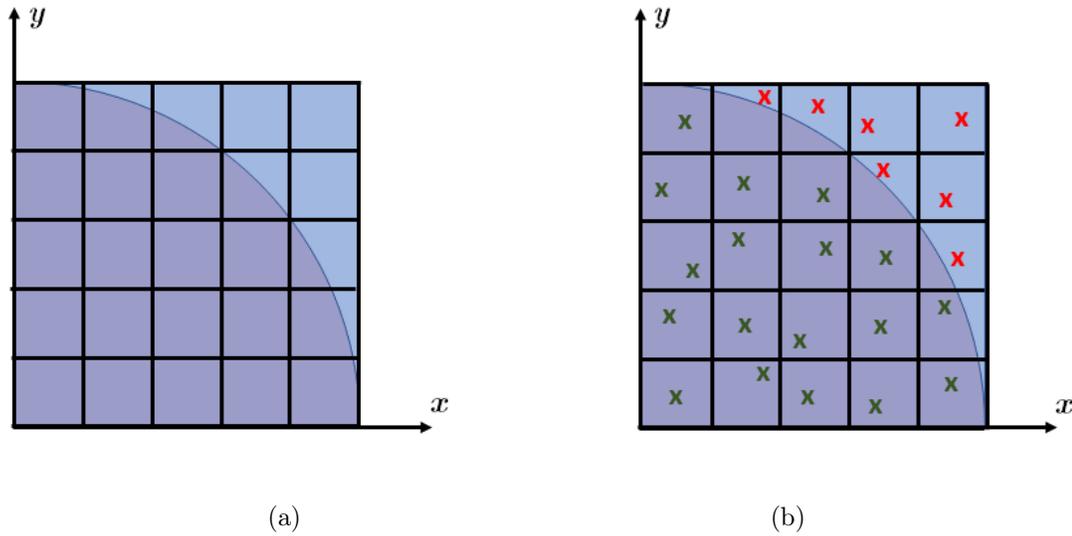


Figura 4.16: Dominio para el calculo de  $\pi$  (a) estratificación para LHS y (b) ejemplo de ensayos realizados para un experimento de Monte Carlo con ensayos calificados como *éxito* (verde) y *fracaso* (rojo).

Como el caso tridimensional requiere de 3 índices, cada estrato es identificado como  $\mathbf{S}_{ijk}$ . Luego, para el caso de un cubo de longitud de arista  $a$ , definido como

$$\Omega = \{ \mathbf{X} \subset \mathbb{R}^3 | X_i \in (0, a) \quad i \in [1, 2, 3] \}, \quad (4.66)$$

cada estrato,  $\mathbf{S}_{ijk}$ , queda definido por los segmentos:

$$\mathbf{S}_{ijk} = \begin{bmatrix} il, (i+1)l \\ jl, (j+1)l \\ kl, (k+1)l \end{bmatrix} \quad \text{para } \{i, j, k\} \in [0, 1, \dots, (m-1)], \quad (4.67)$$

donde  $l = a/m$  es la longitud del estrato en cada una de las dimensiones. Para el caso más general de un paralelepípedo arbitrario de dimensiones  $a_i | i = [1, 2, 3]$ , las longitudes  $l_i = a_i/m$  pueden ser utilizadas para la  $i$ -ésima dimensión de la ecuación 4.67. Finalmente, cada uno de los  $N = m^n$  estratos,  $\mathbf{S}_{ijk\dots}^N$ , es muestreado en forma aleatoria una y solamente una vez, para cada experimento, mediante la generación de un punto aleatorio uniformemente distribuido,  $\mathbf{X}_{ijk\dots}^N$ , de la forma:

$$\mathbf{X}_{ijk\dots}^N = \{ \mathbf{X} \in \mathbf{S}_{ijk\dots}^N \subset \mathbb{R}^n \forall \{i, j, k\dots\} \in [0, 1, \dots, (m-1)] \}. \quad (4.68)$$

Para el ejemplo, se tiene que en cada estrato,  $\mathbf{S}_{ij}^N \subset \mathbb{R}^2$ , se genera un punto aleatorio,  $\mathbf{X}$ , tal que  $\mathbf{X}_{ij}^N \in \mathbf{S}_{ij}^N$ , como se muestra en la figura 4.16b. En el caso tridimensional de un cubo, cada uno de los  $N = m^3$  estratos,  $\mathbf{S}_{ijk}^N$ , es muestreado, mediante los puntos  $\mathbf{X}_{ijk}^N$  de la forma:

$$\mathbf{X}_{ijk}^N = \{X \in \mathbf{S}_{ijk}^N \subset \mathbb{R}^3 \forall \{i, j, k\} \in [0, 1, \dots, (m-1)]\}. \quad (4.69)$$

Con lo anterior, se genera un total de  $N = m^3$  variables aleatorias de Bernoulli. Así mismo, para la  $k$ -ésima muestra aleatoria con tamaño  $N$ , la esperanza  $\lambda_k = \frac{1}{N}p_i$ , donde  $p_i$  corresponde a la probabilidad de éxito muestral, definida como la suma de éxitos en la muestra.

Se destaca además que, el muestreo LHS es considerado un muestreo eficiente y permite una disminución en la varianza entre experimentos de Monte Carlo, su implementación no influye en la exactitud de los resultados obtenidos [227, 228]. En la figura 4.17 se muestra la comparación entre los resultados para el cálculo del número  $\pi$ , mediante simulación de Monte Carlo utilizando una estrategia de muestreo aleatorio (figura 4.17a) y LHS (figura 4.17b), para experimentos independientes utilizando entre 10 mil y 1 millón de ensayos. Allí, se puede observar cómo la utilización de una estrategia de muestreo LHS permite obtener una menor variabilidad en los resultados.

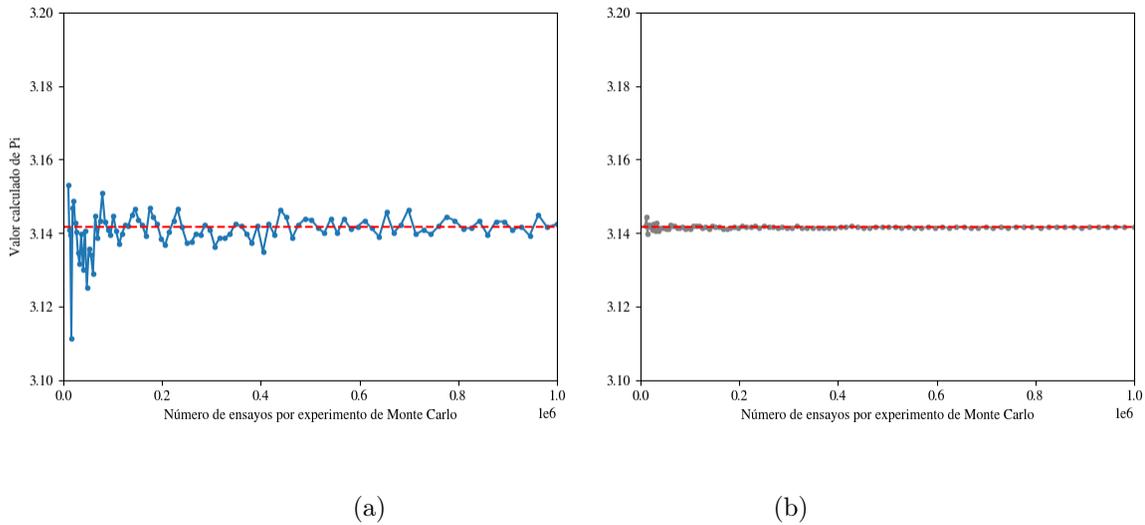


Figura 4.17: Valor calculado de  $\pi$  mediante simulación de Monte Carlo para simulaciones entre 10 mil y 1 millón de ensayos utilizando (a) estrategia de muestreo aleatorio y (b) estrategia de muestreo LHS comparados con el valor exacto (línea roja discontinua).

### 4.3.3. Convergencia de la Simulación

Como es sabido, habitualmente la media muestral,  $\bar{p}$ , no coincide con la media poblacional,  $p$ , de la distribución por lo que es una práctica recurrente el evaluar los resultados de la simulación de Monte Carlo en base a la distribución de las medias muestrales calculadas de manera independiente. Luego, en vez de calcular un valor exacto para la media de la población, define un intervalo para este valor permitiendo un error tipo I de  $\alpha$ . Esto es, se establece un intervalo de confianza centrado en el estimador,  $\bar{p}$ , dentro del cual se considera una probabilidad de  $(1 - \alpha)$  de que la media poblacional se encuentre en su interior [229, 230]. Para una variable aleatoria normalmente distribuida, con desviación estándar desconocida y un tamaño de muestra,  $n$ , es sabido que un intervalo de confianza con un nivel de  $(1 - \alpha)$  puede ser establecido en base al estimador de la media,  $\bar{p}_n$  y su desviación estándar,  $S_n$ , o su error estándar,  $S_n/\sqrt{n}$ , por:

$$Pr[\bar{p}_n - t_{n-1}(1 - \frac{\alpha}{2})\frac{S_n}{\sqrt{n}} \leq p \leq \bar{p}_n + t_{n-1}(1 - \frac{\alpha}{2})\frac{S_n}{\sqrt{n}}] = 1 - \alpha, \quad (4.70)$$

donde  $t_{n-1}$  corresponde a la distribución t-student de  $(n - 1)$  DOF. Luego, para tamaños de muestra suficientemente grandes (i.e:  $n \geq 30$ ), la distribución de t-student puede ser correctamente aproximada por la distribución Normal Estándar ( $Z$ ). Con lo anterior, la ecuación 4.70 puede ser reescrita como:

$$Pr[\bar{p}_n - Z(1 - \frac{\alpha}{2})\frac{S_n}{\sqrt{n}} < p < \bar{p}_n + Z(1 - \frac{\alpha}{2})\frac{S_n}{\sqrt{n}}] = 1 - \alpha. \quad (4.71)$$

Cuando el percentil normal estándar  $Z(1 - \alpha/2) = 3$ , la ecuación 4.71 toma la forma de la conocida regla de 3-sigma, que establece un intervalo de confianza para un nivel de confianza del 99.97%. Luego, para cualquier tamaño de muestra se puede establecer un nivel de incertidumbre,  $\epsilon$ , el cual es función de su error estándar. Luego, considerando que el error estándar disminuye en la medida que el tamaño de muestra crece, esto puede ser utilizado como una regla de detención para el algoritmo basada en el nivel de incertidumbre, esto es:

$$a\frac{S_n}{\sqrt{n}} \leq \epsilon \Rightarrow \frac{S_n}{\sqrt{n}} \leq \frac{\epsilon}{a}, \quad (4.72)$$

donde el parámetro  $a$  es la cantidad de desviaciones estándar permitidas en la incertidumbre y el correspondiente nivel de confianza que puede ser dado tanto por los percentiles definidos en la distribución de t-student o en la distribución Normal Estándar. Para el ejemplo, en la figura 4.18 se muestra el comportamiento convergente para la solución del cálculo del valor de  $\pi$  mediante simulación de Monte

Carlo, a través de la realización de  $n$  experimentos consecutivos con un total de mil ensayos en cada uno. Allí, la figura 4.18a muestra el comportamiento utilizando un método de muestreo aleatorio, mientras que en la figura 4.18b se observa, para el mismo problema, la respuesta del sistema utilizando un muestro de tipo LHS. De esta figura, es evidente cómo la utilización de un muestreo eficiente permite obtener una convergencia más rápida, esto es, en una menor cantidad de iteraciones o experimentos.

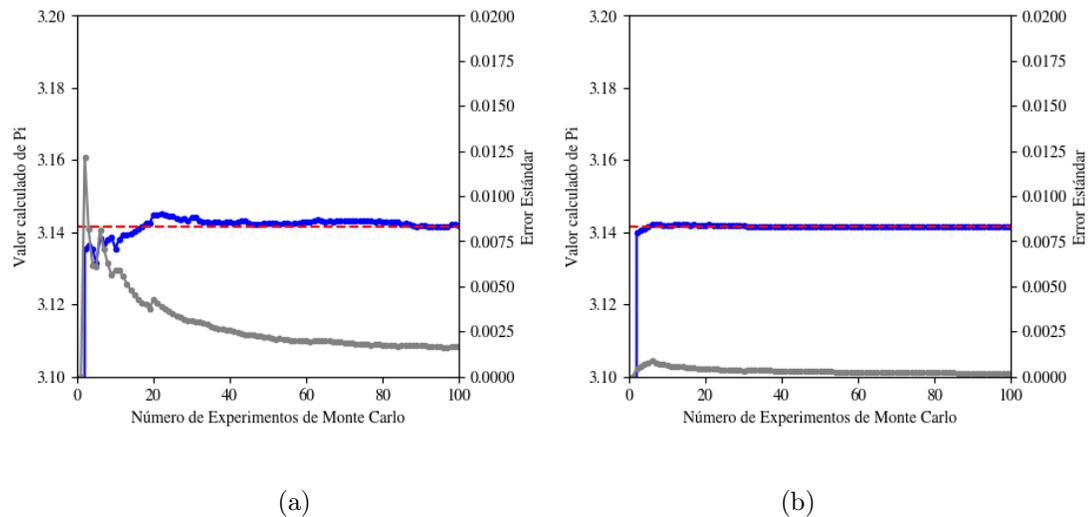


Figura 4.18: Comportamiento convergente para  $n$  experimentos de Monte Carlo sucesivos en el cálculo de  $\pi$  donde se observa el valor promedio (puntos en azul), el error estándar (puntos en gris) y el valor exacto de la solución del problema (línea roja punteada) para simulación de Monte Carlo realizada con (a) muestreo aleatorio simple y (b) muestreo tipo LHS.

## Capítulo 5

# Metodología DEM-FEM

Como se mencionó en el capítulo 1, en este trabajo se realiza una extensión de la metodología numérica DEM-FEM propuesta por Pérez et al., para la estimación de la respuesta mecánica de espumas metálicas con porosidad funcionalmente dirigida. En la figura 5.1 se muestra un esquema general de las diferentes etapas que componen esta metodología.

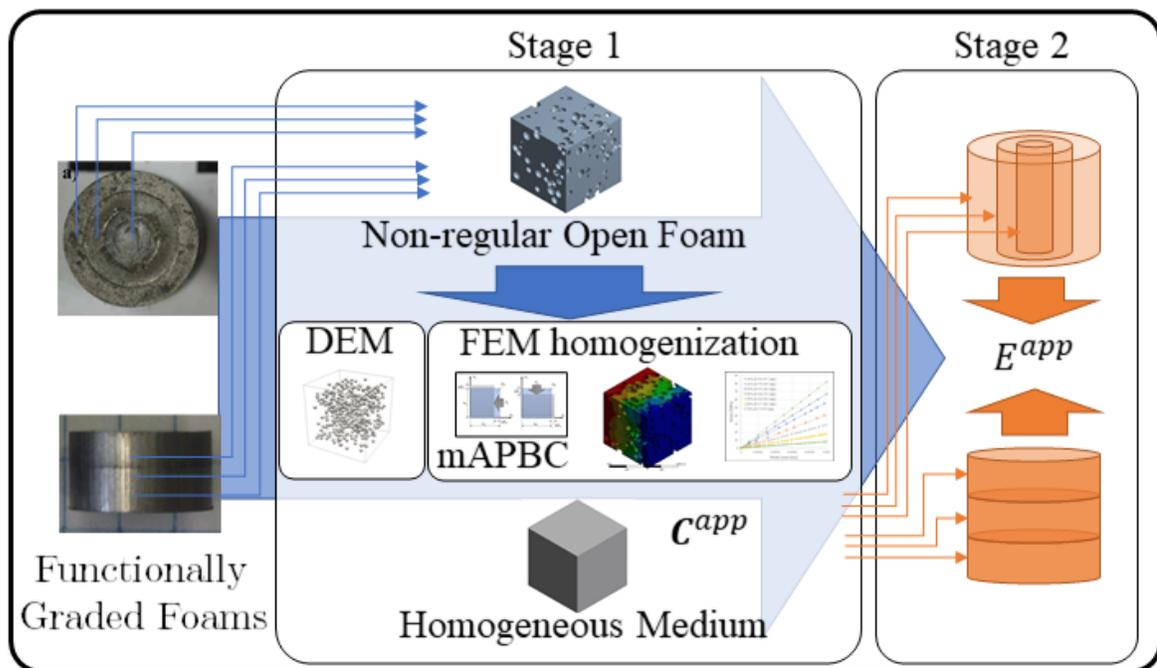


Figura 5.1: Esquema metodología numérica basada en DEM-FEM extendida para la estimación del comportamiento mecánico de espumas metálicas con porosidad funcionalmente dirigida

Como se puede observar en la figura 5.1, esta metodología se encuentra separada en tres bloques

principales. El primer bloque, corresponde a la definición e identificación de variables micro y macro estructurales de las las espumas metálicas. Entre estos parámetros se destaca:

- Dimensiones generales del modelo
- Dimensiones de tamaños de poros individuales
- Direccionalidad y orientación de la la graduación de porosidad
- Niveles (porcentajes) de porosidad de cada capa

En el segundo bloque, identificado como *stage 1*, se realiza una primera fase de homogeneización, donde se establecen las propiedades mecánicas equivalentes de cada una de las capas que componen la espuma metálica con porosidad funcionalmente dirigida. En el tercer bloque, una segunda fase de homogeneización (*stage 2*) combina la información obtenida en la etapa 1 para simular y calcular las propiedades mecánicas aparentes del espécimen considerando la porosidad funcionalmente dirigida deseada.

En este capítulo, se detalla tanto los diferentes pasos que componente cada uno de los bloques y/o etapas de la metodología propuesta, como también los parámetros relevantes a considerar en el estudio.

## 5.1. Caracterización de Microestructuras

Como se ha establecido, las propiedades mecánicas de las espumas metálicas son función tanto de las propiedades mecánicas del metal base como de la microestructura resultante. Entre los factores microestructurales que mayor influencia tienen en la respuesta mecánica se encuentran el tipo el tamaño de poro, nivel de porosidad y tipo de celda (abierta o cerrada) [232, 233]. Con el objetivo de proveer de información objetiva respecto de estos parámetros, en este trabajo se incluye un estudio estadístico descriptivo que permita realizar una comparaciones futuras entre las geometrías CAD obtenidas por simulación DEM con datos de laboratorio de secciones transversales de espumas metálicas fabricadas por pulvimetalurgia de espaciadores.

Para el análisis de la estructura generada, se realiza un corte virtual a la geometría CAD, como se muestra en la figura 5.2, de forma análoga a los cortes transversales realizados en laboratorio. Luego, las características como distribución de tamaño de poro y nivel de interconexión son establecidas mediante análisis geométrico.

El corte transversal virtual de la geometría se realiza intersectando un plano arbitrario, ubicado a una altura  $z_0$ , con la geometría CAD (figura 5.3a). Como la geometría está definida a partir de la intersección

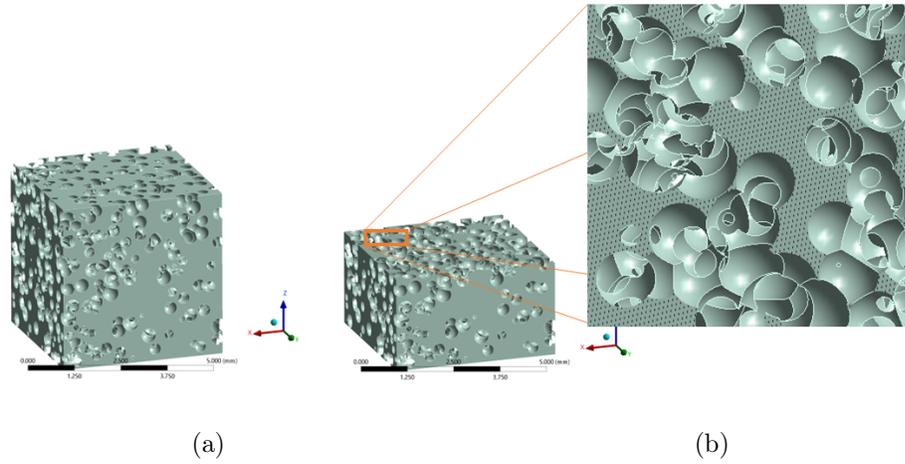


Figura 5.2: Ejemplo corte transversal en espumas metálicas (a) geometría completa y (b) detalle de corte

de una preforma (i.e: un cubo de lado  $a$ ) y la unión de un conjunto de esferas definidas por su centro,  $(x_i, y_i, z_i)$ , y su radio,  $r_i$ , se puede establecer el subconjunto de esferas que son intersectada por el plano arbitrario a través de la distancia entre el plano y el centro, como se muestra en la figura 5.3b. Luego, cuando esta distancia entre el plano y el centro del poro,  $\Delta z_i$ , es inferior al radio del poro,  $r_i$ , se calcula un radio de poro equivalente,  $re_i$ , del círculo que intersecta el plano, dado por:

$$re_i = \sqrt{r_i^2 - (\Delta z_i)^2} \quad (5.1)$$

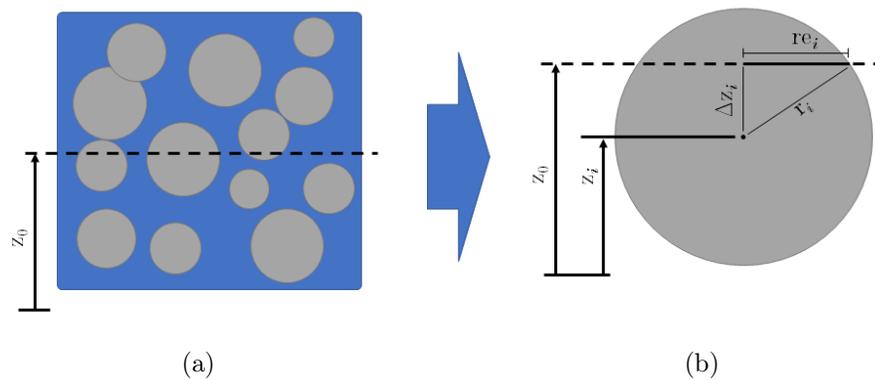


Figura 5.3: Esquema para definición de radio equivalente de poro (a) ubicación plano de corte arbitrario y (b) geometría resultante de intersección

Finalmente, la superficie del plano de corte para el análisis queda definida a partir de la intersección entre la preforma de la geometría, el plano de corte a la altura  $z_0$  y la unión del conjunto de círculos con radios equivalentes,  $re_i$ . Para realizar una búsqueda eficiente de las esferas que intersectan el plano

de corte, se utiliza la técnica de listas enlazadas, donde cada esfera es mapeada a una coordenada entera en dirección  $Z$ ,  $z_{int}$ . Luego, la lista de potenciales candidatos a intersectar el plano de corte se reduce a sólo aquellas esferas cuya coordenada entera  $Z$  se encuentre en el entorno inmediato de la coordenada entera  $Z$  del plano de corte,  $i$  (i.e:  $z_{int} \in \{i - 1, i, i + 1\}$ ).

### Distribución de Tamaños de Poro

Si bien el tamaño de los poros contenidos en las geometrías CAD se encuentran distribuidos entre un tamaño mínimo y un tamaño máximo, definidos *a priori*, esta distribución no coincide necesariamente con la de un plano arbitrario de corte ya que, en general, los radios equivalentes que se proyectan hacia esta superficie son inferiores a los reales, con una distribución desconocida. Una vez conocida la superficie de corte, a través de la lista de la unión de círculos que intersectan el plano de corte, su distribución se obtiene en forma directa. Así, es posible realizar un análisis recursivo sobre la geometría, para diferentes planos de intersección.

### Nivel de Interconexión de Poros

Para cuantificar el nivel de interconexión de poros existente en las geometrías generadas mediante simulación DEM, se hace uso de la información obtenida para los planos de corte. Para dos poros ( $P_1 = (x_1, y_1)$  y  $P_2 = (x_2, y_2)$ ) que se encuentra relativamente próximos el uno del otro, es posible que exista una superposición entre ambos. Para el caso en que no existe un traslape (figura 5.4a), el tamaño de la pared que los separa puede ser calculado por:

$$w_{th} = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} - (r_1 + r_2), \quad (5.2)$$

donde  $r_1$  y  $r_2$  corresponden a los respectivos radios. Para el caso contrario, donde existe una superposición entre dos poros (i.e: interconexión), el espesor de pared calculado,  $w_{th}$ , toma un valor negativo, lo que es interpretado como la distancia de interconexión entre ambos poros,  $d_{int}$ .

Luego, para calcular esta distancia,  $d_{int}$ , los términos de la ecuación 5.2 se reordenan, de acuerdo con la figura 5.4b, como:

$$d_{int} = r_1 + r_2 - \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}, \quad (5.3)$$

de manera se obtiene un valor positivo. Adicionalmente, para el caso de los planos de análisis, los valores

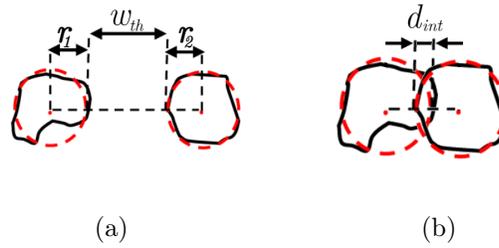


Figura 5.4: Esquema de dimensiones características calculadas a partir de la distancias entre poros (a) espesor de pared [234] y (b) distancia de interconexión

utilizados corresponden a las ubicaciones en X e Y de cada centro y los radios equivalentes,  $re_i$  y  $re_j$ .

Para establecer el nivel de interconexión existente en las geometrías generadas mediante simulación DEM, se ha desarrollado un código en lenguaje Python, que establece cortes transversales sucesivos sobre las geometrías CAD calculando la distribución de longitud de interconexiones presentes en cada una. Como método para realizar una comparación eficiente de los diferentes pares de poros que pueden interactuar para una posible interconexión, se ha implementado el algoritmo NBS de Munjiza-Rugier [208]. En esta implementación, la utilización de listas enlazadas simples para las coordenadas X e Y permiten limitar la cantidad de círculos a comparar, de igual manera que se realiza la búsqueda de pares de contacto durante la simulación DEM.

### 5.1.1. Porcentaje de Porosidad

En este trabajo, la simulación de Monte Carlo ha sido utilizada como una herramienta numérica para la resolución de un problema determinístico definido por el cálculo del volumen de fase vacía contenida en una geometría que representa una espuma metálica con el objetivo de estimar el porcentaje de porosidad existente. Aquí, el dominio de una espuma con porosidad abierta es definida como la intersección del interior de un volumen exterior (como un cubo o un cilindro) y el exterior de la unión de una secuencia de esferas, las cuales tienen permitido intersectar la superficie exterior del volumen exterior, con el objetivo de generar porosidad en la superficie. Debido a que las esferas también tienen permitido un margen de superposición entre ellas, tanto la geometría del dominio, como la unión de las esferas, forman un conjunto no-convexo. Así, el cálculo del volumen, ya sea para la fase sólida o para la fase vacía, suponen un problema sin una solución analítica cerrada simple.

Para resolver un problema similar al propuesto por el cálculo del volumen de la fase vacía, investigadores como Cazals et al. y Till y Ullmann han abordado el cálculo de la unión entre esferas tanto en forma analítica, como mediante la utilización de la simulación de Monte Carlo [235, 236]. Aunque generales, estos algoritmos son implementados, principalmente, en el área de la bioquímica, para el cálculo de

volumen de proteínas. En este trabajo, un algoritmo basado en la simulación directa de Monte Carlo es implementado en lenguaje Python, para la determinación de la porosidad de geometrías CAD que representan una espuma metálica de porosidad abierta.

El algoritmo presentado a continuación ha sido desarrollado e implementado en código Python para la estimación eficiente del volumen y porcentaje de porosidad de espumas CAD generadas a partir de simulación DEM. Esta implementación ha dado origen a la primera publicación científica asociada a este trabajo de tesis y tanto el código desarrollado como los resultados de los experimentos de prueba realizados para validar el código han sido publicados y se encuentran disponibles en [Campillo et al. \[237\]](#).

Un conjunto de  $N$  variables independientes de Bernoulli,  $X_j^N$ , se definen mediante un vector de coordenadas aleatorias al interior del dominio,  $\Omega$ , de análisis, donde cada variable aleatoria es denominada *ensayo* (Ver capítulo 4). Para cada ensayo de Bernoulli, la función de distribución de probabilidad,  $f(\mathbf{X})$  es definida mediante un algoritmo denominado *oráculo*, el cual es consultado para obtener como respuesta un valor binario, para determinar si este corresponde a un *éxito* o un *fracaso* del experimento.

La implementación realizada para este trabajo, considera el caso de *éxito* cuando un ensayo corresponde a un punto al interior de alguna de las esferas que definen la fase vacía de la geometría, con esto:

$$f(\mathbf{X}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{X} \in \text{poro} \\ 0 & \text{si } \mathbf{X} \notin \text{ningún poro} \end{cases}. \quad (5.4)$$

Luego, como se sabe que un número arbitrario,  $N$ , de ensayos independientes siguen una distribución binomial con una probabilidad de éxito,  $p$ , (i.e:  $X \sim B(N, p)$ ), el estimador para la probabilidad de éxito,  $p_N$ , es definido como:

$$p_N = \frac{\lambda_N}{N}. \quad (5.5)$$

Con esto, para un conjunto de  $n$  experimentos independientes, se tiene el intervalo de confianza para un error tipo I de  $\alpha$  dado por la ecuación 4.71.

## 5.2. Generación de Distribución No-estructurada de Poros

Con el objetivo de generar geometrías CAD que contengan una microestructura similar a la de aquellas obtenidas por el proceso de mezcla entre polvos metálicos y agente espaciador en pulvimetalurgia de espaciadores, se utiliza la simulación DEM para modelar la interacción de las partículas del agente

espaciador durante el proceso de mezcla, generando una distribución no-estructurada para la posición de las partículas permitiendo observar características tales como la presencia de porosidad en la superficie de la geometría, aglomeración localizada e interconexión entre los poros individuales formando macroporos y porosidad abierta, entre otros, como se observa en la figura 5.5.



Figura 5.5: Espuma de Mg fabricada por pulvimetalurgia de espaciadores donde se observan características como porosidad abierta, presencia de poros en la superficie, aglomeración localizada e interconexión entre poros individuales

La generación de las geometrías CAD porosas corresponde a un proceso en tres etapas. Este proceso, que se muestra esquemáticamente para un caso bidimensional en la figura 5.6, incluye una etapa de simulación DEM, una de postprocesamiento y una etapa de análisis de las geometrías que se ejecutan de manera secuencial, según se requiera.

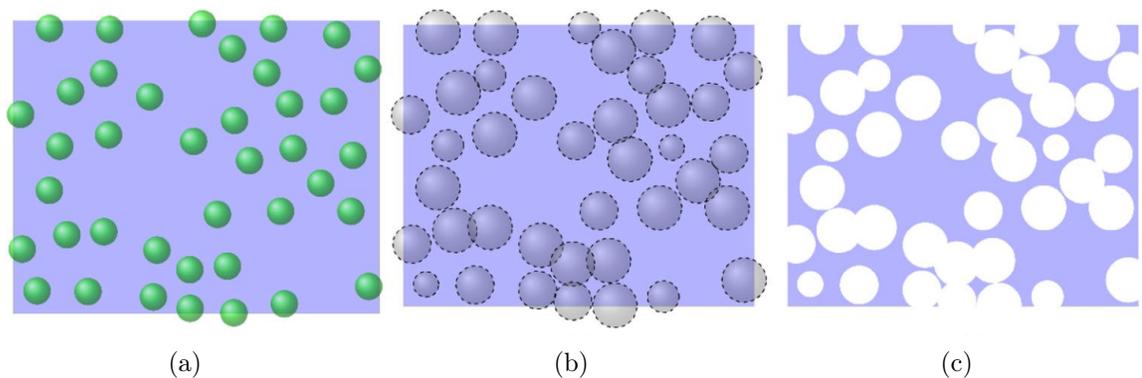


Figura 5.6: Esquema bidimensional del proceso de 3 etapas para la generación de geometrías CAD porosas con distribución no-estructurada de poros. (a) modelación DEM de partículas espaciadoras, (b) asignación uniformemente distribuida para el radio individual de poros y (c) geometría CAD final

En la primera etapa, se realiza la modelación de la interacción de las partículas del agente espaciador utilizando el software para simulación DEM de código libre LIGGGHTS [210]. Aquí, un conjunto de partículas rígidas con un tamaño inferior al tamaño de los poros individuales son liberadas al interior de un dominio de simulación DEM (ver figura 5.6a) correspondiente a un subespacio concéntrico de dimensiones ligeramente mayores a las deseadas para la geometría CAD. En este trabajo, se considera un

espacio extra igual al una vez el máximo diámetro nominal de poro ( $d_{poro}^{max}$ ) en cada una de las direcciones y partículas con un radio igual a un cuarto del máximo diámetro nominal (e.g:  $r_{DEM} = 0.25 d_{poro}^{max}$ ). Esto es, para una geometría CAD con tamaños de poro entre 350 y 450  $\mu m$  se considera un dominio cuyas dimensiones se extienden 450  $\mu m$  extra en cada dirección (tanto en sentido positivo como negativo, junto a partículas con un radio de 112  $\mu m$ . Luego, las partículas rígidas del DEM son introducidas al dominio con condiciones iniciales de velocidad con diferente dirección y dejadas en el interior para que interactúen. Las propiedades elásticas y de contacto para la simulación DEM son seleccionadas para asegurar que las partículas contengan alta energía cinética inicial y baja disipación durante el proceso de simulación, en forma similar a las utilizadas por Pérez et al. Estas propiedades se resumen en la tabla 5.1.

Tabla 5.1: Propiedades elásticas para modelo de contacto de Hertz-tangencial para la simulación DEM de partículas rígidas

Propiedad	Valor	Unidad
Módulo de Young	$5.0 \times 10^9$	MPa
Razón de Poisson	0.45	mm/mm
Coef. Restitución	0.95	-
Coef. de Fricción	0.05	-
Velocidad Inicial	1.0	mm/s

Una vez finalizada la simulación DEM, los resultados obtenidos son procesados, y la distribución de las partículas de los espaciadores es utilizada como base para la generación de scripts de entrada para el pre-procesador de análisis mediante el FEM ANSYS en formato *Javascript*. En esta etapa, a cada partícula espaciadora de la distribución se le asigna un nuevo radio aleatorio, proveniente de una distribución uniformemente distribuida (ver figura 5.6b), cuyo valor se encuentre dentro de los rangos establecidos, (e.g:  $350 \mu m \leq 2 \cdot r \leq 450 \mu m$ ).

Finalmente, en una tercera etapa, las geometrías CAD generadas (ver figura 5.6c) y analíticamente definidas en los diferentes códigos *Javascript* son analizados para verificar que las geometrías CAD replican de manera adecuada la microestructura y características tales como porosidad de las espumas fabricadas por pulvimetalurgia de espaciadores. Este análisis es realizado con la ayuda de los códigos desarrollados para cálculo de porosidad mediante simulación de Monte Carlo y análisis de parámetros microestructurales.

En la figura 5.7 se muestra la comparación entre la microestructura de un espécimen de espuma de CP-Ti fabricada mediante pulvimetalurgia de espaciadores (reproducida desde ref [97]) y una geometría CAD generada a partir de simulación DEM. Aquí, se observan la similitudes cualitativas entre ambas microestructuras, en particular cuando se observa un extracto de la parte central de la geometría (figura 5.7b) y la geometría CAD (figura 5.7c).

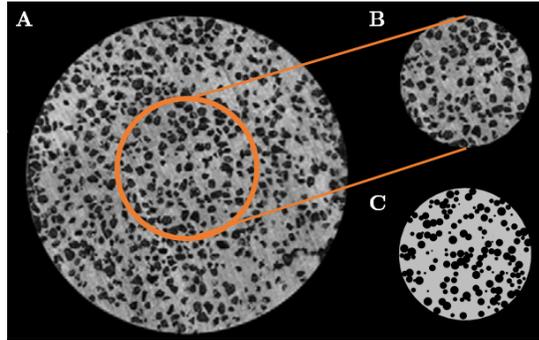


Figura 5.7: Microestructura de espuma fabricada por pulvimetalurgia de espaciadores con poros en el rango de 300 - 500  $\mu m$ . (a) Micrografía de espuma de CP-Ti con 55 % nominal de porosidad [97], (b) extracto de la zona central y (c) geometría CAD generada a partir de simulación DEM con diámetro 7 mm y 55 % porosidad

Parte del proceso de calibración de la simulación DEM, para poder obtener convergencia, corresponde a la definición del paso de cálculo,  $\Delta t$ . Físicamente, este paso de cálculo debe ser lo suficientemente pequeño para que los desplazamientos y traslapes producidos entre las partículas sean pequeños y así contar con una cuantificación adecuada de las fuerzas de contacto. La selección de un paso de cálculo muy grande puede generar un movimiento no realista de las partículas, donde los traslapes entre partículas sean excesivos o incluso se produzcan superposiciones sin detección [238]. En su trabajo, Burns y Hanley exploraron un método para la definición de este paso de tiempo crítico en simulación DEM 2D, para diferentes formas de partícula. Allí establecen el paso de tiempo crítico como una fracción del tiempo de Hertz,  $\sqrt{m/k}$ . Burns y Hanley sugieren que esta fracción posee un significado físico donde se toma en consideración la forma de la partícula.

Es habitual que códigos de simulación DEM incorporen límites para el máximo paso de tiempo de simulación, basados en una fracción del tiempo de Hertz o el tiempo de Rayleigh [240]. Es posible identificar fuentes donde se recomienda la utilización de fracciones entre el 10 % y el 40 % de este último [241, 242].

### 5.3. Espuma Funcionalmente Dirigida

Como se mencionó en el capítulo 2, los MFD se caracterizan por la variación espacial de sus propiedades físicas y con ello sus propiedades mecánicas, esto con el objetivo de mejorar el desempeño en una aplicación específica. En este trabajo, este concepto es utilizado para definir un material cuya porosidad varía en el espacio, esto es, una *espuma funcionalmente dirigida* en base a una aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con potencial para su uso en reemplazo de tejido óseo. Con esto, el desempeño mecánico de un MDF de un material graduado es modelado considerando que cada capa posee una composición específica y

diferente de las demás y, en consecuencia, cada capa posee propiedades mecánicas únicas.

Para determinar las propiedades mecánicas equivalentes de cada una de las capas que componen una espuma con porosidad funcionalmente dirigida, se utiliza un proceso de homogeneización a partir del análisis de un RVE. Como se mencionó en el capítulo 3, el proceso de homogeneización está basado en los conceptos expuestos por [Sanchez-Palencia y Zaoui](#), y éste se centra en establecer una relación constitutiva equivalente entre un medio heterogéneo (i.e: Un medio poroso con porosidad homogénea) y un medio continuo energéticamente equivalente, bajo la condición de Hill-Mandel. Una vez definida la relación constitutiva equivalente de cada capa, esta información es transferida para el análisis de un modelo funcionalmente dirigido continuo por capa.

## 5.4. Método de Perturbación Lineal

Como ya fue mencionado anteriormente, para determinar los valores de las diferentes constantes elásticas del material equivalente homogeneizado, se impone una secuencia de perturbaciones al estado de equilibrio del RVE. Cada una de estas perturbaciones es impuesta mediante la prescripción de condiciones de borde mixtas uniformes (MUBC), en términos de desplazamientos y fuerzas sobre el contorno del RVE de la forma:

$$\begin{aligned} u_i &= \varepsilon_{ij}^0 x_j & \text{en } S_u; \\ \sigma_i &= \sigma_{ij}^0 n_j & \text{en } S_\sigma, \end{aligned} \quad (5.6)$$

donde  $S_u$  y  $S_\sigma$  son una partición de la superficie de contorno del RVE de la forma  $S = S_u \cup S_\sigma$  y los términos  $\varepsilon_{ij}^0$  y  $\sigma_{ij}^0$  corresponden a los valores de deformación y esfuerzo macroscópicos prescritos en la frontera y  $n_j$  el vector normal exterior de dicha superficie.

Bajo la hipótesis de pequeñas deformaciones, ya se ha establecido que el primer tensor de Piola-Kirchhoff (PK1) y el tensor de esfuerzos de Cauchy son idénticos, de manera que este último puede ser calculado a partir del primero. Con lo anterior, para la posición de equilibrio perturbado se tiene la relación entre el tensor de esfuerzos macroscópico y el PK1 mesoscópico mediante:

$$\bar{\sigma}_{ij} = P_{ij} = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} P_{ij} dV = \frac{1}{V_0} \int_{S_0} P_{ik} X_j N_k dV = \sigma_{ij}^0, \quad (5.7)$$

donde el vector  $N_k$  es el vector normal exterior sobre la superficie del dominio definido por el RVE,  $S_0$ , en la configuración de referencia. De esta manera, las componentes del tensor de esfuerzo macroscópico

homogeneizado,  $\bar{\sigma}_{ij}$ , se obtienen a partir de los valores promedio definidos por la información de la frontera del RVE [191, 244]. De forma análoga, mediante la definición del tensor de deformación infinitesimal de Green, se obtienen las componentes del tensor de deformación promedio,  $\bar{\varepsilon}_{ij}$  de la forma:

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon}_{ij} &= \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij} dV = \frac{1}{2V} \int_V \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{u_j}{x_i} \right) dV \\ &= \frac{1}{2V} \int_S (\varepsilon_{ij}^0 x_k n_j + \varepsilon_{ij}^0 x_k n_i) dS \\ &= \varepsilon_{ij}^0.\end{aligned}\quad (5.8)$$

Con lo anterior, se tiene una perturbación al estado de equilibrio basada en la imposición de un desplazamiento,  $u_i$ , consistente con una deformación unitaria global,  $\varepsilon_{ij}^0$ , en las superficies cuyos vectores normales corresponden con una de las direcciones principales, (e.g:  $n_i$ ) y una fuerza,  $\sigma_{ij}^0$ , en las superficies complementarias, tal como se muestra en la figura 5.8.

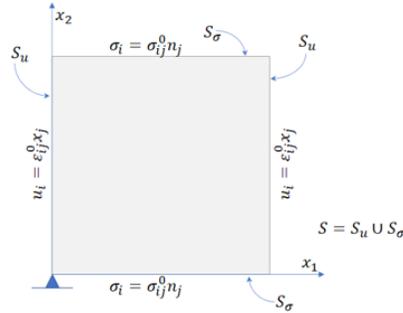


Figura 5.8: Esquema de aplicación de condición de contorno para una perturbación lineal axial (dirección  $x_1$ ) sobre un dominio bidimensional con  $\varepsilon_{11}^0 \neq 0$  y  $\sigma_{ij}^0 = 0$

Teniendo en consideración que, como mínimo, el medio exhiba una la condición de ortotropía, la aplicación de un conjunto de perturbaciones independientes aplicadas en cada una de las direcciones principales del sistema permite activar las diferentes constantes elásticas de los tensores constitutivo y de rigidez homogeneizados, componente a componente, de manera que con su determinación exista una solución única. Adicionalmente, el nivel de anisotropía existente en un material es posible de cuantificar mediante el índice de anisotropía de Zener [245], de la forma:

$$A = \frac{2 C_{ijij}}{C_{iiii} - C_{ijjj}}.\quad (5.9)$$

Por otro lado, para el caso en que el material no exhibe una orientación preferente (i.e: isotropía), los tensores constitutivo y de rigidez homogeneizados toman sus formas más simples y el índice de anisotropía de Zener toma el valor unitario ( $A = 1$ ). Luego, como se desarrolló en el capítulo 2, las componentes de los tensores quedan definidas por sólo 2 constantes elásticas (ver ecuaciones 3.57 y 3.58).

Como método alternativo para evaluar el nivel con que la respuesta mecánica de espumas con distribución no-estructurada de poros se acerca al caso isotrópico, se utiliza la razón de anisotropía de Huber [246], donde se realiza un contraste entre las componentes diagonales del tensor constitutivo o de rigidez, de la forma:

$$AR_{ij} = \frac{C_{iiii}}{C_{jjjj}} = \frac{S_{jjjj}}{S_{iiii}}. \quad (5.10)$$

Luego, un material isotrópico muestra una razón de anisotropía de Huber igual a la unidad (i.e:  $AR = 1$ ).

## 5.5. Dimensiones Adecuadas para un RVE

El concepto de RVE se asocia a la idea básica de la *celda unitaria*, a partir de la cual se cumplan los requerimientos de representatividad. Este concepto, que para estructuras perfectamente periódicas es evidente e intuitivo, su aplicación en medios aleatoriamente heterogéneos, porosos o con microestructuras no regulares requiere un análisis más profundo. En este contexto, para el estudio de un medio que no posee una estructura regular repetible se considera una porción finita en una escala superior a la definida por la microestructura explícita (i.e: mesoescala) que contenga una cantidad de heterogeneidades suficiente para que describa de manera *estadísticamente* adecuada la microestructura general, este subdominio de estudio toma el nombre de *elemento de volumen estadísticamente representativo*, o SVE (Statistically representative Volume Element). Luego, las propiedades mecánicas calculadas sobre este SVE llevan el adjetivo *aparentes* ya que, en general, representan una medición de una variable aleatoria, a diferencia de aquellas medidas sobre un RVE, las que llevan el adjetivo *equivalentes*, ya que estas últimas son iguales, independiente del dominio sobre las que sean medidas, [181]. El concepto de SVE está basado en la idea de representatividad estadística propuesta por Hashin de homogeneidad estadística para un material compuesto [184, 247].

Si bien un gran número de autores han desarrollado estudios para definir un tamaño de RVE para establecer las propiedades equivalentes de diferentes tipos de materiales, en ellos no se sustenta la idea de una dimensión única aplicable a todos los casos y corresponden a resultados acotados a las

condiciones y tipos de materiales específicos para los que se han desarrollado [248, 249]. A consecuencia de lo anterior, en este trabajo se incorpora un estudio estadístico para establecer el tamaño adecuado de RVE y definir las propiedades elásticas estadísticamente representativas de las espumas metálicas obtenidas mediante simulación DEM. Aquí, los factores considerados son el nivel de porosidad y el tamaño del dominio (i.e: tamaño de RVE). En la siguiente tabla se resumen los factores, niveles y variables dependientes para un experimento de 2 factores en 5 niveles.

Tabla 5.2: Variables de entrada y salida para diseño de experimento en espumas de porosidad homogénea

Variable de Entrada	Rango de Parámetro	Variables de Salida
Tamaño de RVE ( $\delta = a/d_{max}$ )	3, 4, 5, 6, 7	Esfuerzos principales: $\sigma_i$ Deformaciones principales: $\varepsilon_i$
Nivel de porosidad (porcentaje)	30 %, 40 %, 50 %, 60 %, 70 %	Razón de Anisotropía: AR Propiedades aparentes: $E^{apa}, \nu^{apa}, G^{apa}$

Para validar los resultados obtenidos, este estudio es realizado para CP-Ti grado 4, donde las propiedades mecánicas elásticas son 110 *GPa* para el módulo de Young y 0.37 *mm/mm* para la razón de Poisson [250]. Esto permite realizar una comparación con información obtenida de literatura para espumas metálicas con características similares. En particular, los resultados son contrastados con los reportados por [251].

## 5.6. Respuesta Mecánica de Espumas Funcionalmente Dirigidas

Como se menciona anteriormente, las espumas metálicas con porosidad dirigida, correspondientes a un MFD graduado, son modeladas a partir de capas distinguibles donde cada capa posee una relación constitutiva específica. Una vez que las propiedades mecánicas aparentes de las espumas metálicas con porosidad homogénea (i.e. Cada capa) son determinadas, estas son transferidas como información de entrada para un nuevo modelo completo, donde el comportamiento de cada capa está definida por un modelo constitutivo elástico-lineal continuo.

Para determinar las respuesta mecánica de las espumas funcionalmente dirigidas, se realizará un estudio basado en la simulación de ensayos de compresión en especímenes cilíndricos con diferentes combinaciones de variaciones de porosidad. La simulación de estos ensayos de compresión son realizados bajo las recomendaciones establecidas en las normas ASTM-E9 [252] e ISO-13314:2011 [253] donde se establecen las dimensiones, relaciones de aspecto y condiciones para la realización de ensayos de compresión para metales y materiales porosos a temperatura ambiente, respectivamente. El seguimiento

de estas recomendaciones permite realizar una comparación directa de los resultados numéricos obtenidos en este trabajo con datos experimentales, en un trabajo futuro.

Haciendo uso del *software* ANSYS Workbench v18, se realizó el estudio numérico de la influencia de parámetros como la dirección de variación de porosidad (i.e. radial y axial), orientación (i.e. ascendente y descendente) y el nivel de porosidad (i.e. porcentaje medio de porosidad) en las propiedades mecánicas aparentes (e.g. módulo de Young) de espumas metálicas gradientes, con el objetivo de establecer sus efectos y proponer las combinaciones con que se obtienen propiedades equivalente similares a las del tejido óseo. En este, se considera la articulación de las diferentes etapas antes descritas, desde la utilización de la simulación DEM para la generación de geometrías CAD que describen la estructura homogénea de las diferentes capas y su análisis FEM para determinar las constantes elásticas aparentes a través de un MSHS junto a su integración bajo el concepto de MFD.

Con el objetivo de sistematizar y realizar un análisis estadístico de la información, el estudio descrito anteriormente será desarrollado a través de la realización de dos experimentos computacionales factoriales de dos factores en dos niveles (i.e.  $2^2$ ) univariados, en el que la variable de salida es el módulo de Young calculado. Los factores y rangos para los niveles bajo y alto y las variables de salida (medidas y calculada) se resumen en la Tabla 5.3.

Tabla 5.3: Variables de entrada y salida para diseño de experimento en espumas de porosidad dirigida en dirección radial y axial

Variable de Entrada	Rango de Parámetro	Variables de Salida
Orientación del gradiente	Ascendente, descendente	Esfuerzos principales: $\sigma_1$ Deformaciones principales: $\varepsilon_1$
Nivel de porosidad	40 % $\pm$ 10 %, 60 % $\pm$ 10 %	Módulo de Young aparente: $E^{apa}$

Para la determinación de las propiedades mecánicas aparentes de las espumas con porosidad homogénea, se hace uso de las propiedades mecánicas de una aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa, bajo un modelo elástico lineal. El módulo elástico y límite elástico para esta aleación 57Ti-30Nb-13Ta que fueron compartidos por el Dr. Chicardi y reportados en Chicardi et al. [126], mientras que el módulo de Poisson considerado es el valor estándar de 0.3  $mm/mm$ , debido a que su valor específico no ha sido reportado para la aleación. Con lo anterior, los valores de propiedades elásticas para la aleación son resumidos en la tabla A.1:

## Capítulo 6

# Resultados

En este capítulo, se revisan los principales resultados obtenidos durante el desarrollo de este trabajo de tesis. Dentro de estos se incluyen los resultados preliminares obtenidos para la realización de ajuste de parámetros para la generación de los modelos CAD utilizados para la simulación de espumas metálicas monolíticas mediante la utilización de la simulación directa de Monte Carlo, aquellos resultados obtenidos para la validación de la metodología propuesta, mediante el contraste de resultados numéricos con datos obtenidos de literatura para CP-Ti grado 4, como también los resultados finales para la respuesta de espumas metálicas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad funcionalmente dirigida.

En el capítulo 2 se mencionó que los estudios de biocompatibilidad realizados por diversos autores han permitido establecer que para que exista un buen nivel de proliferación celular como para permitir la integración de los implantes en el tejido óseo se requiere un rango de tamaños de poros cercanos del orden de los 500  $\mu m$ . Teniendo esta información en consideración, para este trabajo se ha seleccionado un rango de tamaños de poro entre 350 y 450  $\mu m$ . Adicionalmente, se ha utilizado el mayor rango de porcentaje de porosidad posible de producir utilizando la técnica de pulvimetalurgia de espaciadores que permita obtener porosidades abiertas al utilizar cloruro de sodio como agente espaciador. Con esto, se ha considerado un rango de porcentaje de porosidad entre 30 y 70 por ciento.

Parte de estos resultados ya han sido presentados a la comunidad científica a través de la participación en congresos de carácter nacional e internacional, como también a través de la publicación de artículos en revistas de corriente principal.

## 6.1. Caracterización de la estructura de espumas metálicas generadas por simulación DEM

Como se menciona en el capítulo 5, el análisis de la estructura de espumas metálicas es un proceso de tipo destructivo, en el que se realizan cortes transversales al espécimen para luego ser analizados. Para proveer información que posteriormente sea comparable con especímenes fabricados en laboratorio, se ha realizado un análisis análogo sobre las geometrías generadas mediante simulación DEM. Para este análisis se ha considerado una colección de geometrías con diferentes niveles de porcentaje de porosidad y tamaño, en la tabla 6.1 se resumen las configuraciones seleccionadas.

Tabla 6.1: Factores y niveles para análisis de estructura en espumas generadas por simulación DEM

Factores	Niveles
Porcentaje de Porosidad	30 %, 40 %, 50 %, 60 %, 70 %
Tamaño de RVE ( $a/d_{max}$ )	4, 5, 6, 7, 8

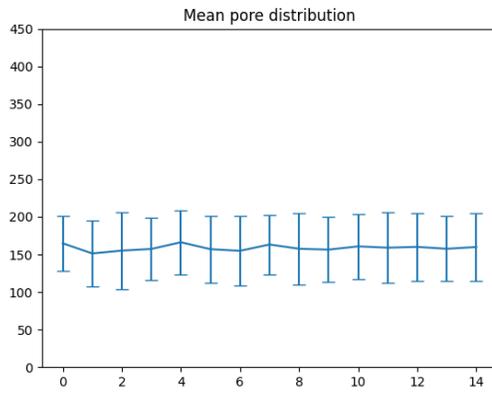
Para este análisis, se investigó el comportamiento de 3 geometrías diferentes por cada combinación de factores, entregando un total de 75 geometrías. Para cada una de las geometrías analizadas se realizó un total de 10 cortes transversales equidistantes, entregando así una referencia de la estructura completa. Por simplicidad en la representación, las diferentes geometrías han sido numeradas en función del número de réplica y nivel de porosidad, independiente del tamaño de RVE. En la tabla 6.2 se resume esta información:

Tabla 6.2: Numeración de geometrías por nivel de porosidad

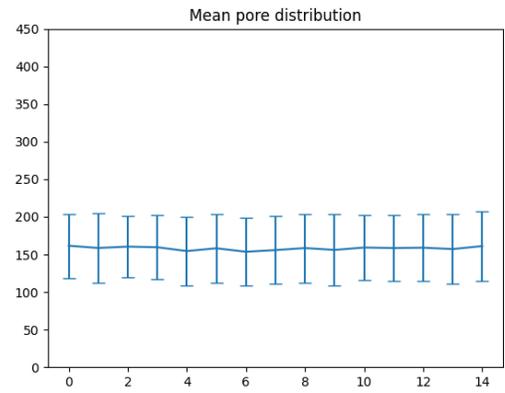
Porosidad	# Geometría
30 %	0, 1, 2
40 %	3, 4, 5
50 %	6, 7, 8
60 %	9, 10, 11
70 %	12, 13, 14

En la figura 6.1 se muestra el resumen de los resultados obtenidos para la distribución de tamaño de poro (radios) para en las diferentes geometrías analizadas. En esta figura se muestra el valor de radio promedio para el total de los cortes analizados, donde las líneas de error tienen un tamaño igual a una vez la desviación estándar global de cada geometría.

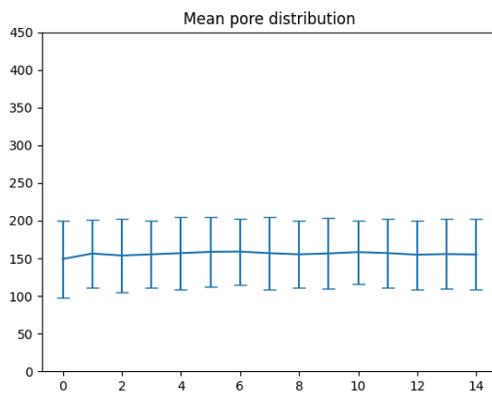
Para un rango de tamaño de poro con diámetros entre  $350 \mu m$  y  $450 \mu m$ , los radios se encuentra entre los  $175 \mu m$  y  $225 \mu m$ . En la figura 6.1 se observa que, los valores promedio de radio equivalente para los diferentes cortes realizados se encuentran entorno a los  $150 \mu m$  con una desviación estándar de  $45 \mu m$ , independiente del porcentaje de porosidad y tamaño de la geometría.



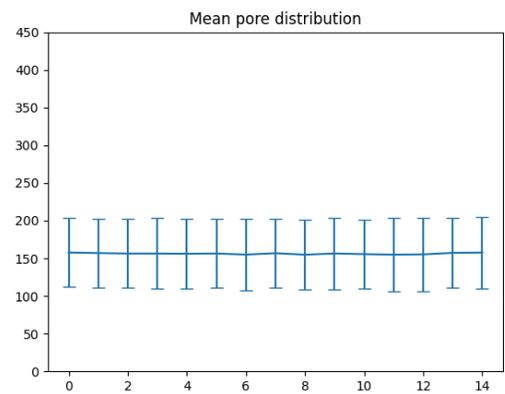
(a)



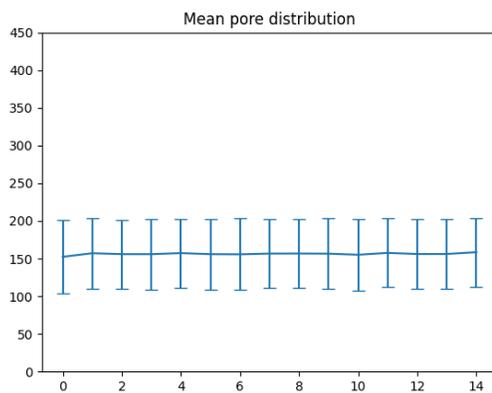
(b)



(c)



(d)



(e)

Figura 6.1: Distribución de tamaño de poro para geometrías con diferentes tamaños de RVE  $\delta = a/d_{max}$ , (a)  $\delta = 4$ , (b)  $\delta = 5$ , (c)  $\delta = 6$ , (d)  $\delta = 7$ , (e)  $\delta = 8$

Por otra parte, en la figura 6.2 se muestran los resultados obtenidos para la distancia de interconexión entre poros, para cada una de las geometrías analizadas. De igual forma, los resultados mostrados corresponden a la media obtenida para los 10 cortes transversales realizados con barras de error de una vez la desviación estándar global. Aquí, el valor medio para el tamaño de interconexión obtenido se encuentra en torno a los  $75 \mu m$  con una desviación estándar de  $60 \mu m$  para todos los porcentajes de porosidad y tamaños de geometría, de forma similar al caso de la distribución de tamaño de poros.

Tanto para la distribución de tamaños de poro bidimensional, como para la distancia de interconexión bidimensional no se observan efectos importantes ni del porcentaje de porosidad, ni para el tamaño de la geometría. En el Anexo B.1 se adjuntan las figuras con el detalle de la distribución de tamaño de poro bidimensionales para cada uno de los cortes transversales realizados en cada una de las figuras de análisis mientras que en el Anexo B.2 se adjuntan las figura con el detalle para la distribución de tamaño de interconexión para cada corte transversal de las geometrías analizadas, ambos a través de diagramas de caja y bigotes.

### 6.1.1. Cálculo de porosidad en espumas CAD generadas por simulación DEM

Las geometrías CAD de espuma metálicas de porosidad abierta con distribución no regular de poros generadas mediante simulación DEM pueden ser conceptualizadas como un grupo no convexo compuesto por la intersección del exterior de la unión de esferas con el interior de un sólido regular. El cálculo del volumen, y porosidad, de estos sólidos de geometría compleja representa un problema ya que se desconocen formas cerradas para ello. A consecuencia de lo anterior, se ha implementado un programa en lenguaje Python basado en en la simulación directa de Monte Carlo descritos en el capítulo 4, y posteriormente detallado en el capítulo 5. En la implementación propuesta, se ha utilizado una aproximación de oráculo junto a una estrategia de muestro aleatorio de hipercubo latino. La estrategia de muestreo de hipercubo latino corresponde a un algoritmo simple para realizar un muestreo aleatorio representativo y eficiente en cualquier dominio.

En un estudio comparativo, se analizaron los tiempos de ejecución y exactitud en los cálculos para un total de 40 geometrías CAD, separadas en dos grupos. Un grupo basado en base a un cilindro y un grupo de geometrías basado en un cubo, con un contenido de 100, 500, 1000, 2000 y 4000 poros interconectados con una distribución no estructurada y con diámetros uniformemente distribuidos han sido analizados para el cálculo de porosidad utilizando el algoritmo implementado. Los resultados obtenidos han sido contrastados con los resultados obtenidos a partir del análisis de las mismas geometrías mediante el *software* McVol [236]. Este *software* ha sido desarrollado por Till y Ullmann para el cálculo del

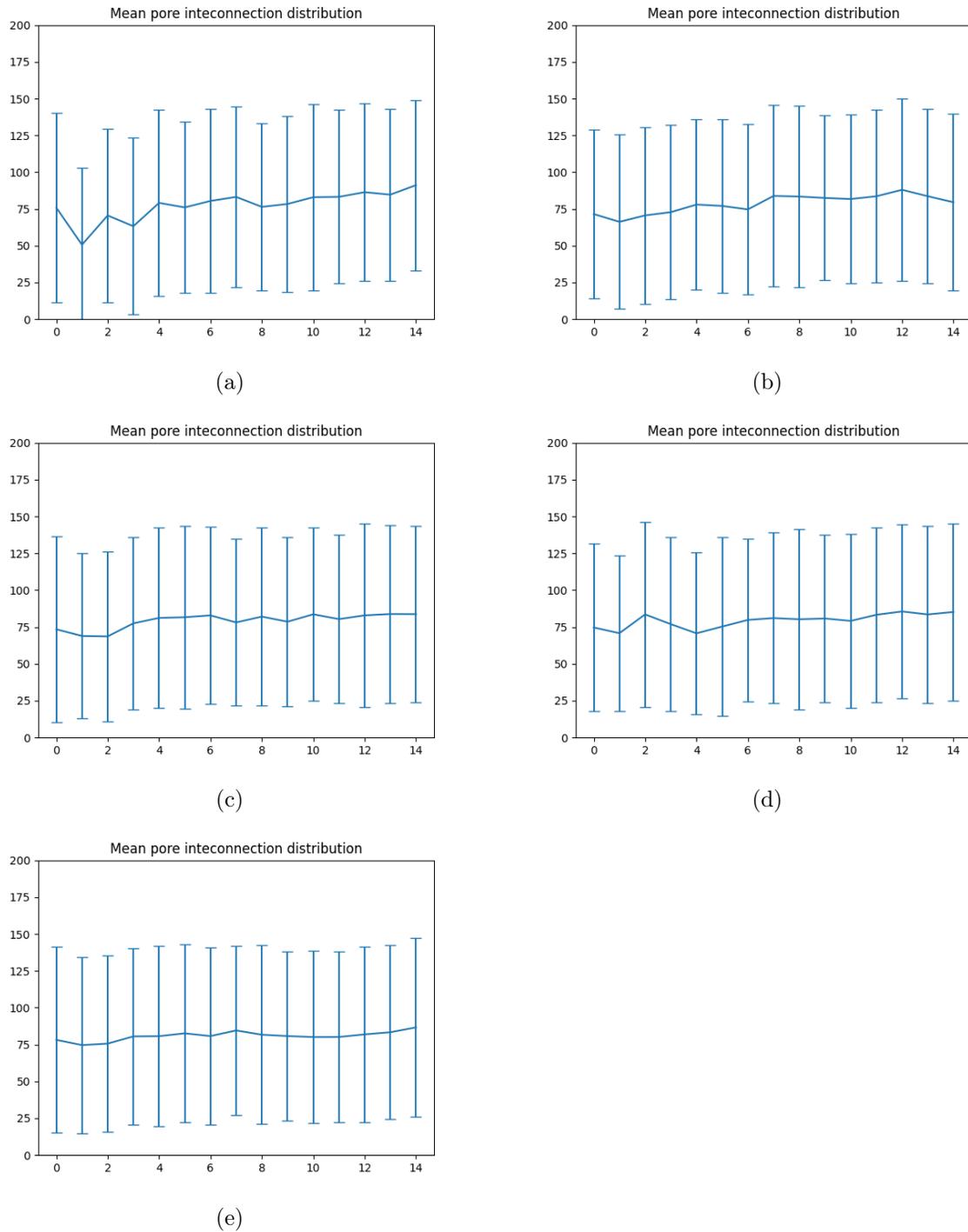


Figura 6.2: Distribución de tamaño de poro para geometrías con diferentes tamaños de RVE  $\delta = a/d_{max}$ , (a)  $\delta = 4$ , (b)  $\delta = 5$ , (c)  $\delta = 6$ , (d)  $\delta = 7$ , (e)  $\delta = 8$

volumen de la unión de esferas, para su aplicación en el cálculo de volumen de proteínas en bioquímica. Sin embargo, resuelve un problema equivalente al planteado por el volumen y porosidad de espumas metálicas.

Con el objetivo de evaluar la porosidad de las espumas CAD generadas por simulación DEM mediante el *software* McVol, todos los archivos *javascript* (\*.js) han sido convertidos al formato de entrada para McVol, \*.pqr, y escalados par que el tamaño máximo de poro no supere los 5 Å, de acuerdo a los requerimientos expresados por [Till y Ullmann](#) en ref [236]. Todos los demás parámetros de configuración para McVol utilizados son idénticos a los utilizados en el caso de ejemplo provisto en la documentación del *software*.

De manera preliminar, para establecer el carácter convergente de los cálculos realizados, se registraron tanto el porcentaje de porosidad como el correspondiente error estándar en cada iteración del experimento de Monte Carlo. En la figura 6.3, se muestran la progresión en el análisis de una geometría en base a un cubo con la presencia de 4000 poros interconectados en su interior. La geometría ha sido identificada en el conjunto como CUBE\_4000\_1.

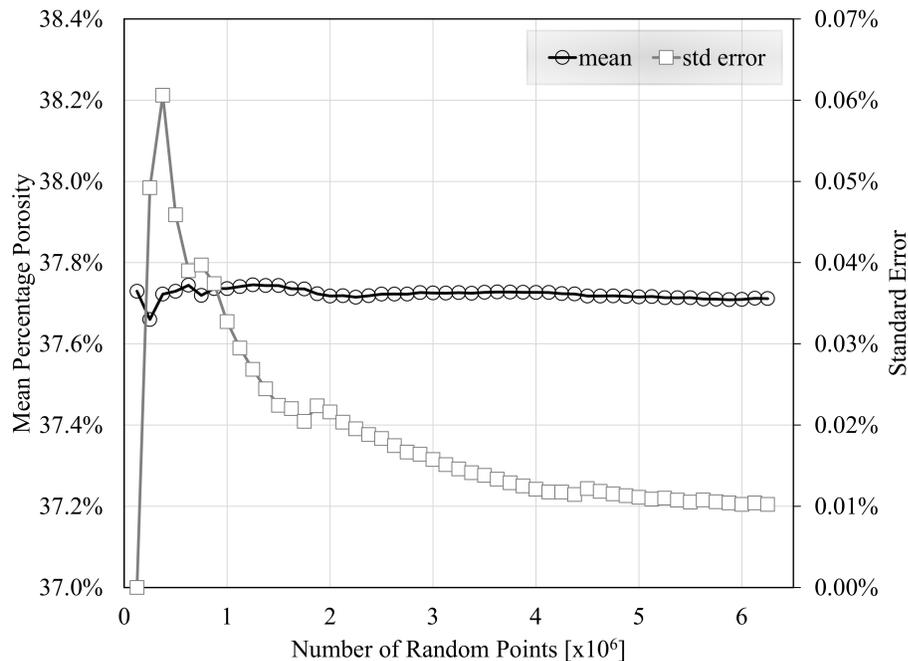


Figura 6.3: Porcentaje de porosidad y error estándar calculados versus cantidad de puntos aleatorios generados para el análisis de una geometría cúbica de lado 6.75 mm con 4000 poros (CUBE\_4000\_1) utilizando 125000 puntos por iteración

En la figura 6.3 se puede observar que a medida que se incrementa el número de puntos aleatorios generados, el valor calculado para el porcentaje promedio de porosidad presenta un comportamiento de

estabilización, mientras que el error estándar decrece de manera asintótica. Ambos comportamientos son consistentes con la formulación presentada en la ecuación 4.71 y 4.72 del capítulo 4.

### Tiempo de cálculo

El primero de los parámetros analizados en la ejecución del algoritmo propuesto para el cálculo de porosidad es el tiempo de ejecución del programa. Aquí, el tiempo de ejecución (o *runtime*) ha sido registrado para la ejecución del análisis de cada una de las geometrías utilizando la función estándar C *time()*.

El procedimiento estándar para poder calcular el porcentaje de porosidad en este tipo de geometrías CAD implica realizar la importación de la geometría en el preprocesador FEM correspondiente (i.e: DesignModeler de ANSYS). Debido a que este proceso computacional es altamente intensivo en tiempo, particularmente para geometrías que contengan una gran cantidad de poros, se ha propuesto este algoritmo basado en Simulación de Monte Carlo (SMC) como una alternativa de bajo costo computacional y de tiempo.

En la tabla 6.3 se muestran los resultados obtenidos del análisis de tiempo de ejecución para el cálculo de porosidad en utilizando el algoritmo desarrollado basado en SMC y utilizando el *software* McVol, para 4 geometrías aleatoriamente seleccionadas, luego de 20 ejecuciones independientes. Los resultados se muestran como tiempo de ejecución promedio y desviación estándar para la distribución de ejecuciones en cada grupo de combinación entre geometría base (i.e: cubo o cilindro) y número de poros contenidos (i.e: 100, 500, 1000, 2000 y 4000).

Tabla 6.3: Tiempo de ejecución promedio para el análisis de 4 geometrías diferentes luego de 20 ejecuciones independientes utilizando el método propuesto (SMC) y McVol para geometrías basadas en un cubo de 6.75 mm de arista y cilindros de 6.75 mm de diámetro y 6.75 mm de altura con poros entre 350 – 450  $\mu\text{m}$  de diámetro

Grupo	DMCS		McVol	
	Prom [s]	Des. Est. [s]	Prom [s]	Des. Est. [s]
CUBE_100	9.1	0.1	12.3	0.1
CUBE_500	10.7	0.1	42.7	0.1
CUBE_1000	17.3	0.1	76.1	0.1
CUBE_2000	31.3	0.1	121.9	0.1
CUBE_4000	54.5	0.6	119.2	12.7
CYL_100	12.8	3.7	10.7	5.2
CYL_500	21.2	2.3	41.1	5.2
CYL_1000	37.8	2.7	65.4	5.1
CYL_2000	69.0	4.4	78.4	10.2
CYL_4000	102.3	8.9	70.5	10.3

Adicionalmente, los resultados mostrados en la tabla 6.3 se muestran de manera gráfica en la figura 6.4. En la figura 6.4a se muestran los resultados para tiempo de ejecución promedio en el cálculo de porosidad de geometrías basadas en un cubo, mientras que en la figura 6.4b se muestran los mismos resultados para geometrías en base a cilindro. En ambas figuras se puede observar que el algoritmo desarrollado posee un comportamiento que escala de manera lineal con la cantidad de poros contenido ( $R^2 = 0.995$  para cubos y  $R^2 = 0.978$  para cilindros), con un tiempo de ejecución promedio consistentemente inferior al obtenido utilizando el *software* McVol para todos menos un grupo de los analizados (i.e: cilindros con 4000 poros).

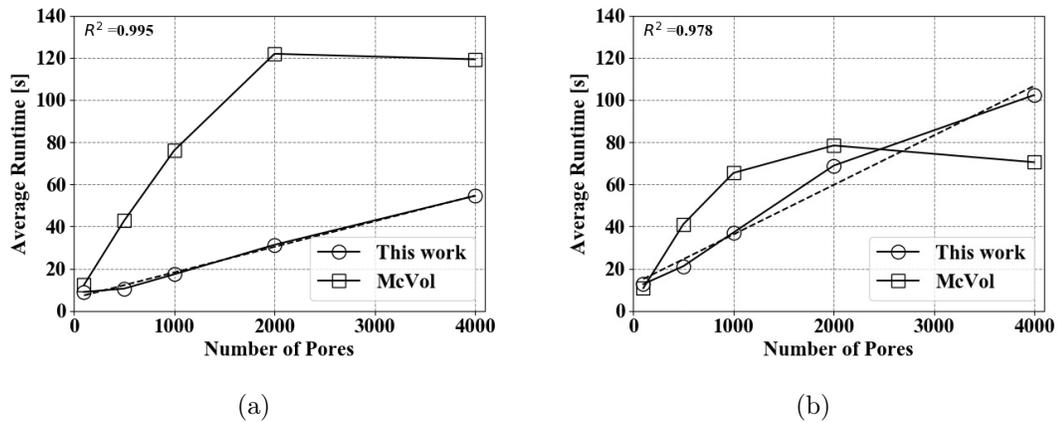


Figura 6.4: Tiempo de ejecución promedio para el cálculo de porosidad utilizando el algoritmo propuesto y McVol [236] con 20 ejecuciones independientes para (a) geometrías en base a cubo y (b) geometrías en base a cilindro

Al comparar el tiempo de ejecución para el análisis de los diferentes tipos de geometría (ver figura 6.4), se observa que el programa propuesto requiere un tiempo promedio inferior para el análisis de geometrías cúbicas que para geometrías cilíndricas, para una misma cantidad de poros.

En forma paralela, se ha registrado el número de iteraciones promedio necesarias para alcanzar el criterio de convergencia en cada una de las geometrías analizadas. Estos resultados son mostrados en la figura 6.5.

En los resultados exhibidos en la figura 6.5 se observa que, las geometrías cilíndricas requieren, en promedio, una mayor cantidad de iteraciones para alcanzar el mismo criterio de convergencia establecido. Al realizar un perfilamiento del programa propuesto, a través de la herramienta *cProfile*, se ha podido establecer consistentemente un tiempo promedio de  $2.4 \mu s$  por punto aleatorio generado en el caso de geometrías cúbicas, mientras que en el caso de geometrías cilíndricas este tiempo es de  $7.84 \mu s$  por punto aleatorio. Estos tiempos promedio han sido calculado a partir del tiempo acumulativo para la generación de los 125 mil puntos aleatorios por iteración, definidos por configuración de la grilla de muestreo por hipercubo latino.

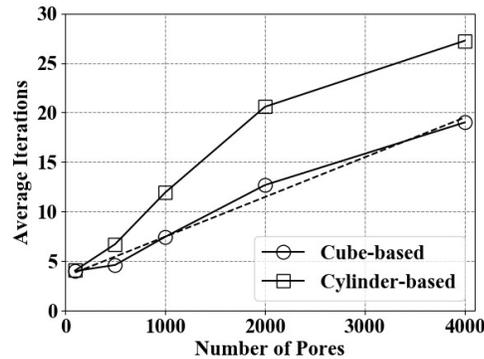


Figura 6.5: Número de iteraciones promedio necesarias para alcanzar el criterio de convergencia de 0.5% de incertidumbre en el error estándar en función del número de poros incluidos en geometrías en base a un cubo de 6.75 mm de arista y geometrías en base a un cilindro de 6.75 mm de diámetro y 6.75 mm de altura.

### Error de exactitud en cálculo

Debido a que el objetivo principal del método propuesto es el de estimar el porcentaje de porosidad de geometrías de espumas con porosidad abierta, conceptualizado como un conjunto no convexo compuesto por la intersección entre el exterior de una unión entre esferas y el interior de una forma primitiva, se ha realizado una comparación entre los errores absolutos obtenidos en el cálculo de la porosidad mediante el programa propuesto y mediante McVol, respecto de los resultados obtenidos a través de la carga de la geometría en el módulo DesignModeler de ANSYS v18, a partir de donde se rescata el volumen de la porción sólida de la geometría.

En la figura 6.6 se muestran los diagramas de caja y bigote para los errores absolutos obtenidos en el cálculo de porosidad para geometrías cúbicas, mientras que en la figura 6.7 se muestran los resultados obtenidos para geometrías cilíndricas.

Para el caso de geometrías cúbicas, en la figura 6.6 se observa que los errores absolutos obtenidos cuando éstas son analizadas mediante el algoritmo propuesto se encuentran acotados al 0.35%, valor inferior al límite de 0.5% de incertidumbre especificado *a priori*. Sin embargo, al utilizar McVol los errores absolutos obtenidos en el cálculo de porosidad pueden alcanzar hasta un 1%.

En relación a las geometrías cilíndricas analizadas, en la figura 6.7 se observa que las distribuciones de error obtenidas son menos predecibles que las obtenidas para las geometrías cúbicas, al ser analizadas mediante el algoritmo propuesto. Aquí, para casi todos los casos analizados (ver figura 6.7a-c y e) el algoritmo propuesto exhibe una excelente capacidad predictiva, mostrando errores absolutos inferiores a 0.2%, nuevamente por debajo del 0.5% de incertidumbre especificado *a priori*, mientras que en el caso específico de geometrías que contienen 2000 poros (ver figura 6.7d), los errores en los resultados

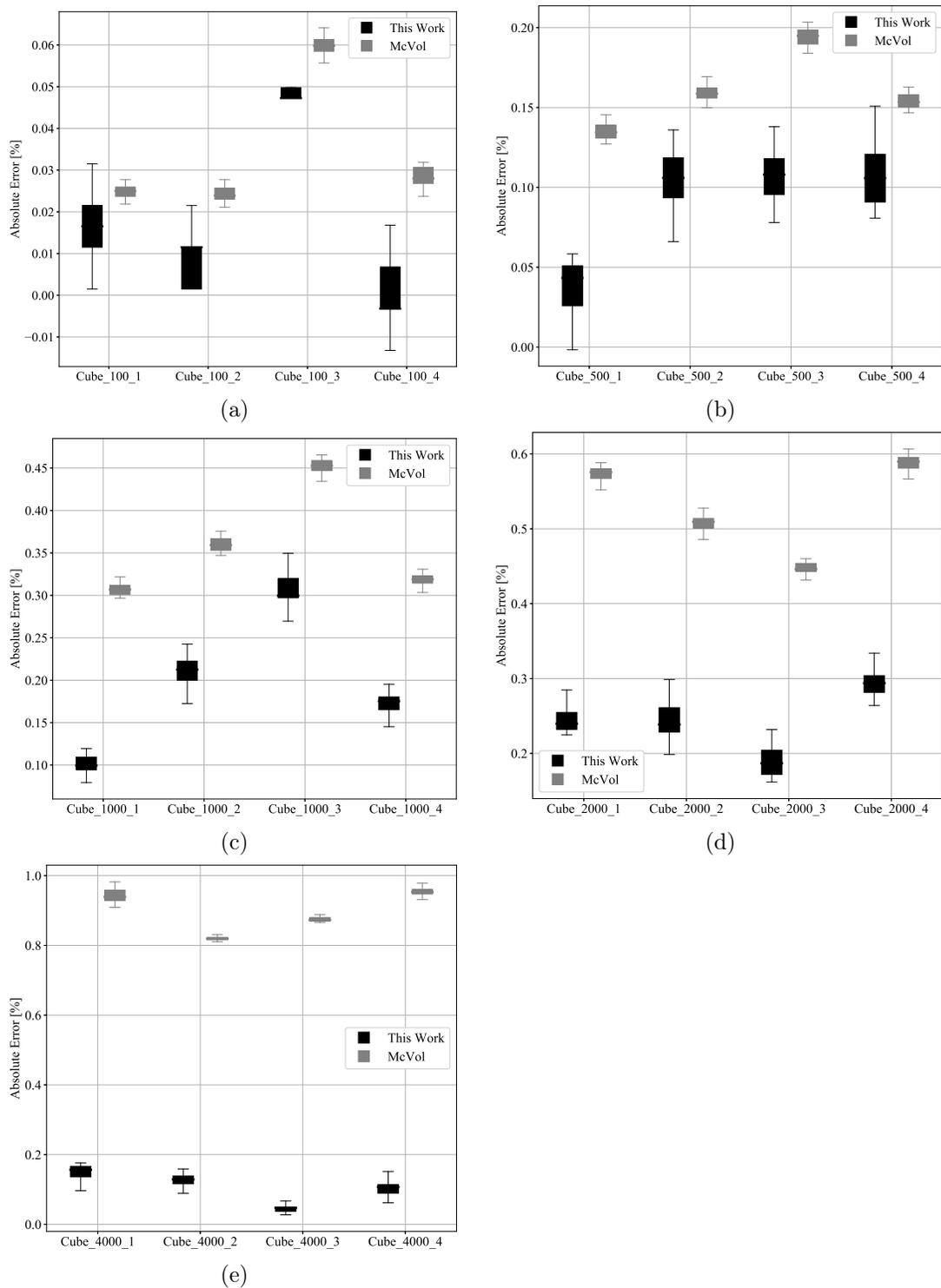


Figura 6.6: Error absoluto en cálculo de porosidad para espumas cúbicas de lado  $6.5 \text{ mm}$  mediante DMCS (identificada como *This work*) y McVol para (a) 100, (b) 500, (c) 1000, (d) 2000 y (e) 4000 poros con distribución no estructurada y tamaños uniformemente distribuidos

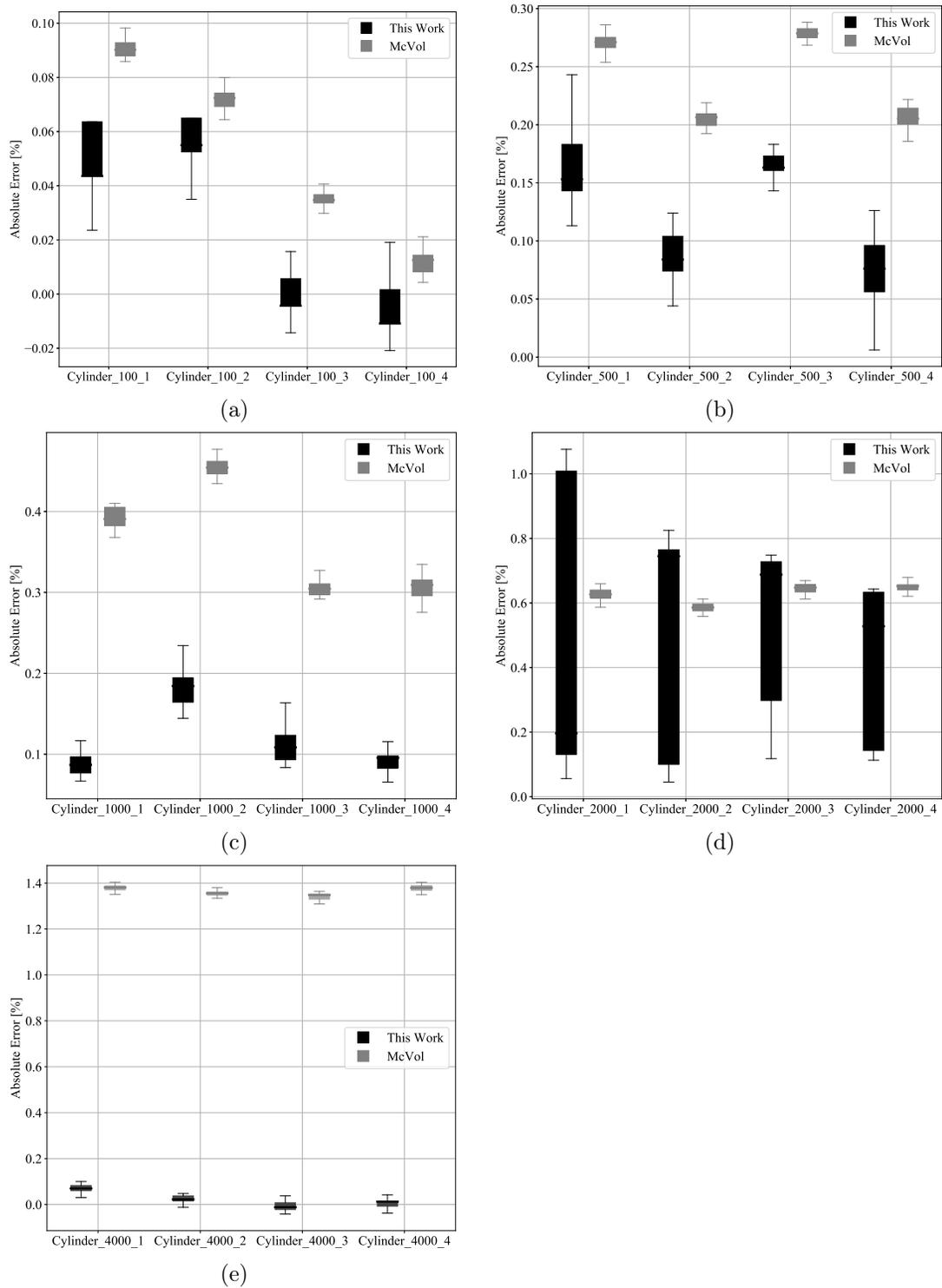


Figura 6.7: Error absoluto en cálculo de porosidad para espumas cilíndricas de diámetro  $6.5\text{ mm}$  y altura  $6.5\text{ mm}$  mediante SMC (identificada como *This work*) y McVol para (a) 100, (b) 500, (c) 1000, (d) 2000 y (e) 4000 poros con distribución no estructurada y tamaños uniformemente distribuidos

alcanzan una desviación hasta un máximo de 1 %.

Independiente del tipo de geometría analizada (i.e: cúbica o cilíndrica), el algoritmo propuesto ha permitido obtener resultados más preciso que los obtenidos a través del uso de McVol, a excepción de las geometrías cilíndricas con 2000 poros. Mientras que, en general, los errores en los valores calculados mediante el método propuesto exhiben un comportamiento aleatorio, manteniéndose acostados por debajo de 0.35 %, al utilizar McVol se observa una relación directa entre el número de poros y la magnitud del error obtenido en el cálculo de porosidad. Esto es, mientras que para geometrías con 100 poros los errores obtenidos mediante McVol son del orden de 0.6 % y 0.1 %, cuando estas contienen 4000 poros los errores alcanzan valores de 1.0 % y 1.4 %, para las geometrías cúbicas y cilíndricas, respectivamente.

## 6.2. Simulación del comportamiento mecánico de espumas metálicas con porosidad homogénea

En esta sección, se muestran los principales resultados obtenidos para la validación del uso del esquema de homogeneización bajo la condición de borde aproximadamente periódica modificada en la metodología DEM-FEM propuesta, mediante el análisis de la respuesta mecánica de espumas metálicas de CP-Ti con porosidad homogénea. En este estudio, el *software* LIGGGHTS [210] para simulación DEM se utilizó con el objetivo de generar 25 grupos de 200 geometrías de espumas metálicas cúbicas con distribución no estructurada de poros (5 diferentes niveles de porosidad y 5 tamaños con 200 geometrías para combinación de nivel de porosidad y tamaño) cada uno, con microestructuras similares a las obtenidas mediante pulvimetalurgia de espaciadores. En todos los grupos, el rango de tamaño de poros considerado corresponde a una distribución uniforme entre 350  $\mu m$  y 450  $\mu m$ , límites seleccionados para conservar el tamaño promedio de la distribución de partículas utilizadas por Torres et al. [254]. Adicionalmente, este rango ha sido identificado por diferentes autores como suficiente para ajustarse a aplicaciones biomédicas, permitiendo la proliferación celular y osteointegración [96–98]. La respuesta mecánica numérica ha sido obtenida mediante el uso de un modelo FEM desarrollado en ANSYS v19.1.

Tres geometrías CAD fueron seleccionadas en cada uno de los 15 grupos, para conformar un *dataset* con un total de 45 geometrías, de manera completamente aleatoria, independiente de su porosidad.

### 6.2.1. Porcentaje de porosidad

Debido a que las espumas metálicas fabricadas por pulvimetalurgia de espaciadores poseen una morfología compleja, donde el agente espaciador removido genera una red de poros con distribución y tamaños aleatorios al interior de la espuma, se ha establecido el nivel de exactitud entre el porcentaje de porosidad deseado y el obtenido para las geometrías CAD de espumas metálicas generadas mediante simulación DEM.

Para estos efectos, se ha estudiado la correlación existente entre la porosidad esperada de geometrías sintéticas con una distribución no estructurada de poros con distribución aleatoria de tamaños generadas a partir de simulación DEM con los valores de porosidad obtenidos de manera efectiva. Para este análisis, se ha utilizado el algoritmo basado en SMC presentado en la sección anterior.

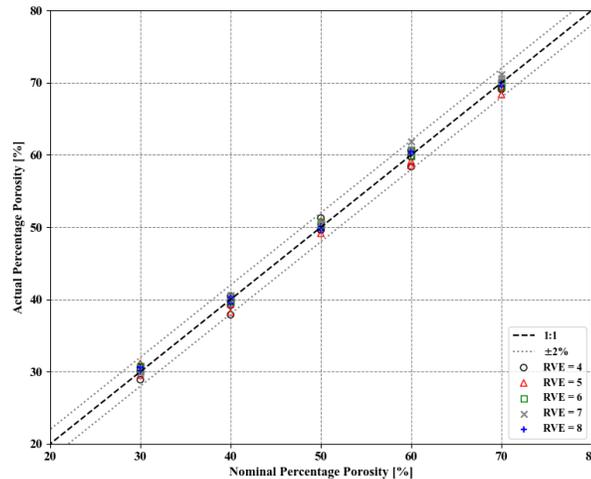


Figura 6.8: Porcentaje de porosidad nominal versus obtenido para geometrías analizadas con tamaños de RVE entre 4 y 8 y porcentajes de porosidad entre 30 % y 70 %

En la figura 6.8 se muestran los resultados para la comparación entre el porcentaje de porosidad nominal (o esperado) y el porcentaje de porosidad obtenido (o medido) para las 45 geometrías sintéticas analizadas. En esta figura se observa que los resultados para la desviación entre ambos valores es inferior al 2%, independiente del tamaño de RVE considerado. La pequeña desviación entre los valores esperados (o nominales) y los valores obtenidos (o medidos) en el *dataset* verifican la capacidad de precisión que tiene la metodología DEM-FEM propuesta en la construcción de geometrías sintéticas de espumas metálicas, en términos de esta característica morfológica.

### 6.2.2. Nivel de anisotropía

Como método para establecer la validez de la suposición de comportamiento isotrópico en las geometrías de espumas generadas por simulación DEM, se ha evaluado la razón de anisotropía de Huber, en en todas las geometrías que componen el *dataset*. Para cada geometría en análisis, se han calculado los tres índices de anisotropía de Huber independientes, con el objetivo de establecer su cercanía al comportamiento isotrópico ideal (i.e:  $AR = S_{jjjj}/S_{iiii} = 1$ ).

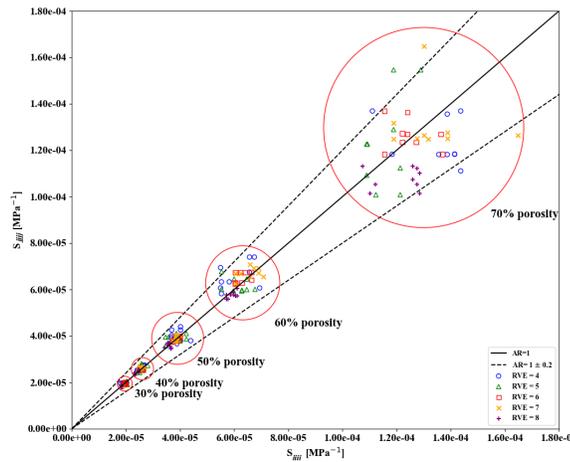


Figura 6.9: Correlación entre las diferentes componentes diagonales del tensor de rigidez de espumas metálicas sintéticas con tamaño de RVE entre 4 y 8 con porosidad entre 30 % y 70 %

En la figura 6.9 se muestran los resultados para la correlación entre los valores calculados de las diferentes componente diagonales del tensor de rigidez macroscópico aparente de las diferentes geometrías sintéticas analizadas. Aquí, la recta diagonal trazada en línea continua negra representa la condición de isotropía perfecta (i.e:  $AR = 1$ ), mientras que las líneas discontinuas representan una desviación del 20 % (i.e:  $AR = 0.8$  y  $AR = 1.2$ ). En esta figura, se observa que para cualquiera de los porcentajes de porosidad y tamaños de RVE, los resultados para el índice de anisotropía de Huber es consistentemente cercano a la unidad. Para el total de las 135 mediciones realizadas (3 mediciones por cada una de las 45 geometrías) casi la totalidad permanece dentro del rango  $1 \pm 0.2$ , el cual es muy cercano al caso isotrópico. Las excepciones corresponden al caso de 2 mediciones en 60 % de porosidad y 6 en 70 %, cuyas desviaciones del caso isotrópico se encuentran por debajo del 3.0 %.

Adicionalmente, se ha evaluado la razón de anisotropía de Huber promedio presente para cada geometrías. Los resultados se muestran en la figura 6.10, donde se observa que para todos los tamaños de RVE analizados, la desviación respecto del caso perfectamente isotrópico es inferior al 2.1 %. Por otra parte, de la figura se observa que el nivel de anisotropía se incrementa junto al porcentaje de porosidad, independiente del tamaño del RVE.

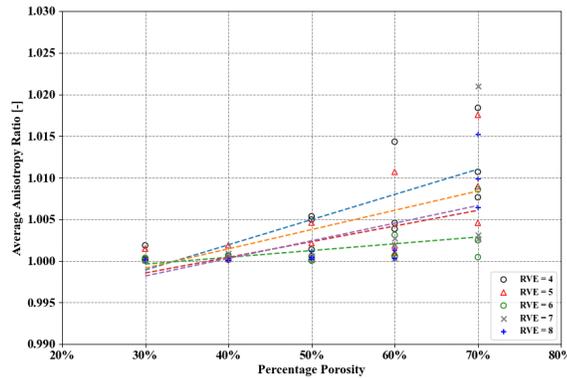


Figura 6.10: Razón de anisotropía de Huber (AR) promedio calculado para espumas sintéticas con tamaño de RVE entre 4 y 8 con porcentajes de porosidad entre 30 % y 70 %

### 6.2.3. Tamaño de RVE

De acuerdo con el trabajo de Kanit et al. [192], el uso de diferentes tipos de condiciones de contorno requiere diferentes tamaños mínimos de RVE para que estos efectos sean despreciables en el cálculo de las constantes elásticas del material, durante el proceso de homogeneización. Luego, con el objetivo de establecer convergencia en el cálculo de los tensores de rigidez equivalentes, se ha realizado un estudio comparativo para diferentes tamaños de RVE. En este modelo numérico, una condición de borde aproximadamente periódica modificada (mAPBC), basada en los trabajos de Al Kassem [255] y Yuan y Fish [256] ha sido implementada en el *software* ANSYS v19.1 para estimar las diferentes componentes del tensor de rigidez macroscópico equivalente de espumas metálicas sintéticas de CP-Ti.

Para tener una mejor referencia de tamaño del modelo utilizado, la dimensión del tamaño del RVE es medida a través de la relación de separación entre escalas existentes,  $\delta$ . Con esto, el tamaño de arista del RVE,  $a$ , se compara con el tamaño de las heterogeneidades contenidas en el material, que para este caso particular es cuantificado mediante el máximo tamaño de poro,  $d_{max}$ . Con lo anterior, en la 6.11 se muestran los resultados para las distribuciones de las componentes diagonales del tensor de rigidez,  $S_{iii}$ , calculadas para los diferentes modelos analizados, con las diferentes combinaciones de factores, en un estudio que incluyó un amplio rango de porosidades, entre 30 % y 70 %, y de tamaños de RVE ( $4 \leq \delta \leq 8$ ), con 5 especímenes por grupo ( $n = 5$ ).

De la figura 6.11 se puede observar que, para algunos casos, los resultados obtenidos para un tamaño de RVE igual a 8 veces el máximo tamaño de poro (i.e:  $\delta = a/d_{max} = 8$ ), para porosidades del 30 %, 50 % y 60 % (ver figura 6.11a, c, d), se observa una posible diferencia en el valor medio de las componentes diagonales del tensor de rigidez, sin embargo, los resultados muestran un comportamiento general estable. Esto último sugiere que, bajo las condiciones de simulación utilizadas, los resultados han

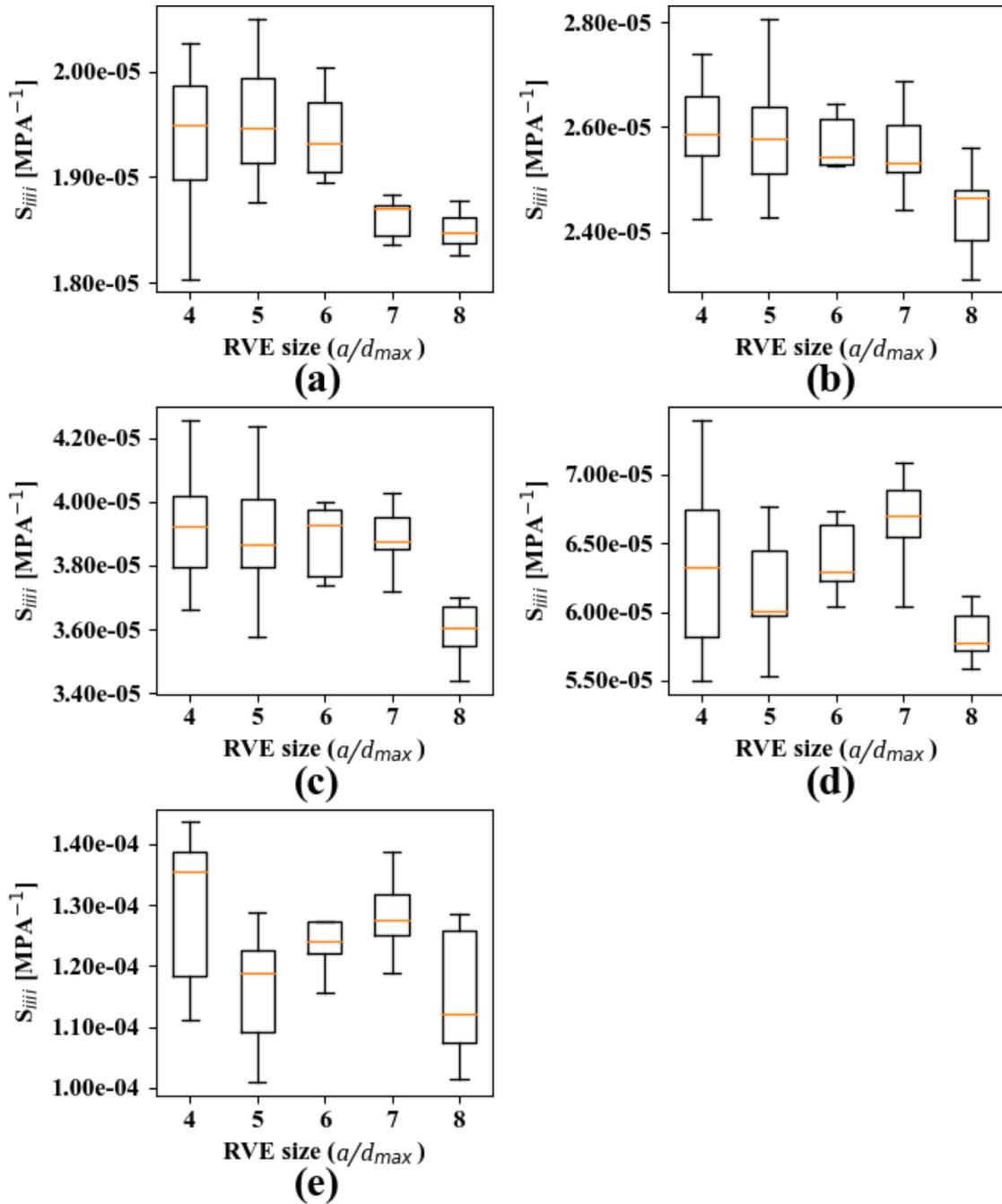


Figura 6.11: Distribución de componentes diagonales del tensor de rigidez macroscópico aparente de espumas sintéticas con tamaño de RVE entre 4 y 8 para (a) 30 %, (b) 40 %, (c) 50 %, (d) 60 % y (e) 70 % de porosidad

alcanzado la condición de convergencia para el tamaño de RVE, para los diferentes porcentajes de porosidad utilizados.

#### 6.2.4. Constantes elásticas equivalentes

Como se se indicó en los apartados anteriores, los resultados de índice de anisotropía de Huber,  $AR$ , promedio obtenidos mediante simulación FEM sugieren que el comportamiento elástico de las espumas sintéticas de CP-Ti analizadas es fuertemente isotrópico. En consecuencia, es razonable establecer que cada uno de los especímenes analizados posee un único valor para las diferentes constantes elásticas ingenieriles las que pueden ser calculadas como su valor promedio, como se describe en las ecuaciones 3.57, 3.58, 5.7 y 5.8.

Adicionalmente, como los resultados para el análisis del tamaño de RVE muestra que no existen diferencias significativas entre los diferentes tamaños de RVE analizados. En base a lo anterior, no se posee suficiente evidencia para considerar que los resultados calculados pertenecen a diferentes distribuciones estadísticas y, en consecuencia, es posible calcular las constantes elásticas ingenieriles macroscópicas equivalentes para cada uno de los porcentajes de porosidad utilizando la información para los diferentes tamaños de RVE.

A partir de lo anterior, se han establecido los valores para las constantes elásticas equivalentes de espumas metálicas de CP-Ti. En esta sección, se muestran los resultados para las diferentes constantes ingenieriles macroscópicas equivalentes con intervalos de confianza con el 95 % de confiabilidad, como una función del nivel de porosidad contenido en el material.

#### Módulo de Young

El módulo de Young equivalente para espumas metálicas de CP-Ti con diferentes porcentajes de porosidad han sido comparados tanto con modelos teóricos (i.e: Gibson [37] y Ramakrishnan y Arunachalam [81]) como con datos experimentales disponibles en literatura (i.e: Muñoz et al. [251]).

Como se puede observar en la figura 6.12, de forma consistente con lo esperado, los resultados para módulo de Young de las espumas de CP-Ti decrece en la medida que el porcentaje de porosidad aumenta. En lo específico, los resultados obtenidos mediante la metodología DEM-FEM propuesta sugieren un comportamiento muy similar al descrito por el modelo de Gibson. Sin embargo, para todo el rango de porosidad analizado se observa que los resultados obtenidos mediante la metodología DEM-FEM propuesta se encuentran contenidos en el rango delimitado por los modelos de Gibson y de Ramakrishnan y Arunachalam, al igual que los datos experimentales de Muñoz et al.

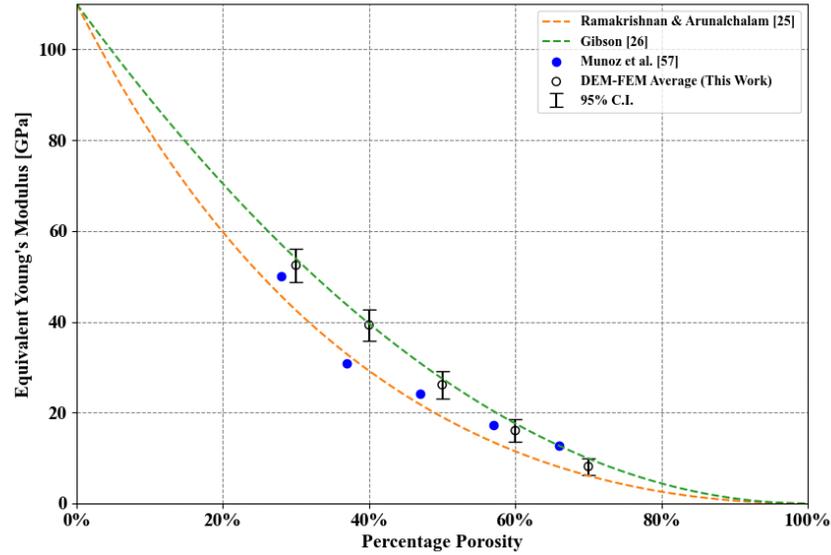


Figura 6.12: Módulo de Young isotrópico equivalente para espumas metálica de CP-Ti con porosidad abierta para diferentes porcentajes de porosidad

A modo de ejemplo, de acuerdo con la metodología propuesta la incorporación de un 30 % de porosidad permite alcanzar una reducción en la rigidez del material del 60 %. Mientras que el modelo de Gibson, con valor de constante  $C_1 = 1$ , para la incorporación del mismo porcentaje de porosidad predice una reducción en rigidez del material de un 50 %, la cual es un 10 % inferior a la obtenida a través de la metodología DEM-FEM propuesta.

### Razón de Poisson ( $\nu$ )

En relación a los resultados obtenidos para la razón de Poisson macroscópica equivalente de espumas metálicas de CP-Ti, estos han sido contrastados con los modelos teóricos de predicción de Ramakrishnan y Arunachalam [81] y de Nielsen [183]). En la figura 6.13 se muestran los valores promedio, junto a un intervalo de confianza del 95 %, considerando los 5 diferentes tamaños de RVE considerados.

De la observación de la figura 6.13 se aprecia una clara correlación con el porcentaje de porosidad. Aquí, al igual que para el caso del módulo de Young, la razón de Poisson decae en la medida que la porosidad se incrementa entre 30 % y 70 %, sin embargo, a diferencia del caso anterior, este decaimiento es en forma prácticamente lineal. Adicionalmente, se espera que esta tendencia sea extrapolable a porcentajes de porosidad inferiores al 30 % utilizado en este análisis. Los resultados obtenidos para la razón de Poisson en espumas CAD de CP-Ti se encuentran fuertemente alineados con el modelo de Nielsen, tanto en la tendencia lineal claramente observada como en los valores predichos. Aquí, los valores

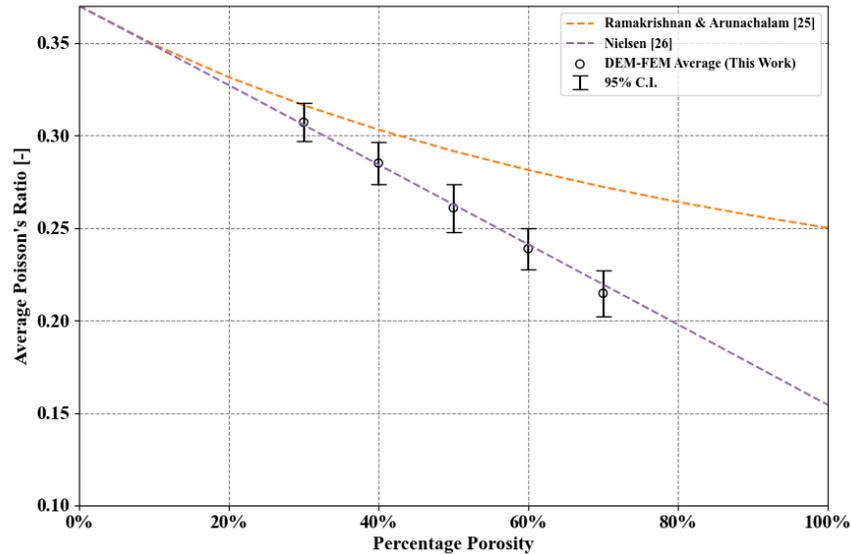


Figura 6.13: Razón de Poisson isotrópico equivalente para espumas metálica de CP-Ti con porosidad abierta para diferentes porcentajes de porosidad

promedio son muy cercanos a los predichos por este modelo.

### Módulo de Corte ( $G$ )

Con respecto al módulo de corte, los resultados obtenidos para espumas de CP-Ti fueron contrastados con modelos teóricos de Gibson [37] y de Ramakrishnan y Arunachalam [81]. Sabiendo que un material lineal e isotrópico solo posee 2 constantes elásticas independientes, los resultados para el módulo de corte,  $G$ , se calcularon a partir de la ecuación 3.57. En la figura 6.14 se muestran los resultados para valor promedio e intervalo de confianza de un 95 % para porosidades entre 30 % y 70 %.

Como se observa en la figura 6.14, dado que los valores de módulo de corte han sido calculados en base a la ecuación 3.57, los resultados muestran un comportamiento muy similar al mostrado por el módulo de Young. Sin embargo, la correlación entre los resultados numéricos obtenidos mediante la metodología DEM-FEM propuesta y el modelo de Gibson es mayor a la mostrada por los resultados para el módulo de Young.

En forma general, los modelos de Ramakrishnan y Arunachalam y de Gibson parecen ser buenos límites inferior y superior, respectivamente, para el módulo de corte de espumas metálicas sintéticas de CP-Ti.

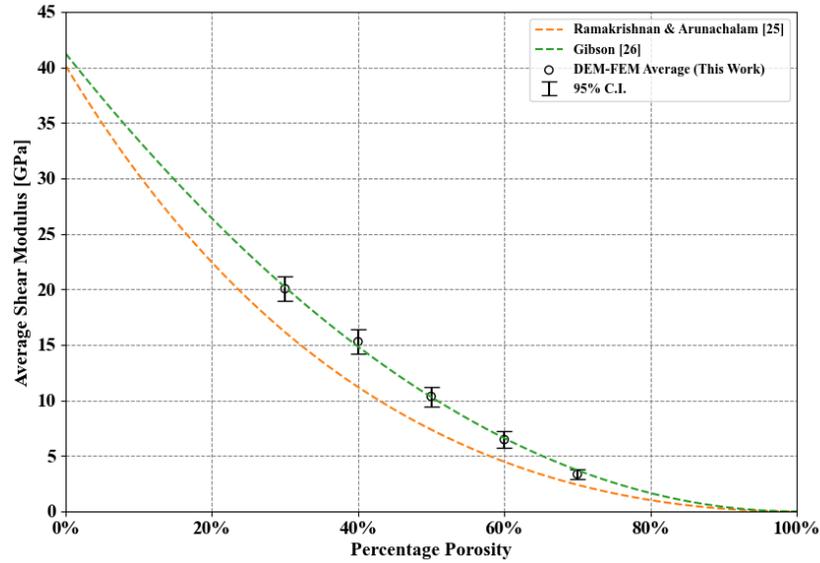


Figura 6.14: Módulo de corte isotrópico equivalente para espumas metálicas de CP-Ti con porosidad abierta para diferentes porcentajes de porosidad

### 6.3. Simulación del comportamiento mecánico de espumas metálicas con porosidad funcionalmente dirigida

Una vez validado el modelo numérico propuesto, se ha realizado un estudio para la respuesta mecánica de espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad funcionalmente dirigida, donde se ha buscado establecer la influencia de parámetros relevantes tales como nivel de porosidad, tipo de direccionalidad y orientación de la direccionalidad en el módulo de Young. Para esto, se ha implementado un experimento de tres factores en dos niveles, cuyo detalle ha sido indicado en la tabla 5.3.

El dominio utilizado corresponde a un cilindro de diámetro exterior  $D_{ext} = 20 \text{ mm}$  y altura  $H = 20 \text{ mm}$ , segmentado en 3 secciones. En el caso de las geometrías cuya porosidad está dirigida en forma axial, se han establecido 3 capas de igual altura, mientras que para las geometrías con porosidad dirigida en forma radial, se han establecido capas con espesores idénticos. Estos valores son resumidos en la tabla 6.4 y la tabla 6.5, respectivamente.

Tabla 6.4: Dimensiones dominio espumas con porosidad dirigida en dirección axial

Capa	$h_{inf}$ mm	$h_{sup}$ mm	$\Delta h$ mm
Inferior	0	6.66	6.66
Central	6.66	13.33	6.66
Superior	13.33	20	6.67

Tabla 6.5: Dimensiones dominio espumas con porosidad dirigida en dirección radial

Capa	$d_{int}$ mm	$d_{ext}$ mm	$\Delta r$ mm
Interior	0	6.66	6.66
Central	6.66	13.33	6.66
Exterior	13.33	20	6.67

En este experimento numérico, se ha utilizado un total de 10 réplicas, con el objetivo de mantener un control sobre el error de tipo II asociado. La selección de las 10 réplicas utilizadas en cada uno de los niveles de porcentaje de porosidad fue realizada en forma aleatoria, desde una base de 200 geometrías diferentes.

Para modelar el comportamiento mecánico del material base, se utilizó un modelo elástico lineal (ley de Hooke) donde las constantes elásticas para la aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa (57Ti-30Nb-13Ta) se resumen en la tabla A.1.

### 6.3.1. Constantes elásticas aparentes por capa

Como se esquematizó en la figura 5.1, en una primera fase se ha realizado el cálculo de las constantes elásticas aparentes de cada una de las geometrías en análisis. Para ellos se ha utilizado el esquema de homogeneización ya presentado, para simular el comportamiento de espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa entre 30 % y 70 % de porosidad, con una distribución de tamaños de poro entre  $350 \mu m$  y  $450 \mu m$  en diámetro, para un tamaño de separación entre escalas ( $\delta$ ) igual a 5 veces el máximo diámetro de poro. Debido a la utilización de geometrías cúbicas, el tamaño de arista de cada dominio corresponde a  $a = \delta \cdot d_{max} = 5 \cdot 450 \mu m = 2.25 mm$ .

En la figura 6.15 se muestran los resultados obtenidos para el módulo de Young aparente de los modelos para espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa, bajo las condiciones de simulación ya mencionadas. Aquí, los resultados de cada una de las geometrías junto a su valor real de porosidad es representado junto a la referencia ofrecida por la curva de predicción del modelo de Gibson [37], para un parámetro de ajuste  $C_1 = 1$ .

De manera similar al caso del CP-Ti, el módulo de Young de las geometrías de aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad homogénea posee un comportamiento similar al predicho por el modelo de Gibson, sin embargo, se obtienen resultados consistentemente por debajo de esta curva. Para mayor claridad en este efecto, en el anexo C.1 se muestra el detalle del valor promedio y un intervalo de confianza del 95 % para el porcentaje de porosidad y módulo de Young. En la tabla 6.6 se resumen los valores de promedio y límites inferior y superior para un intervalo de confianza del 95 % para el módulo de Young.

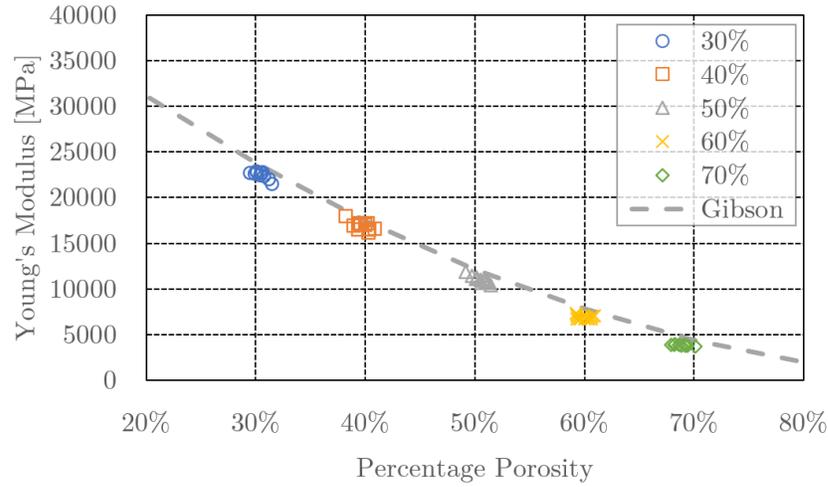


Figura 6.15: Distribución del módulo de Young promedio para espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con diferentes porcentajes de porosidad

Adicionalmente, en la figura C.1 muestran estos resultados en forma gráfica, donde se observa cómo independiente del valor nominal de porcentaje de porosidad analizado, el intervalo de confianza para el promedio del porcentaje de porosidad de las geometrías analizadas posee un rango de  $\pm 0.2\%$ , con una desviación del orden del 1%.

Tabla 6.6: Módulo de Young aparente para espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad homogénea

Porcentaje de porosidad	Módulo de Young MPa			
	Promedio	Rango	Límite Inf.	Límite Sup.
30 %	22484.9	309.7	22185.2	22804.6
40 %	16911.7	355.6	16556.1	17267.3
50 %	11001.2	308.6	10692.6	11309.9
60 %	6872.0	149.6	6722.7	7021.3
70 %	3798.5	43.8	3754.7	3842.3

Por otra parte, en la figura 6.16 se muestran los resultados obtenidos para las correspondientes razones de Poisson. Aquí, el valor promedio para cada una de las 50 geometrías analizadas se contrasta de manera referencial con la curva propuesta por Nielsen [183], la que mostró una gran cercanía para las simulaciones realizadas en CP-Ti. De manera similar al caso del módulo de Young, los resultados de la razón de Poisson para las espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa obtenidos son ligeramente inferiores a los predichos por Nielsen, con una baja dispersión.

En forma análoga al módulo de Young, en la tabla 6.7 se resumen los valores de promedio, rango y límites para un intervalo de confianza del 95 % para la razón de Poisson de espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa.

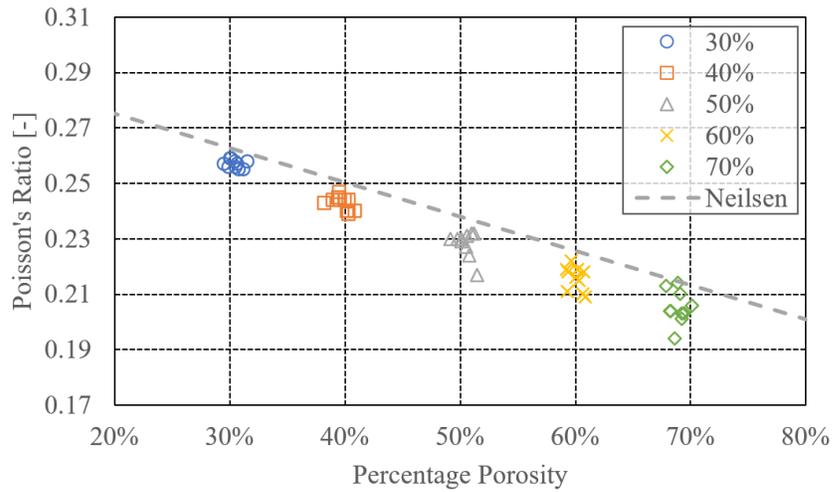


Figura 6.16: Distribución de la razón de Poisson promedio para espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con diferentes porcentajes de porosidad

Tabla 6.7: Razón de Poisson aparente para espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad homogénea

Porcentaje de porosidad	Promedio	Razón de Poisson		
		Rango	Límite Inf.	Límite Sup.
30%	0.257	0.001	0.256	0.258
40%	0.243	0.002	0.241	0.245
50%	0.228	0.003	0.225	0.231
60%	0.216	0.003	0.213	0.219
70%	0.205	0.004	0.201	0.209

De manera complementaria, en la figura 6.17 se muestran los valores promedio e intervalos de confianza para un 95% calculados para el promedio del módulo de Young de espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa homogénea con porcentajes de porosidad entre el 30% y el 70%, mientras que en la figura 6.18 se muestran los valores promedio e intervalos de confianza obtenidos para la razón de Poisson en el mismo rango de porosidad.

Para establecer los intervalos de confianza de la media en los distintos grupos de porcentaje de porosidad, se ha implementado una prueba de Levene para igualdad de varianzas de la forma propuesta por Levene, en su forma original para la diferencia  $d_{ij} = abs(x_{ij} - \bar{x}_i)$  [257, 258] junto a un análisis de varianza. Del análisis anterior, se observa que para los distintos grupos de porcentaje de porosidad existe evidencia (con  $\alpha = 0.05$ ) respecto de una diferencia en la varianza entre los diferentes grupos tanto para el módulo de Young (valor-p = 0.0147), como para la razón de Poisson (valor-p = 0.0381). A partir de lo anterior, en la definición de los intervalos de confianza para las medias de los grupos se ha preferido utilizar las varianzas de cada grupo, ante la varianza común (i.e: Proveniente de ANOVA tradicional).

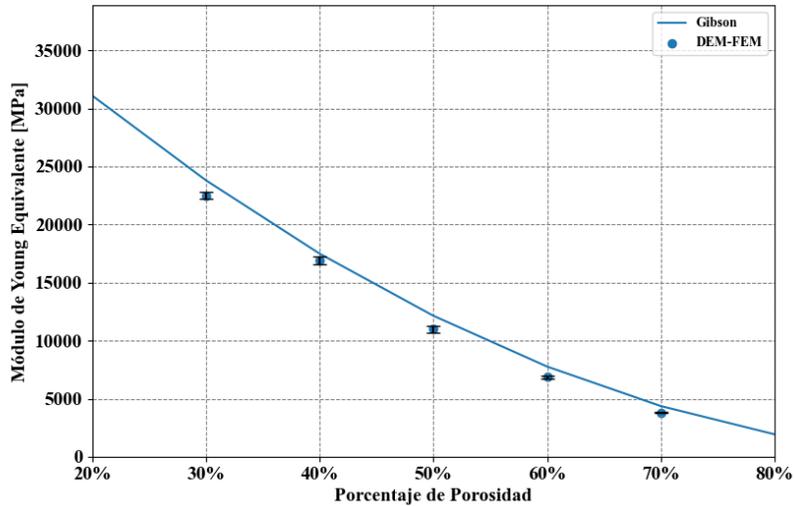


Figura 6.17: Distribución del módulo de Young promedio para espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con diferentes porcentajes de porosidad

### 6.3.2. Constantes elásticas equivalentes de espumas con porosidad funcionalmente dirigida

En una segunda etapa de análisis, para las diferentes combinaciones de factores establecidos en el experimento de la tabla 5.3, se ha establecido una asignación aleatoria entre las diferentes geometrías que representan cada una de las réplicas, según corresponda a los diferentes porcentajes de porosidad

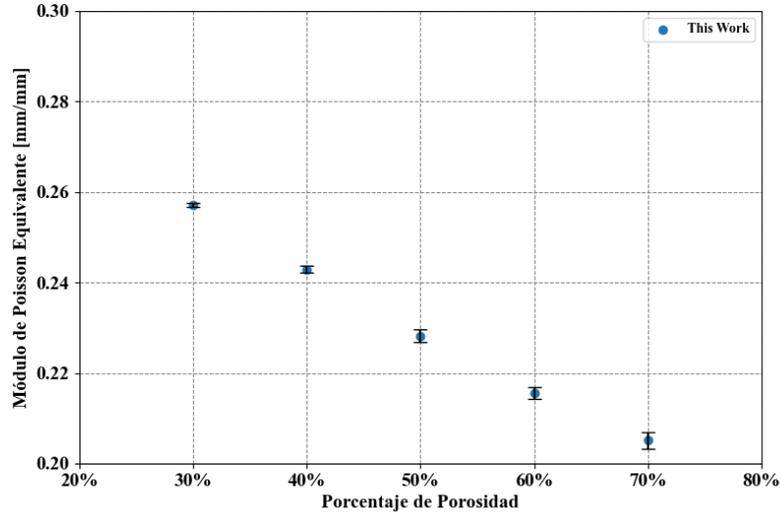


Figura 6.18: Distribución de la razón de Poisson promedio para espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con diferentes porcentajes de porosidad

de cada capa. La asignación de las diferentes geometrías para conformar cada una de las estructuras gradientes es detallada en las tablas del anexo D. La tabla 6.8 resume los volúmenes totales y porcentajes de porosidad por cada capa y porosidad promedio nominales de las geometrías gradientes para cada una de las combinaciones de factores considerados.

Tabla 6.8: Composición de porosidad por capa y promedio para espumas con porosidad dirigida

Combinación	Porosidad por capa	% Volumen total	Porosidad promedio
radial-asc-bajo	30 %-40 %-50 %	11.1 %-33.3 %-55.6 %	44.4 %
radial-asc-alto	50 %-60 %-70 %	11.1 %-33.3 %-55.6 %	64.4 %
radial-des-bajo	50 %-40 %-30 %	11.1 %-33.3 %-55.6 %	35.6 %
radial-des-alto	70 %-60 %-50 %	11.1 %-33.3 %-55.6 %	55.6 %
axial-asc-bajo	30 %-40 %-50 %	33.3 %-33.3 %-33.3 %	40.0 %
axial-asc-alto	50 %-60 %-70 %	33.3 %-33.3 %-33.3 %	60.0 %
axial-des-bajo	50 %-40 %-30 %	33.3 %-33.3 %-33.3 %	40.0 %
axial-des-alto	70 %-60 %-50 %	33.3 %-33.3 %-33.3 %	60.0 %

Luego de conformada cada geometría en base a las relaciones constitutivas aparentes de cada capa, se ha simulado un ensayo de compresión, bajo cumplimiento de los requerimientos geométricos mínimos establecidos en las normas ASTM-E9 [252] e ISO-13314:2011 [253]. En relación a las condiciones de contorno, cada espécimen con porosidad funcionalmente dirigido ha sido sometido a una deformación global axial equivalente a un 0.1 %, con el objetivo de obtener una respuesta completamente elástica-lineal.

Utilizando la prueba robusta de Levene para igualdad de varianza entre grupos, para las diferentes combinaciones de factores de orientación (ascendente-descendente) y nivel de porosidad (baja-alta) para dirección radial de gradiente de porosidad se observa que no existe evidencia estadísticamente significativa para un error tipo I  $\alpha$  del 5% de que las varianzas entre los diferentes grupos sean distintas (valor-p = 0.146). A partir de lo anterior se han calculado los intervalos de confianza del 95% para los valores promedio del módulo elástico aparente, para las diferentes combinaciones de factores analizados, en base a la varianza común proveniente del ANOVA de 2 factores. Estos resultados son resumidos en las tablas 6.9.

Tabla 6.9: Intervalos de confianza para el modulo de Young promedio en espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad dirigida radial

Combinación	Promedio	Rango	Límite Inf.	Límite Sup.
radial-ascendente-bajo	14727.5	109.2	14618.3	14836.7
radial-ascendente-alto	5753.5	109.2	5643.3	5861.7
radial-descendente-bajo	20075.1	109.2	19965.9	20184.3
radial-descendente-alto	9054.5	109.2	8945.3	9163.7

Por otra parte, la misma prueba de Levene para los resultados con dirección axial sugieren que si existe una diferencia estadísticamente significativa entre las varianzas de los distintos grupos (valor-p = 0.001) para un error tipo I  $\alpha$  del 5%. En consecuencia, en la tabla 6.10 se resumen los intervalos de confianza para un 95% para el promedio del módulo de Young en espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad funcionalmente dirigida en dirección axial, construidos a partir de la varianza propia de cada grupo.

Tabla 6.10: Intervalos de confianza para el modulo de Young promedio en espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad dirigida axial

Combinación	Promedio	Rango	Límite Inf.	Límite Sup.
axial-ascendente-bajo	16004.4	108.4	15892.0	16108.8
axial-ascendente-alto	6177.0	33.6	6143.3	6210.6
axial-descendente-bajo	16000.8	144.1	15856.6	16144.9
axial-descendente-alto	6177.0	47.2	6129.9	6224.2

El ANOVA de dos factores para las espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad funcionalmente dirigida en dirección axial sugiere que tanto para la orientación del gradiente como la interacción entre ambos factores no existe evidencia suficiente para sostener que existan efectos estadísticamente significativos (valor-p = 0.996 y valor-p = 0.998, respectivamente). Esta conclusión es consistente con los resultados esperados, debido a que este factor corresponde a invertir los especímenes en la línea de carga y, por lo mismo, no se espera que exista un cambio en su respuesta. A su vez, esto se confirma a través de una prueba t pareada, donde para los niveles de porosidad bajo y alto se obtiene que no existe una

diferencia estadísticamente significativa entre los valores medios obtenidos en las diferentes direcciones (valor-p = 0.997 en ambos casos).

Por otra parte, los resultados obtenidos para el módulo de Young aparente de espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad dirigida se compararon con distintas predicciones en la figura 6.19. En esta figura se muestran la distribución de los valores obtenidos para las 10 réplicas de cada una de las combinaciones de factores analizadas, junto con los resultados obtenidos para RVE de espumas con una porosidad homogénea (i.e: "Homogéneo") igual al valor promedio de las geometrías gradientes, como también el valor predicho por la curva de ajuste para el valor promedio de módulo de Young para espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa (i.e: "Promedio"), como se muestran en la figura 6.17, y el valor esperado en base al uso de la regla de mezclas en conjunto con el modelo de Gibson [37], con un valor de constante  $C_1 = 1$ .

En la figura 6.19 se observa que, en general, los resultados obtenidos para simulación de gradientes con dirección radial la metodología DEM-FEM entrega una respuesta para el modulo de Young que se encuentra acotada en la parte superior por la regla de mezclas y en la parte inferior por inferior por los otros modelos de predicción considerados. Mientras que para simulaciones de gradientes con dirección axial, los resultados obtenidos mediante la metodología DEM-FEM son inferiores a los sugeridos por los otros métodos.

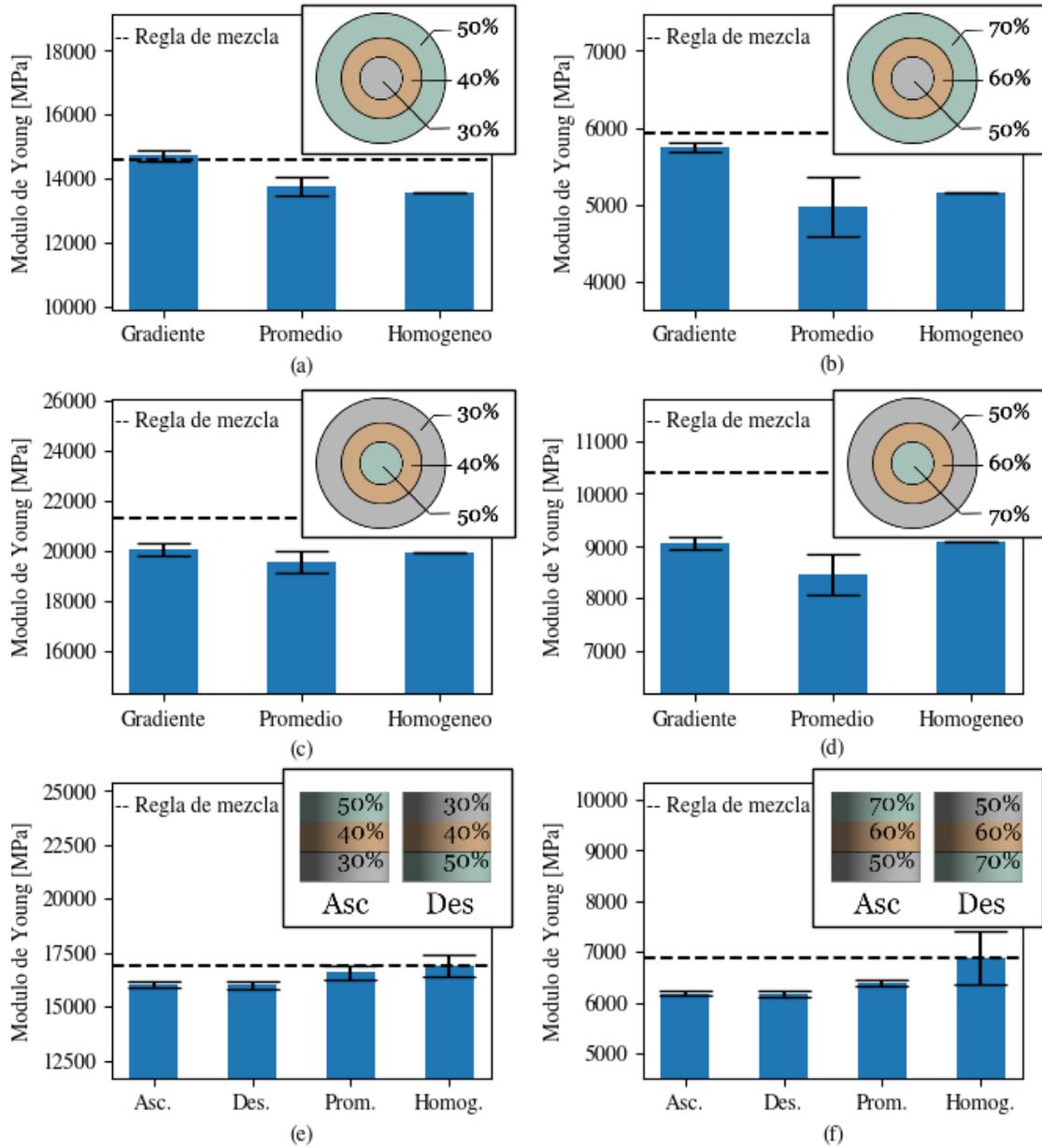


Figura 6.19: Distribución del módulo de Young aparente en espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa gradientes para diferentes combinaciones de dirección, orientación de gradiente y nivel de porosidad promedio, (a) gradiente radial ascendente y porosidad baja, (b) gradiente radial ascendente y porosidad alta, (c) gradiente radial descendente y porosidad baja, (d) gradiente radial descendente y porosidad alta, (e) gradiente axial y porosidad baja (f) gradiente axial y porosidad alta

## 6.4. Discusión

### 6.4.1. Estructura espumas generadas por simulación DEM

Con el propósito de recabar información objetiva respecto de la estructura interna de las geometrías de espumas metálicas generadas mediante DEM, para un futuro contraste con datos experimentales, se ha realizado un análisis bidimensional de la estructura resultante de cortes transversales a un conjunto de geometrías con diferentes niveles (o porcentajes) de porosidad y tamaños de RVE (i.e: relación de separación entre escalas  $\delta = a/d_{max}$ ).

De acuerdo con lo esperado, la utilización de una distribución uniforme para la asignación de tamaños de poro en la etapa de generación de las geometrías obtenidas mediante simulación DEM, para diámetros en un rango entre  $350 \mu m$  y  $450 \mu m$  produce geometrías para las cuales el diámetro promedio de poro es de  $400 \mu m$ . Sin embargo, la realización de cortes transversales a las geometrías genera que los tamaños de poro observados en estos cortes sea inferior al valor real.

En los resultados de la figura 6.1 se muestra que el procedimiento de cortes transversales sucesivos a las geometrías CAD obtenidos mediante simulación DEM arrojaron un tamaño de poro equivalente de  $300 \mu m$  (i.e:  $r_{eq} = 150 \mu m$ ), de forma homogénea para todos los niveles de porosidad y tamaños de RVE analizados. Este tamaño de poro equivalente representa una reducción del 25 %, respecto del tamaño de diámetro real de las geometrías analizadas.

Por otra parte, un análisis más detallado de la distribución de poros equivalentes de cada geometría (Anexo B.1), revela una asimetría en la distribución del tamaño de equivalente ( $r_e$ ) para casi la totalidad de las geometrías analizadas, con una mediana cercana a los  $175 \mu m$  (i.e:  $d_{eq} = 350 \mu m$ ). Esta asimetría en la distribución de tamaños de poro equivalente tiene su principal origen en la forma esférica de los poros, donde el radio equivalente de un poro que intersecta un plano arbitrario disminuye rápidamente en medida que la distancia entre su centro y el plano de intersección crece.

En relación a la distancia de intersección, la figura 6.1 muestra que bajo las condiciones de simulación realizadas las geometrías obtenidas mediante simulación DEM mostraron un valor promedio de  $75 \mu m$ , con una desviación estándar de  $60 \mu m$ , de manera independiente tanto del porcentaje de porosidad como del tamaño del dominio considerado (i.e: Tamaño del RVE). En referencia a lo anterior, el único efecto observable se relaciona con la variabilidad del valor promedio donde, tal como es esperable, a mayor tamaño del dominio, existe una cantidad de poros y, consecuentemente, una menor variabilidad en el valor promedio entre diferentes geometrías.

De manera similar a la distribución de tamaños de poro equivalente, un análisis más profundo de

la distribución de distancia de interconexión en cada una de las geometrías analizadas (Anexo B.2) evidencia una asimetría en su distribución, sin embargo, para este parámetro la mediana observada es inferior a la media. Adicionalmente, en la gran mayoría de estas, el tercer cuartil (Q3) no supera los  $150 \mu m$ , con máximos que no superan los  $250 \mu m$ , lo que sugiere un tamaño de interconexión que es inferior al radio equivalente mediano. Este comportamiento es consistente con el hecho de que dos poros cercanos sólo pueden experimentar un nivel limitado de coalescencia dado por los tamaños de estos mismos y la hipótesis de que la probabilidad de observar interconexión entre dos poros disminuye en la medida que el valor se acerca al radio tamaño de poro.

#### 6.4.2. Cálculo de porosidad de espumas generadas por simulación DEM

La implementación en código *Python* del algoritmo propuesto para el cálculo de volumen en grupos no convexos, basado en SMC con una estrategia de muestreo eficiente de hipercubo latino, se ha realizado como una alternativa para la determinación del porcentaje de porosidad de espumas metálicas sintéticas generadas mediante simulación DEM. Los resultados obtenidos mediante este código han sido contrastados con aquellos a través de la utilización del *software* McVol [236], analizando aspectos como costo computacional asociado, exactitud y precisión de los resultados.

En relación a los costos computacionales asociados, los menores tiempos de ejecución promedio observados en la figura 6.4, por parte del algoritmo propuesto se asocian, principalmente a la estrategia de muestreo eficiente de hipercubo latino. Mediante este tipo de muestreo eficiente, el criterio de convergencia basado en error estándar es alcanzado con un menor número de iteraciones del programa, ya que la desviación estándar entre iteraciones es menor.

Por otra parte, el mayor tiempo de cálculo asociado a geometrías con base cilíndrica se encuentra asociado a dos factores específicos. El primer factor corresponde a la necesidad de un mayor número de iteraciones promedio para alcanzar el criterio de convergencia respecto de las geometrías con base cubica, tal como se muestra en la figura 6.5. Sin embargo, el segundo y más influyente factor que afecta en el tiempo de ejecución para geometrías de base cilíndrica corresponde al mayor tiempo por cada iteración, que triplica al tiempo promedio de cada iteración en el caso de las geometrías de base cubica. Esta diferencia se concentra en el proceso de generación de los puntos aleatorios en el espacio equiprobable, para la estrategia de muestreo por hipercubo latino. La conformación de los estratos en un espacio en coordenadas cilíndricas requiere la utilización de funciones trigonométricas (sin y cos) para la transformación de las coordenadas de cada punto aleatorio generado al correspondiente espacio cartesiano. A consecuencia de lo anterior, cada paso de cálculo del programa es más lento que en el caso de geometrías de base cúbica.

Al comparar la precisión de los resultados de porcentaje de porosidad, se observa una tendencia donde la implementación propuesta exhibe mayor precisión que McVol. Sin embargo, el nivel de incertidumbre obtenido es un parámetro establecido por el usuario que, en el caso de los resultados mostrados está acotado a  $\pm 0.5$  %.

Finalmente, el algoritmo propuesto permite obtener resultados más exactos, cuando el nivel de porosidad se contrasta con el valor calculado a partir de importar cada geometría al preprocesador DesignModeler de ANSYS. Esta mayor exactitud en los resultados se sustenta en uno de los aspectos clave de la implementación que lo diferencian de otras implementaciones, que es la incorporación de la geometría base exterior. Mientras McVol y otras implementaciones definen un volumen delimitado por la unión de las esferas, la implementación propuesta define un volumen primitivo que permite una intersección con las esferas. Esto permite obtener errores absolutos en los cálculos inferiores a los obtenidos mediante otros métodos.

### 6.4.3. Comportamiento mecánico de espumas con porosidad homogénea

Con el objetivo de validar la pertinencia de una ley de comportamiento elástica lineal e isotrópica como relación constitutiva para cada capa de de una espuma con porosidad funcionalmente dirigida, se realizó un estudio numérico para el análisis sobre la base de simulación de espumas de CP-Ti, a través de un método de perturbación lineal. Al analizar la razón de anisotropía de Huber en los modelos analizados, se ha observado una respuesta que, en general, tiene desviaciones puntuales respecto del valor ideal inferiores al 20 % y, en promedio, inferiores al 2 %. Estos bajos niveles de desviación respecto del caso ideal son consistentes con los valores esperados, debido a la incorporación de una distribución no estructurada de poros. A partir de lo anterior, se espera que no se encuentren direcciones preferentes para el comportamiento mecánico de la estructura porosa generada.

Como se ha establecido en forma previa, la determinación de las constantes elásticas que definen la relación constitutiva equivalente en un material homogeneizado son dependientes tanto de las condiciones de borde utilizadas, como del tamaño del dominio (i.e: RVE) a utilizar. En el caso de este trabajo, se ha propuesto la utilización de una condición de borde aproximadamente periódica modificada, para la aplicación de un método de perturbación lineal que permita estimular las diferentes constantes elásticas. Mediante el análisis de los resultados obtenidos para las componentes diagonales del tensor constitutivo de rigidez,  $S_{iiii}$ , se ha establecido que una constante de separación entre escalas,  $\delta$ , igual a 4 es suficiente para establecer una solución. En el estudio realizado para geometrías de CP-Ti porosas con tamaño comprendidos entre 4 y 8 veces el tamaño máximo de poro, no se encontraron diferencias significativas entre los valores de las componentes diagonales en ninguno de los niveles de porosidad considerados en

el rango entre 40 % y 70 %.

Teniendo lo anterior en consideración, se han determinado los valores para las constantes elásticas ingenieriles para CP-Ti poroso, para los diferentes porcentajes de porosidad analizados. Al comparar estos resultados con datos de ensayos de laboratorio como los publicados por los autores [Muñoz et al. \[251\]](#), se observó una gran similitud para el caso del módulo de Young. Aquí, las diferencias entre los resultados obtenidos con los reportados por [\[251\]](#) pueden ser asociados, principalmente, a diferentes factores de ruido en los procesos de manufactura y ensayo. A modo de ejemplo, los valores de módulo de Young promedio reportados para un 37 % de porosidad aparentan ser particularmente bajo, mostrando un distanciamiento de la tendencia general mostrada por los demás resultados. Factores adicionales que influyen en la diferencia entre los resultados corresponden a las propiedades de material denso utilizadas, respecto de los obtenidos por [\[251\]](#).

Al contrastar los resultados obtenidos con otros modelos de predicción, tanto el módulo de Young como el módulo de corte presentan una gran similitud con respecto al modelo de [Gibson \[88\]](#) (ecuación 2.8).

#### 6.4.4. Comportamiento mecánico de espumas con porosidad funcionalmente dirigida

Habiendo establecido una longitud de separación entre escalas,  $\delta$ , mínima adecuada de manera tal que el tamaño de arista,  $a$ , del cubo que representa el dominio del RVE para una espuma con porosidad homogénea a partir del cual se establezcan las constantes elásticas aparentes por capa se igual a 5 veces el máximo tamaño de poro, i.e:  $a = \delta \cdot d_{max} = 5 \cdot 450 \mu m$ , el módulo de Young y la razón de Poisson de espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa han sido obtenidos mediante simulación DEM-FEM, teniendo como referencia las propiedades mecánicas elásticas de la aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa densa presentada por [Chicardi et al. \[126\]](#).

Estos resultados, los que mostrados en la figura 6.17 y figura 6.18, son consistentes con aquellos obtenidos previamente para CP-Ti, exhibiendo una tendencia muy similar a los predichos por el modelo de Gibson [\[37\]](#) para el módulo de Young, mientras que los valores de la razón de Poisson son muy similares al los predichos por el modelo de Nielsen [\[183\]](#). Ambos resultados obtenidos, tanto para el módulo de Young como para la razón de Poisson, son consistentemente inferiores a los predichos por los modelos antes mencionados. Si bien estos son similares a los obtenidos mediante las otras metodologías, esta tendencia sugiere que la interacción entre las diferentes capas y la dirección en que se realiza la variación de porosidad sobre el dominio poseen un efecto en el módulo de Young aparente del espécimen.

En este contexto, se observa que las espumas fabricadas en la aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad

homogénea requieren de un mínimo cercana al 35 % para exhibir un módulo elástico similar al hueso cortical de 20 *GPa* (ref [10]), mientras que para exhibir un módulo elástico similar al hueso trabecular (i.e: 1.5 *GPa*) [11] las espumas requieren de una porosidad superior al 70 % analizado en este trabajo, aún teniendo en consideración la variabilidad respecto del valor de referencia. Si bien esto proporciona una posible solución a uno de los principales inconvenientes que poseen los biomateriales metálicos [102], asociado al *stress shielding* producido por la diferencia de módulo elástico entre ambos materiales [36], esto no aborda otros requerimientos establecidos para favorecer una buena respuesta biológica tal como el alto nivel de porosidad abierta [100].

Al ver los resultados mostrados tanto en la tabla 6.10 como en la figura 6.19a-d, se observa que la combinación de gradiente radial descendente con nivel de porosidad baja (i.e: 50 %-40 %-30 % en dirección radial) es suficiente para obtener un módulo elástico similar al del hueso cortical, mientras que al invertir la orientación de este gradiente, es decir, para el gradiente radial ascendente con nivel de porosidad baja (i.e: 30 %-40 %-50 % en dirección radial) se obtiene una porosidad promedio mayor (44.4 % versus 35.5 %) y en consecuencia un módulo elástico aparente menor. Este efecto sugiere la posibilidad de ajustar el nivel de porosidad a valores más bajos (i.e: estructura más densa), o de utilizar un gradiente más agresivo (i.e: 40 %  $\pm$  20 %) para obtener como resultados un mismo módulo elástico aparente, o bien la alternativa de utilizar una combinación de ambos con el objetivo de satisfacer la condición de módulo elástico aparente similar al tejido, como sugiere Wiria et al. [36], a la vez que se proporciona un núcleo estructural más robusto, junto a una superficie exterior con alto nivel de porosidad que permita favorecer la respuesta biológica a través de la osteointegración, en línea con los requerimientos definidos por Chen et al. [100].

Por su parte, los resultados obtenidos para gradientes axiales (ver tabla 6.10 y figura 6.19e-f) muestran que la utilización de gradientes en la estructura de espumas de aleación ( $\beta + \gamma$ )-TiNbTa en los niveles utilizados no permite alcanzar un módulo de Young aparente del nivel del hueso cortical, sin embargo, en ambos niveles de porosidad el módulo elástico aparente alcanzado es inferior al del hueso cortical. Adicionalmente, la independencia de estos resultados respecto de la orientación del gradiente sugiere una oportunidad para establecer especímenes cuya superficie de apoyo posea altos niveles de porosidad que favorezcan la osteointegración, como sugieren [100], sin necesidad de comprometer la robustez estructural del resto del espécimen.

# Capítulo 7

## Conclusiones

El principal objetivo de este trabajo de tesis ha sido el realizar la extensión de una metodología numérica basada en la utilización conjunta del DEM y FEM como una herramienta para determinar la respuesta mecánica de espumas metálicas con porosidad funcionalmente dirigidas. Este objetivo ha sido alcanzado a través del cumplimiento de los diferentes objetivos específicos definidos en el capítulo 1.

En relación a la estructura y morfología de espumas fabricadas por simulación DEM, se desarrolló un análisis estadístico descriptivo de la distribución de tamaño de poro y de la longitud de interconexión, para cortes transversales del dominio de análisis (i.e: RVE). Este análisis ha mostrado que, tanto la manera en que se distribuyen el tamaño medio de poro equivalente como la longitud de interconexión media son independientes de las variables como el tamaño del dominio y porcentaje de porosidad.

Respecto del calculo de porcentaje de porosidad de las geometrías generadas por simulación DEM, se desarrolló un algoritmo basado en SMC con una técnica de muestreo eficiente de hipercubo latino que al ser comparada con un código similar (i.e: McVol) presentó un mejor rendimiento tanto en *runtime* como en precisión del calculo.

Por otra parte, la utilización de esta implementación en código Python permitió establecer cómo la utilización de simulación DEM, como método para generación es altamente preciso para obtener geometrías con porcentajes de porosidad cercanos a los valores nominales. En un estudio que contempló el análisis de 45 geometrías generadas bajo los mismos parámetros de simulación, estas mostraron desviaciones del orden de  $\pm 2\%$ , respecto de sus valores nominales, en rangos de porosidad entre el 30% y 70% para dominios (i.e: RVE) con longitud de separación entre escalas (i.e:  $\delta = a/d_{max}$  entre 4 y 8).

Para validar la utilización de un esquema de homogeneización de dos escalas, se propuso la utilización

de una condición de borde aproximadamente periódica modificada (mAPBC), junto a un procedimiento de perturbación lineal para determinar las constantes elásticas del tensor constitutivo macroscópico equivalente de espumas de CP-Ti. Este estudio permitió verificar que las geometrías DEM generadas por simulación DEM exhiben un comportamiento elástico isotrópico, cuando este es evaluado a través de la razón de anisotropía de Huber. Bajo esta métrica, las espumas de CP-Ti mostraron razones de anisotropía con desviaciones inferiores al 20 % (i.e:  $AR = 1.0 \pm 0.2$ ) en forma individual y una desviación promedio por debajo del 3 % (i.e:  $AR = 1.0 \pm 0.3$ ) para espumas con porosidad entre el 30 % y el 70 % y para longitudes de separación entre escalas entre 4 y 8.

Una vez validado el esquema de homogeneización de dos escalas, la metodología DEM-FEM original se extendió para su aplicación en materiales funcionalmente dirigidos a través del estudio numérico del comportamiento de espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad funcionalmente dirigida. Este estudio consideró la determinación de las constantes elásticas aparentes en un total de 50 geometrías generadas por simulación DEM con una longitud de separación entre escalas  $\delta = a/d_{max} = 5$ , con porosidades homogéneas entre 30 % y 70 %. Estos resultados mostraron gran consistencia con los obtenidos para el caso de validación de CP-Ti, con intervalos de confianza del 95 % para el módulo de Young con magnitudes inferiores a 0.4 GPa (para espumas con 40 % de porosidad) y para la razón de Poisson de 0.004 mm/mm (para espumas con 70 % de porosidad). Estos rangos representan una variación porcentual del 2.8 % del valor promedio en el caso del 40 % de porosidad (mayor desviación) para el módulo de Young y del 1.9 % en la razón de Poisson para el 70 % de porosidad.

Luego, las constantes elásticas aparentes calculadas mediante el esquema de homogeneización establecido, fueron asignadas en forma aleatoria y transferidas a modelos cilíndricos con porosidad funcionalmente dirigida en dirección axial y radial mediante un modelo constitutivo elástico-lineal para estudiar el efecto de los gradientes y niveles de porosidad en estas geometrías para 2 direcciones de gradientes (axial y radial), con 2 orientaciones (ascendente y descendente) y dos niveles de porosidad (bajo, 30 %-40 %-50 % y alto, 50 %-60 %-70 %). Este efecto fue estudiado a través del módulo de Young aparente resultantes de la simulación de un ensayo de compresión, de acuerdo con los requerimientos asociado a las normas ASTM-E9 [252] e ISO-13314:2011 [253].

Los resultados obtenidos para el módulo de Young aparente en espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad funcionalmente dirigida mostraron que, si bien metodologías como la regla de mezcla, la aproximación mediante el modelo de Gibson para la porosidad promedio que exhibe la geometría y geometría equivalente con porosidad promedio homogénea, existe una diferencia en la respuesta mecánica, lo que sugiere un efecto de la presencia de estos gradientes y de la interacción entre las diferentes capas. Mientras que las espumas con porosidad dirigida en forma radial exhibieron un módulo de Young aparente menor al calculado mediante regla de mezclas (salvo para la dirección radial

ascendente con porosidad baja), la metodología DEM-FEM extendida mostró valores superior a los calculados mediante los otros métodos. Sin embargo, para espumas con gradientes en dirección axial la metodología DEM-FEM extendida mostró valores de módulo de Young aparente inferiores a los obtenidos tanto por regla de mezclas como por los otros métodos. Adicionalmente, de las espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad funcionalmente dirigida en dirección axial se observó que los resultados obtenidos mediante la metodología DEM-FEM extendida no son sensibles a la orientación del gradiente, de forma consistente con lo resultados esperados tanto para nivel de porosidad bajo como alto.

En relación a las posibles rutas de fabricación, los resultados numéricos obtenidos para espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad homogénea sugieren que para mitigar los efectos del *stress shielding* en aplicaciones biomédicas es necesario incorporar un porcentaje de porosidad del 35 %, para obtener un módulo de Young aparente similar al del tejido óseo cortical (i.e: 20 *GPa*). Para espumas con porosidad funcionalmente dirigidas, este porcentaje promedio se corrobora en la combinación de gradiente en dirección radial descendente con nivel de porosidad baja 50%-40%-30 % (i.e: 50 % capa interior, 40 % capa intermedia y 30 % capa exterior) con porosidad promedio de 35.6 %, cuyo módulo de Young aparente promedio fue de 20.08 *GPa*. Sin embargo, la diferencia observada para las geometrías con orientación invertida sugieren que es posible obtener una mejor combinación al invertir el gradiente con porcentajes de porosidad inferiores, de manera de mantener constante la porosidad promedio, pero con un mayor porcentaje de porosidad en la periferia, que favorezca la función de osteointegración. Para este caso, se sugiere explorar la utilización de gradientes como 20 %-30 %-40 % (con 34.4 % de porosidad promedio) o con mayor variación como 0 %-30 %-50 % (con 37.8 % de porosidad promedio). Así mismo, los resultados obtenidos para espumas con porosidad funcionalmente dirigida en dirección axial sugieren que es posible obtener módulos elásticos aparente similares a los del tejido óseo utilizando gradientes que produzcan porcentaje de porosidad promedio más bajos a los utilizados en este estudio, tal como 25 %-35 %-45 %.

## 7.1. Aportes Específicos

A continuación, se resumen las contribuciones específicas realizadas en este trabajo de tesis.

1. La distribución de tamaños de poro y distancia de interconexión en un total de 75 geometrías de espumas generadas por simulación DEM fue calculada mediante la utilización de un algoritmo sistemático para la realización de cortes transversales virtuales junto con la utilización de una estrategia eficiente de muestreo, para identificar el traslape entre elementos en la evaluación de la distancia de interconexión. Estos datos, aunque descriptivos, permiten cuantificar los principales

parámetros que definen la estructura de las geometrías generadas por simulación DEM

2. Un algoritmo basado en simulación de Monte Carlo fue desarrollado e implementado en código Python para realizar el cálculo de porosidad en geometrías no convexas como espumas metálicas. Este desarrollo contempló el estudio de tiempos de ejecución y precisión en cálculo para un total de 40 geometrías generadas por simulación DEM, y seleccionadas en forma aleatorias de un total de 200 geometrías, en 5 niveles de porosidad diferentes. Estos resultados fueron contrastados con una implementación similar (McVol) mostrando un menor tiempo de cálculo (*runtime*) y un menor error en el cálculo de porosidad. Este estudio fue presentado a la comunidad científica en conferencias y publicado en la [Campillo et al. \[237\]](#)
3. Para la aplicación del esquema de homogeneización de dos escalas propuesto por [Pérez et al.](#), se presentó la formulación de condiciones de borde aproximadamente periódica modificada (mAPBC) con el objetivo de superar las restricciones impuestas por la falta de periodicidad geométrica en las superficies opuestas del dominio de análisis (i.e: RVE). Esta formulación fue validada a través del cálculo de las constantes elásticas equivalentes de CP-Ti siendo contrastadas con otros modelos de predicción. Estos resultados fueron presentados a la comunidad científica en conferencias y publicados en [Campillo et al. \[259\]](#)
4. La metodología DEM-FEM propuesta por [Pérez et al.](#) fue extendida para su uso en materiales con porosidad funcionalmente dirigida. Se utilizó para el cálculo del módulo elástico aparente en espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa (57Ti-30Nb-13Ta) de la ref [\[126\]](#) en especímenes de ensayo de compresión bajo las indicaciones de las normas ASTM-E9 [\[252\]](#) e ISO-13314:2011 [\[253\]](#) con porosidad funcionalmente dirigida en dirección radial y axial con dos niveles de porosidad. Estos resultados aun no han sido comunicados a la comunidad científica.
5. Las constantes elásticas de espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad homogénea fueron calculadas utilizando la metodología DEM-FEM extendida para un rango de porosidad entre 30 % y 70 %, permitiendo identificar posibles rutas de fabricación para aplicaciones biomédicas con porosidad homogénea
6. El módulo elástico aparente de espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad funcionalmente dirigida fue calculado utilizando la metodología DEM-FEM extendida, permitiendo identificar posibles rutas de fabricación de espumas con aplicaciones biomédicas con comportamiento mecánico similar al tejido óseo.

## 7.2. Futuros Trabajos

Si bien el objetivo principal de este trabajo de tesis ha sido la extensión de la metodología DEM-FEM propuesta por Pérez et al. [231] para su aplicación en materiales con porosidad funcionalmente dirigida en el contexto de aplicaciones biomédicas, muchos aspectos han quedado fuera de los alcances de este trabajo o bien se han identificado nuevas oportunidades durante el desarrollo de este mismo. A partir de lo anterior se identifican y sugieren los siguientes trabajos futuros:

- **Estudio comparativo de la estructura de geometrías generadas por simulación DEM**

El análisis de la estructura bidimensional de geometrías de espumas generadas por simulación DEM presentado en el capítulo 5 se realizó con ciertas limitaciones. Este análisis fue solamente descriptivo y su comparación con la estructura de espumas metálicas reales no fue posible de realizar dentro de este trabajo debido a que no se contó con recursos que permitieran la fabricación y análisis de especímenes de laboratorio, bajo condiciones y con características conocidas. Un estudio de este tipo entregará una visión cuantitativa respecto de la similitud de estos modelos geométricos y permitirá realizar ajustes específicos para su replicación.

- **Extensión de metodología de cálculo de porosidad por simulación de Monte Carlo**

Esta metodología desarrollada, basada en la simulación de Monte Carlo, provee una herramienta de gran utilidad para realizar el cálculo de volumen y porosidad en geometrías no convexas, como lo son las espumas de porosidad abierta. Sin embargo, esta metodología y su implementación aun poseen desafíos por resolver. Uno de estos aspectos corresponde al carácter de escalamiento lineal que exhibe el algoritmo con respecto al número de poros o esferas contenidas en el volumen. Para poder analizar volúmenes de dimensiones mayores los tiempos de calculo podrían crecer de forma restrictiva para su uso, de manera que una alternativa de mejora corresponde a extender este algoritmo para una aplicación paralelizada en GPU. Adicionalmente, el uso de esta metodología puede ser extendido para su uso en otros campos como el calculo de volumen molecular.

- **Extensión de esquema de homogeneización para comportamiento elástico no lineal y plástico**

La implementación realizada en este trabajo para el esquema de homogeneización de dos escalas, en el caso de espumas con porosidad homogénea, se ha limitado a una respuesta donde la relación constitutiva homogeneizada es de tipo elástico-lineal, sin embargo, este esquema puede ser extendido el tratamiento de la zona de comportamiento crítica, como lo es la zona cercana a la meseta, donde la relación constitutiva homogeneizada requiere ser de tipo elástica no-lineal (e.g: Relación constitutiva implícita [260, 261]) o bien plástica. Esta extensión permitirá en análisis del comportamiento de materiales porosos cerca de su límite elástico, el cual puede ser de utilidad

tanto en aplicaciones biomédicas, como en otros campos.

- **Validación experimental de resultados numéricos obtenidos mediante metodología DEM-FEM**

Una de las principales limitaciones que ha tenido el desarrollo de este trabajo es la falta de datos experimentales que permitan realizar un contraste de los resultados numéricos obtenidos. En este sentido, la validación experimental de estos resultados surge como un paso siguiente lógico para esta etapa. Dentro de la validación experimental, se destaca la necesidad de contrastar los resultados obtenidos tanto para espumas de  $(\beta + \gamma)\text{TiNbTa}$  con porosidad homogénea como funcionalmente dirigida. En relación a espumas con porosidad funcionalmente dirigidas se considera que el contraste con diferentes gradientes y niveles de porosidad serán también de gran relevancia para generar data que permita entregar guías que faciliten el ajuste de estos parámetros, según sean los requerimientos específicos.

- **Aplicación de metodología DEM-FEM extendida para diseño de componentes tridimensionales**

La extensión de la metodología DEM-FEM realizada en este trabajo ha estado enfocada en simular el comportamiento de espumas de  $(\beta + \gamma)\text{-TiNbTa}$  con porosidad funcionalmente dirigida en especímenes para ensayos de compresión, sin embargo, se espera esta metodología sea aplicada para el diseño de componentes y prótesis que posean un comportamiento sinérgico con el tejido óseo donde sean implantados.

- **Otras extensiones del esquema DEM-FEM**

Como se mencionó, el esquema de homogeneización de dos escalas utilizado en este trabajo sólo comprende el análisis del material en un rango elástico-lineal, sin embargo, existen otras interrogantes respecto del comportamiento de materiales porosos que aun no han sido abordadas ni por este trabajo ni por el trabajo de otros autores. Entre estas interrogantes se destaca el comportamiento de estos materiales bajo cargas cíclicas, el efecto de corrosión debido al ambiente al que estén expuestos o el cambio de comportamiento de este tipo de materiales una vez iniciada la fase de osteointegración. Todas estas interrogantes parecen merecer ser abordadas en un futuro para así poder predecir de mejor manera el comportamiento de largo plazo de este tipo de materiales y componentes.

## Apéndice A

# Propiedades mecánicas aleación $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa

En este apartado se resumen las propiedades mecánicas elásticas de la aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa 57Ti-30Nb-13Ta propuesta por Chicardi et al. [126] y que fueron utilizadas como *input* para el modelo constitutivo elástico-lineal para análisis FEM.

Tabla A.1: Propiedades elásticas para aleación  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa

Propiedad	Valor	Unidad
Módulo de Young	48600	MPa
Módulo de Poisson	0.3	-
Límite Elástico	1860	MPa

## Apéndice B

# Caracterización bidimensional de geometrías de espumas generadas mediante simulación DEM

### B.1. Distribución de tamaño de poro bidimensional

En este apartado se muestran en detalle los diagramas de caja y bigote con los resultados para la distribución de tamaños de poro equivalente y longitud de interconexión en geometrías CAD generadas por simulación DEM. Por extensión, sólo se incluyen los resultados para los casos extremos de tamaño de dominio, con longitud de separación entre escalas,  $\delta$ , igual es a 4 y 8, y los 5 niveles de porosidad entre 30% y 70%.

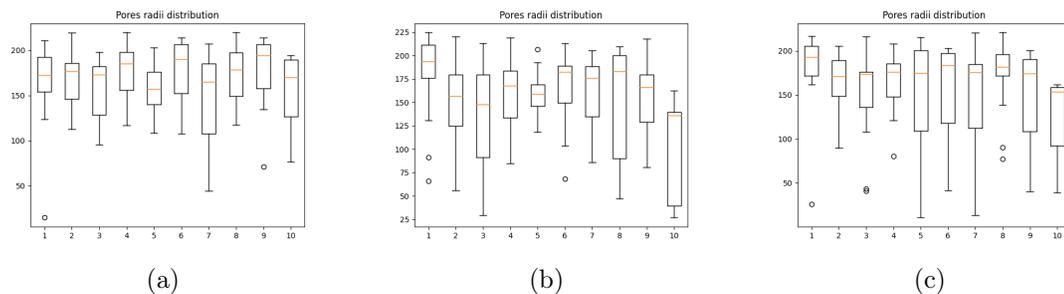


Figura B.1: Distribución tamaños de poro geometrías DEM con  $\delta = 4$  y 30% porosidad para (a) geometría dump34000, (b) geometría dump55000 y (c) geometría dump72500

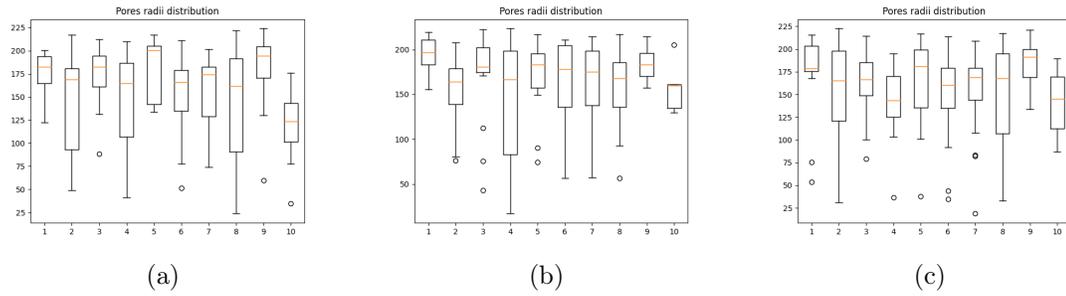


Figura B.2: Distribución tamaños de poro geometrías DEM con  $\delta = 4$  y 40% porosidad para (a) geometría dump42500, (b) geometría dump61000 y (c) geometría dump84000

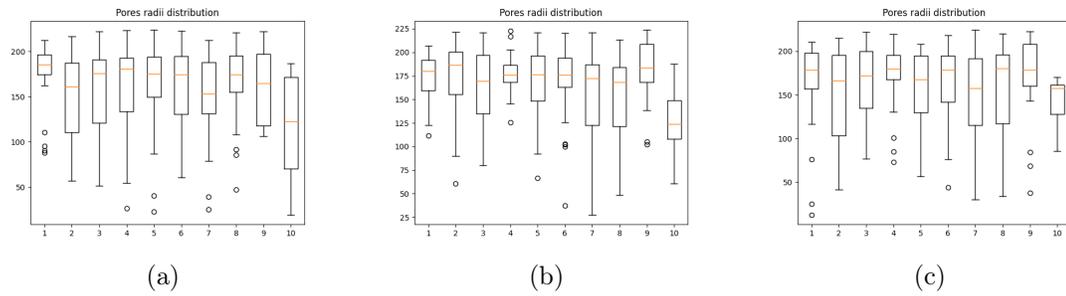


Figura B.3: Distribución tamaños de poro geometrías DEM con  $\delta = 4$  y 50% porosidad para (a) geometría dump22500, (b) geometría dump50000 y (c) geometría dump73500

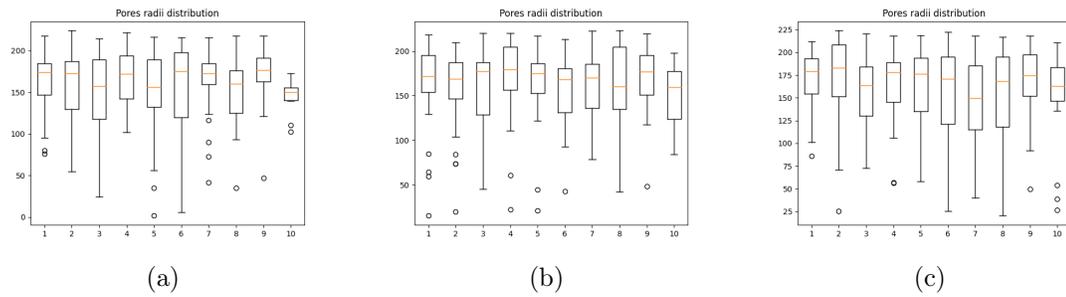


Figura B.4: Distribución tamaños de poro geometrías DEM con  $\delta = 4$  y 60% porosidad para (a) geometría dump56000, (b) geometría dump78500 y (c) geometría dump97500

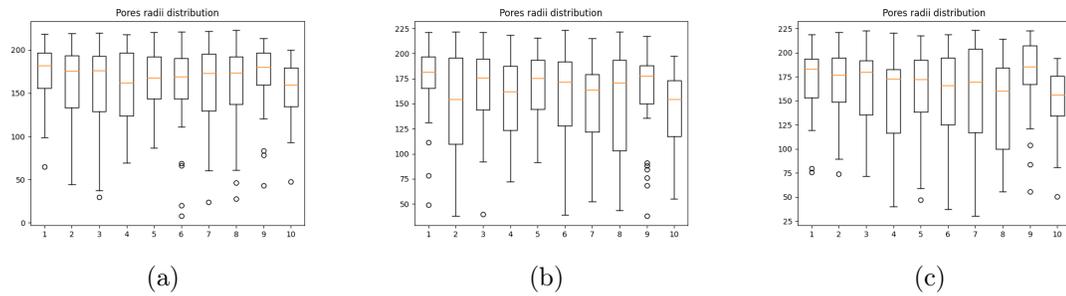


Figura B.5: Distribución tamaños de poro geometrías DEM con  $\delta = 4$  y 70% porosidad para (a) geometría dump33000, (b) geometría dump64500 y (c) geometría dump95000

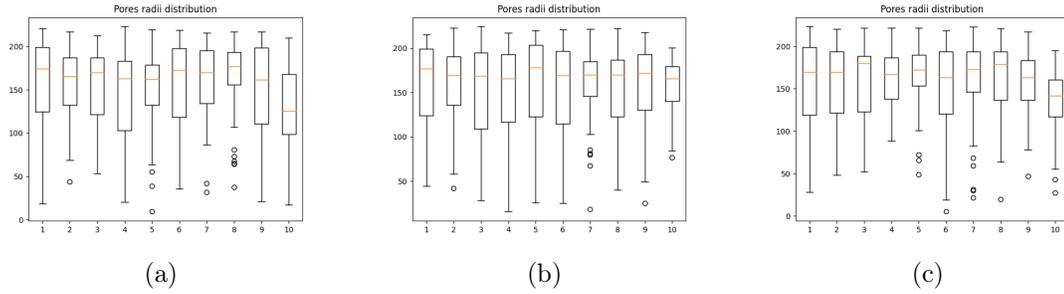


Figura B.6: Distribución tamaños de poro geometrías DEM con  $\delta = 8$  y 30% porosidad para (a) geometría dump57500, (b) geometría dump82000 y (c) geometría dump94000

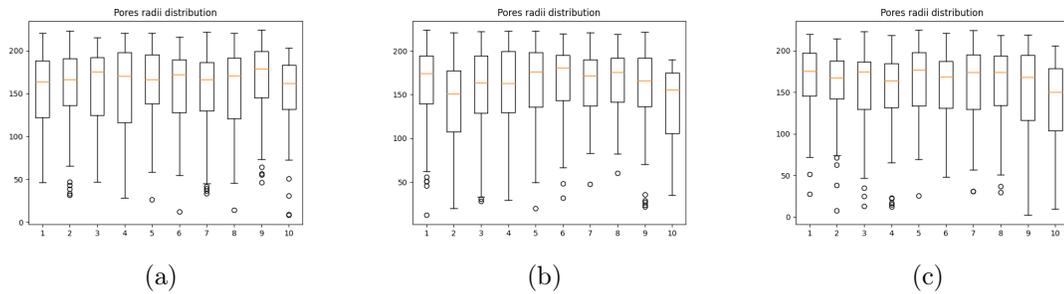


Figura B.7: Distribución tamaños de poro geometrías DEM con  $\delta = 4$  y 40% porosidad para (a) geometría dump42000, (b) geometría dump65000 y (c) geometría dump80500

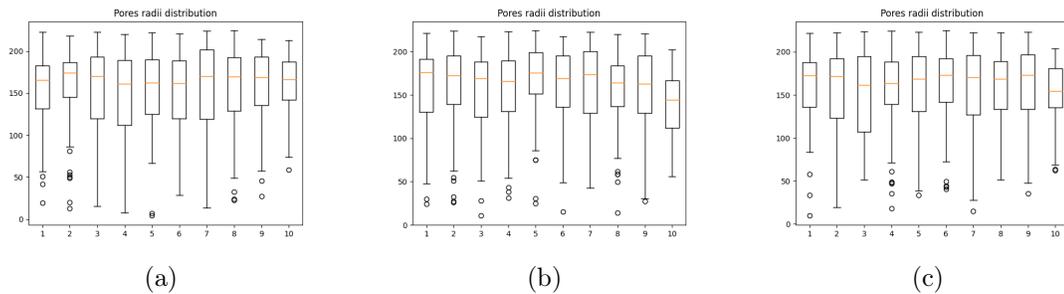


Figura B.8: Distribución tamaños de poro geometrías DEM con  $\delta = 8$  y 50% porosidad para (a) geometría dump53500, (b) geometría dump73000 y (c) geometría dump94000

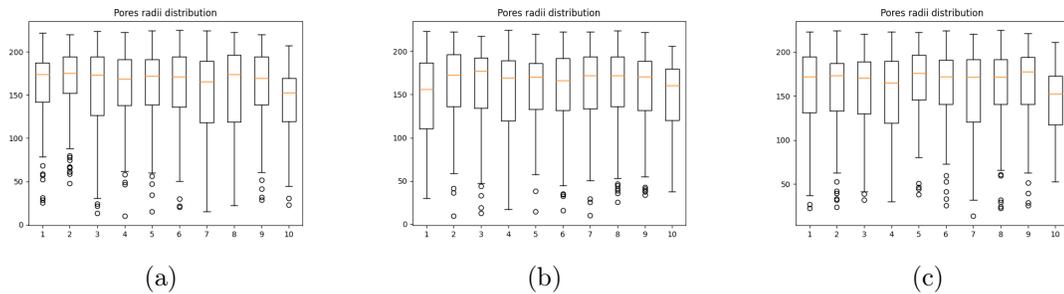


Figura B.9: Distribución tamaños de poro geometrías DEM con  $\delta = 8$  y 60% porosidad para (a) geometría dump44500, (b) geometría dump60000 y (c) geometría dump73000

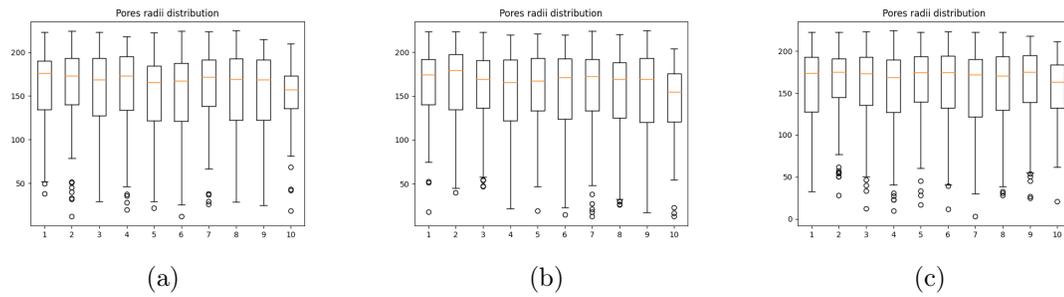


Figura B.10: Distribución tamaños de poro geometrías DEM con  $\delta = 8$  y 70% porosidad para (a) geometría dump49000, (b) geometría dump66500 y (c) geometría dump81500

## B.2. Distribución de tamaño de interconexión bidimensional

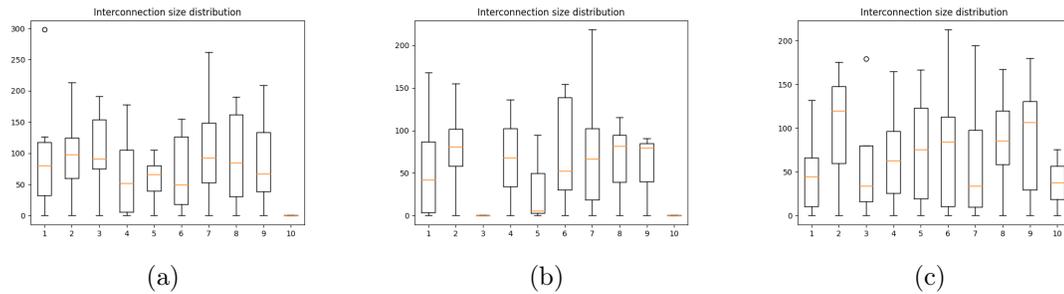


Figura B.11: Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con  $\delta = 4$  y 30% porosidad para (a) geometría dump34000, (b) geometría dump55000 y (c) geometría dump72500

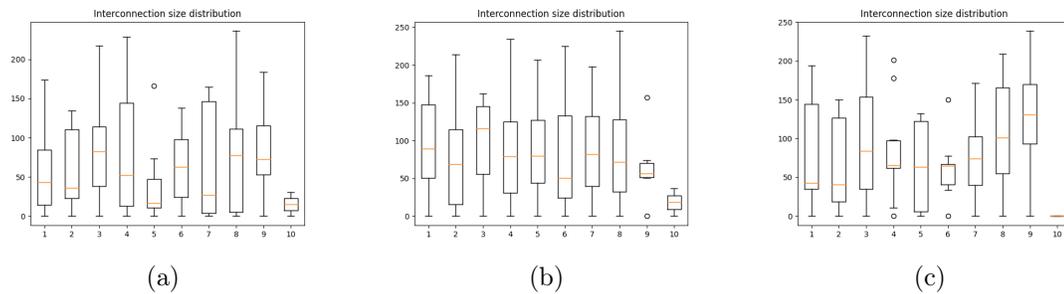


Figura B.12: Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con  $\delta = 4$  y 40% porosidad para (a) geometría dump42500, (b) geometría dump61000 y (c) geometría dump84000

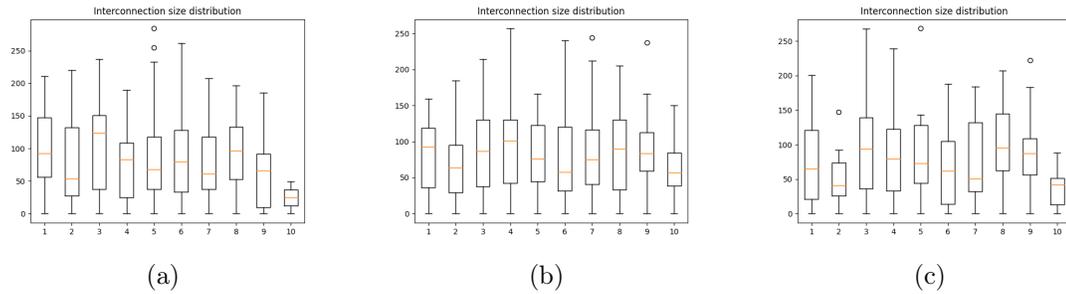


Figura B.13: Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con  $\delta = 4$  y 50 % porosidad para (a) geometría dump22500, (b) geometría dump50000 y (c) geometría dump73500

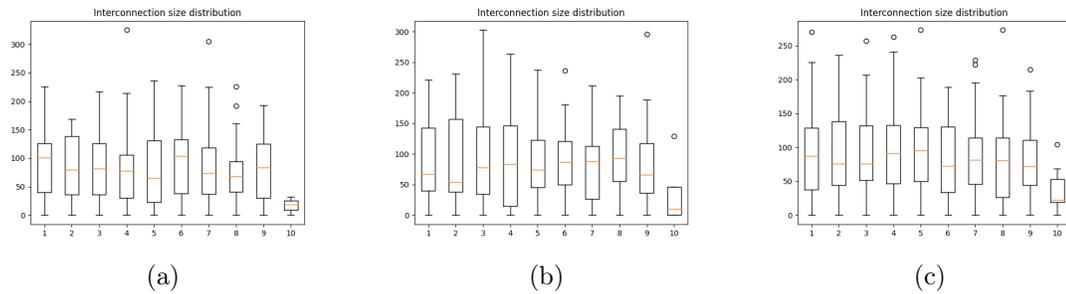


Figura B.14: Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con  $\delta = 4$  y 60 % porosidad para (a) geometría dump56000, (b) geometría dump78500 y (c) geometría dump97500

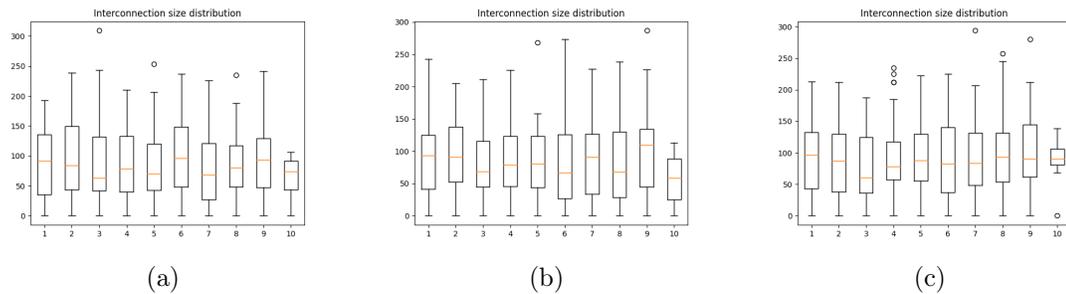


Figura B.15: Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con  $\delta = 4$  y 70 % porosidad para (a) geometría dump33000, (b) geometría dump64500 y (c) geometría dump95000

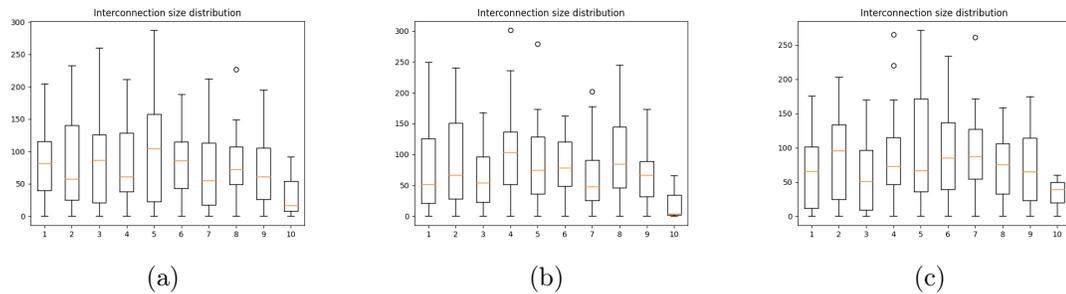


Figura B.16: Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con  $\delta = 8$  y 30 % porosidad para (a) geometría dump57500, (b) geometría dump82000 y (c) geometría dump94000

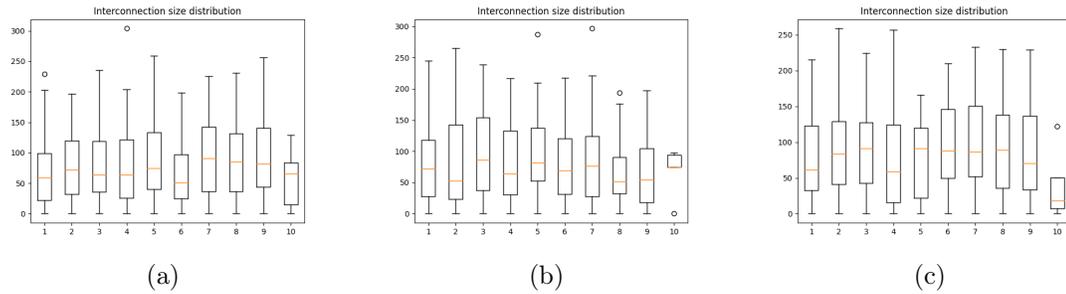


Figura B.17: Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con  $\delta = 8$  y 40 % porosidad para (a) geometría dump42000, (b) geometría dump65000 y (c) geometría dump80500

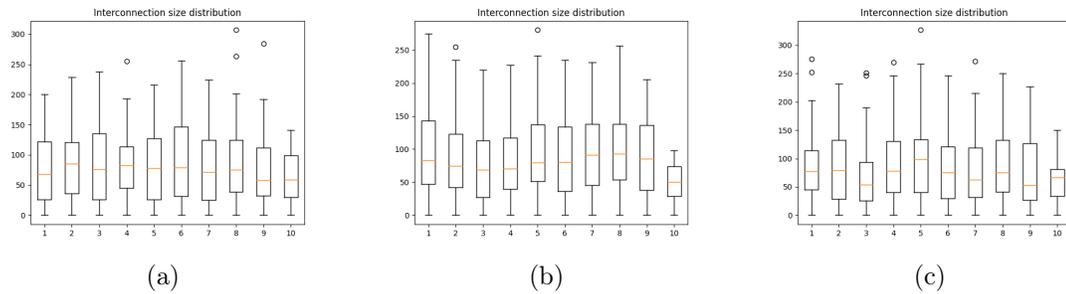


Figura B.18: Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con  $\delta = 8$  y 50 % porosidad para (a) geometría dump53500, (b) geometría dump73000 y (c) geometría dump94000

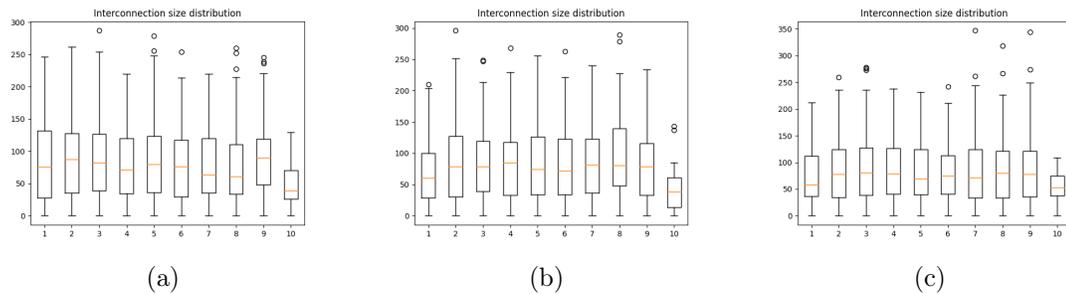


Figura B.19: Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con  $\delta = 8$  y 60 % porosidad para (a) geometría dump44500, (b) geometría dump60000 y (c) geometría dump73000

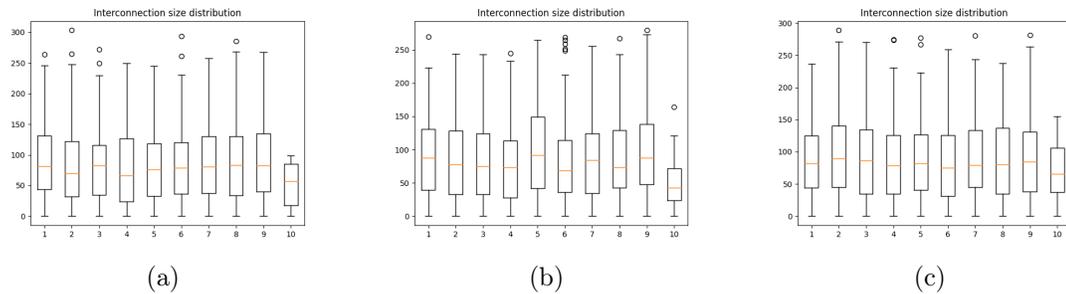


Figura B.20: Distribución tamaños de interconexión geometrías DEM con  $\delta = 8$  y 70 % porosidad para (a) geometría dump49000, (b) geometría dump66500 y (c) geometría dump81500

## Apéndice C

# Constantes Elásticas de Espumas de $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa

## C.1. Módulo de Young aparente

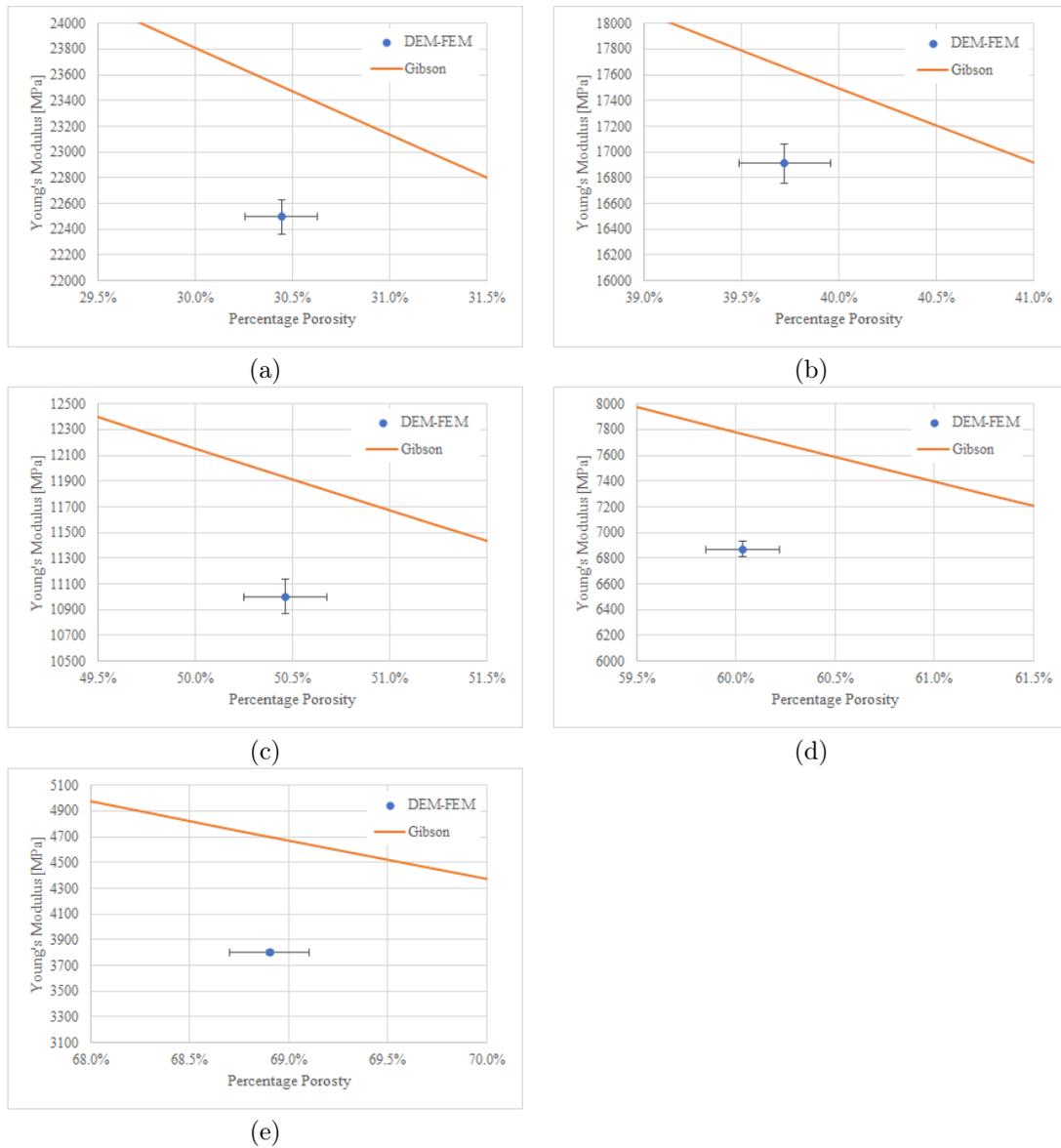


Figura C.1: Detalle de módulo de Young aparente para espumas de  $(\beta + \gamma)$ -TiNbTa con porosidad homogénea nominal de (a) 30 %, (b) 40 %, (c) 50 %, (d) 60 % y (e) 70 %

## Apéndice D

# Asignación aleatoria de geometrías para gradientes

Sección	Porosidad	Geometría gradiente									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Interior	30%	4	2	5	9	3	6	10	1	8	7
Media	40%	4	1	2	10	6	9	5	7	8	3
Exterior	50%	3	10	7	6	8	4	5	9	2	1

Tabla D.1: Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes radial ascendentes con porosidad baja

Sección	Porosidad	Geometría gradiente									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Interior	50%	6	4	8	10	5	3	9	2	7	1
Media	60%	4	7	1	2	9	3	8	5	6	10
Exterior	70%	5	3	10	4	1	7	2	9	6	8

Tabla D.2: Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes radial ascendentes con porosidad alta

Sección	Porosidad	Geometría gradiente									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Interior	50%	2	7	5	1	10	6	8	4	9	3
Media	40%	8	9	7	10	6	4	3	5	2	1
Exterior	30%	4	3	8	6	7	5	1	9	2	10

Tabla D.3: Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes radial descendentes con porosidad baja

Sección	Porosidad	Geometría gradiente									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Interior	70%	8	5	4	1	9	3	2	10	6	7
Media	60%	7	4	10	6	3	1	5	8	9	2
Exterior	50%	10	9	4	3	5	7	6	8	2	1

Tabla D.4: Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes radial descendentes con porosidad alta

Sección	Porosidad	Geometría gradiente									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Superior	50%	4	10	5	3	2	9	7	6	8	1
Centro	40%	8	2	3	1	4	9	6	10	5	7
Inferior	30%	5	9	4	10	7	1	2	6	8	3

Tabla D.5: Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes axial ascendentes con porosidad alta

Sección	Porosidad	Geometría gradiente									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Superior	70%	5	1	4	7	8	6	9	2	3	10
Central	60%	8	2	6	4	5	7	3	10	1	9
Inferior	50%	3	9	5	1	10	8	7	4	6	2

Tabla D.6: Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes axial ascendentes con porosidad alta

Sección	Porosidad	Geometría gradiente									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Superior	30%	8	7	6	3	2	10	1	4	9	5
Centra	40%	4	2	3	6	1	5	7	9	10	8
Inferior	50%	10	2	1	9	3	7	4	5	8	6

Tabla D.7: Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes axial descendentes con porosidad alta

Sección	Porosidad	Geometría gradiente									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Superior	50%	3	9	4	6	2	8	7	10	5	1
Central	60%	4	6	9	2	10	5	3	1	7	8
Inferior	70%	10	7	8	4	5	9	1	6	2	3

Tabla D.8: Asignación aleatoria de geometrías para geometrías gradientes axial descendentes con porosidad alta

# Referencias

- [1] S. Weiner y H. Wagner, “Current topics—the material bone: Structure–mechanical function relations,” *Annual Review of Materials Science*, vol. 28, pp. 271–298, 1998.
- [2] M. J. Olszta, X. Cheng, S. S. Jee, R. Kumar, Y.-Y. Kim, M. J. Kaufman, E. P. Douglas, y L. B. Gower, “Bone structure and formation: A new perspective,” *Materials Science and Engineering: R: Reports*, vol. 58, no. 3-5, pp. 77–116, nov 2007. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.mser.2007.05.001>
- [3] J. A. Riancho y J. Delgado-Calle, “Mecanismos de interacción osteoblasto-osteoclasto,” *Reumatología Clínica*, vol. 7, pp. 1–4, sep 2011. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.reuma.2011.03.003>
- [4] G. Y. Rochefort, S. Pallu, y C. L. Benhamou, “Osteocyte: the unrecognized side of bone tissue,” *Osteoporosis International*, vol. 21, no. 9, pp. 1457–1469, mar 2010. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s00198-010-1194-5>
- [5] C. T. Rubin, “Skeletal strain and the functional significance of bone architecture,” *Calcified Tissue International*, vol. 36, no. S1, pp. S11–S18, mar 1984. Disponible: <https://doi.org/10.1007/bf02406128>
- [6] C. H. Turner, M. R. Forwood, y M. W. Otter, “Mechanotransduction in bone: do bone cells act as sensors of fluid flow?” *The FASEB Journal*, vol. 8, no. 11, pp. 875–878, aug 1994. Disponible: <https://doi.org/10.1096/fasebj.8.11.8070637>
- [7] M. M. Hurley y J. A. Lorenzo, “Systemic and local regulators of bone remodeling,” in *Bone Formation*. Springer London, 2004, pp. 44–70. Disponible: [https://doi.org/10.1007/978-1-4471-3777-1\\_3](https://doi.org/10.1007/978-1-4471-3777-1_3)
- [8] W. Jee, “Integrated bone tissue physiology: Anatomy and physiology,” in *Bone Mechanics Handbook*. CRC Press, mar 2001, pp. 17–84. Disponible: <https://doi.org/10.1201/b14263-5>

- [9] G. Montoya-Sanhueza, N. C. Bennett, M. K. Oosthuizen, C. M. Dengler-Crish, y A. Chinsamy, “Bone remodeling in the longest living rodent, the naked mole-rat: Interelement variation and the effects of reproduction,” *Journal of Anatomy*, feb 2021. Disponible: <https://doi.org/10.1111/joa.13404>
- [10] D. T. REILLY y A. H. BURSTEIN, “The mechanical properties of cortical bone,” *The Journal of Bone & Joint Surgery*, vol. 56, no. 5, pp. 1001–1022, jul 1974. Disponible: <https://doi.org/10.2106/00004623-197456050-00012>
- [11] R. Rieger, J. Auregan, y T. Hoc, “Micro-finite-element method to assess elastic properties of trabecular bone at micro- and macroscopic level,” *Morphologie*, vol. 102, no. 336, pp. 12–20, mar 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.morpho.2017.07.175>
- [12] X. Guo, “Mechanical properties of cortical bone and cancellous bone tissue,” in *Bone Mechanics Handbook*. CRC Press, mar 2001, pp. 311–334. Disponible: <https://doi.org/10.1201/b14263-16>
- [13] D. F. Williams, “On the nature of biomaterials,” *Biomaterials*, vol. 30, no. 30, pp. 5897–5909, oct 2009. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2009.07.027>
- [14] J. Park y R. Lakes, *Biomaterials: An Introduction*. Springer New York, 2007. Disponible: [https://books.google.cl/books?id=bb68wb0R\\_EAC](https://books.google.cl/books?id=bb68wb0R_EAC)
- [15] J. Biswas y B. Datta, “Biomaterials: An introduction to materials for biomedical applications,” in *Materials Horizons: From Nature to Nanomaterials*. Springer Singapore, oct 2020, pp. 43–53. Disponible: [https://doi.org/10.1007/978-981-15-8307-0\\_2](https://doi.org/10.1007/978-981-15-8307-0_2)
- [16] J. Chevalier y L. Gremillard, “Ceramics for medical applications: A picture for the next 20 years,” *Journal of the European Ceramic Society*, vol. 29, no. 7, pp. 1245–1255, apr 2009. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2008.08.025>
- [17] M. Prakasam, J. Locs, K. Salma-Ancane, D. Loca, A. Largeteau, y L. Berzina-Cimdina, “Fabrication, properties and applications of dense hydroxyapatite: A review,” *Journal of Functional Biomaterials*, vol. 6, no. 4, pp. 1099–1140, dec 2015. Disponible: <https://doi.org/10.3390/jfb6041099>
- [18] M. Nabyouni, T. Brückner, H. Zhou, U. Gbureck, y S. B. Bhaduri, “Magnesium-based bioceramics in orthopedic applications,” *Acta Biomaterialia*, vol. 66, pp. 23–43, jan 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2017.11.033>
- [19] P. Fratzl, “Mechanical design of biomineralized tissues. bone and other hierarchical materials,” in *Biomineralization*. John Wiley & Sons, Ltd, jun 2010, pp. 547–575. Disponible: <https://doi.org/10.1002/9780470986325.ch16>

- [20] N. R. Patel y P. P. Gohil, "A review on biomaterials: scope, applications & human anatomy significance," *International Journal of Emerging Technology and Advanced Engineering*, vol. 2, no. 4, pp. 91–101, 2012.
- [21] S. V. Dorozhkin, *Calcium Orthophosphate-Based Bioceramics and Biocomposites*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, may 2016. Disponible: <https://doi.org/10.1002/9783527699315>
- [22] M. Niinomi, "Recent metallic materials for biomedical applications," *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 33, no. 3, pp. 477–486, mar 2002. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s11661-002-0109-2>
- [23] K. Prasad, O. Bazaka, M. Chua, M. Rochford, L. Fedrick, J. Spoor, R. Symes, M. Tieppo, C. Collins, A. Cao, D. Markwell, K. K. Ostrikov, y K. Bazaka, "Metallic biomaterials: Current challenges and opportunities," *Materials*, vol. 10, no. 8, p. 884, jul 2017. Disponible: <https://doi.org/10.3390/ma10080884>
- [24] I. Vroman y L. Tighzert, "Biodegradable polymers," *Materials*, vol. 2, no. 2, pp. 307–344, apr 2009. Disponible: <https://doi.org/10.3390/ma2020307>
- [25] U. Sampath, Y. Ching, C. Chuah, J. Sabariah, y P.-C. Lin, "Fabrication of porous materials from natural/synthetic biopolymers and their composites," *Materials*, vol. 9, no. 12, p. 991, dec 2016. Disponible: <https://doi.org/10.3390/ma9120991>
- [26] D. F. Williams, "On the mechanisms of biocompatibility," *Biomaterials*, vol. 29, no. 20, pp. 2941–2953, jul 2008. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2008.04.023>
- [27] D. Williams, "A model for biocompatibility and its evaluation," *Journal of Biomedical Engineering*, vol. 11, no. 3, pp. 185–191, may 1989. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0141-5425\(89\)90138-6](https://doi.org/10.1016/0141-5425(89)90138-6)
- [28] J. Black, *Biological Performance of Materials : Fundamentals of Biocompatibility*, 4th ed. CRC Press, 2006.
- [29] L. Ghasemi-Mobarakeh, D. Kolahreez, S. Ramakrishna, y D. Williams, "Key terminology in biomaterials and biocompatibility," *Current Opinion in Biomedical Engineering*, vol. 10, pp. 45–50, 2019.
- [30] S. C. Cowin y M. L. Moss, "MECHANOSENSORY MECHANISMS IN BONE," in *Principles of Tissue Engineering*. Elsevier, 2000, pp. 723–737. Disponible: <https://doi.org/10.1016/b978-012436630-5/50055-6>
- [31] H. Uthoff y Z. Jaworski, "Bone loss in response to long-term immobilisation," *The Journal of Bone and Joint Surgery. British volume*, vol. 60-B, no. 3, pp. 420–429, aug 1978. Disponible: <https://doi.org/10.1302/0301-620x.60b3.681422>

- [32] A. A. Al-Tamimi, P. R. A. Fernandes, C. Peach, G. Cooper, C. Diver, y P. J. Bartolo, "Metallic bone fixation implants: a novel design approach for reducing the stress shielding phenomenon," *Virtual and Physical Prototyping*, vol. 12, no. 2, pp. 141–151, apr 2017. Disponible: <https://doi.org/10.1080/17452759.2017.1307769>
- [33] R. M. Pilliar, H. U. Cameron, A. G. Binnington, J. Szivek, y I. Macnab, "Bone ingrowth and stress shielding with a porous surface coated fracture fixation plate," *Journal of Biomedical Materials Research*, vol. 13, no. 5, pp. 799–810, sep 1979. Disponible: <https://doi.org/10.1002/jbm.820130510>
- [34] H. Ibrahim, S. N. Esfahani, B. Poorganji, D. Dean, y M. Elahinia, "Resorbable bone fixation alloys, forming, and post-fabrication treatments," *Materials Science and Engineering: C*, vol. 70, pp. 870–888, jan 2017. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.msec.2016.09.069>
- [35] J. Nagels, M. Stokdijk, y P. M. Rozing, "Stress shielding and bone resorption in shoulder arthroplasty," *Journal of Shoulder and Elbow Surgery*, vol. 12, no. 1, pp. 35–39, jan 2003. Disponible: <https://doi.org/10.1067/mse.2003.22>
- [36] F. E. Wiria, J. Y. M. Shyan, P. N. Lim, F. G. C. Wen, J. F. Yeo, y T. Cao, "Printing of titanium implant prototype," *Materials & Design*, vol. 31, pp. S101–S105, jun 2010. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2009.12.050>
- [37] L. J. Gibson, "Cellular solids," *MRS Bulletin*, vol. 28, no. 4, pp. 270–274, apr 2003. Disponible: <https://doi.org/10.1557/mrs2003.79>
- [38] G. J. Davies y S. Zhen, "Metallic foams: their production, properties and applications," *Journal of Materials Science*, vol. 18, no. 7, pp. 1899–1911, jul 1983. Disponible: <https://doi.org/10.1007/bf00554981>
- [39] R. Goodall y A. Mortensen, "Porous metals," in *Physical Metallurgy*. Elsevier, 2014, pp. 2399–2595. Disponible: <https://doi.org/10.1016/b978-0-444-53770-6.00024-1>
- [40] G. Savio, S. Rosso, R. Meneghello, y G. Concheri, "Geometric modeling of cellular materials for additive manufacturing in biomedical field: A review," *Applied Bionics and Biomechanics*, vol. 2018, pp. 1–14, 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1155/2018/1654782>
- [41] D. T. Queheillalt, D. J. Sypeck, y H. N. Wadley, "Ultrasonic characterization of cellular metal structures," *Materials Science and Engineering: A*, vol. 323, no. 1-2, pp. 138–147, jan 2002. Disponible: [https://doi.org/10.1016/s0921-5093\(01\)01357-0](https://doi.org/10.1016/s0921-5093(01)01357-0)
- [42] M. De Meller, "Produit métallique pour l'obtention d'objets laminés, moulés ou autres, et procédés pour sa fabrication," *French Patent*, vol. 615, no. 147, p. 1926, 1925.

- [43] B. Sosnick, "Process for making foamlike mass of metal," *USA Patent*, vol. 2, p. 1948, 1943.
- [44] J. J. A. Ridgway, "Cellarized metal and method of producing same," *Ene. 10* 1967, uS Patent 3,297,431.
- [45] A. Kulshreshtha y S. Dhakad, "Preparation of metal foam by different methods: A review," *Materials Today: Proceedings*, vol. 26, pp. 1784–1790, 2020. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.02.375>
- [46] L.-P. Lefebvre, J. Banhart, y D. Dunand, "Porous metals and metallic foams: Current status and recent developments," *Advanced Engineering Materials*, vol. 10, no. 9, pp. 775–787, sep 2008. Disponible: <https://doi.org/10.1002/adem.200800241>
- [47] D. C. Dunand, "Processing of titanium foams," *Advanced Engineering Materials*, vol. 6, no. 6, pp. 369–376, jun 2004. Disponible: <https://doi.org/10.1002/adem.200405576>
- [48] S. Lascano, C. Arévalo, I. Montealegre-Melendez, S. Muñoz, J. Rodriguez-Ortiz, P. Trueba, y Y. Torres, "Porous titanium for biomedical applications: Evaluation of the conventional powder metallurgy frontier and space-holder technique," *Applied Sciences*, vol. 9, no. 5, p. 982, mar 2019. Disponible: <https://doi.org/10.3390/app9050982>
- [49] J. Parthasarathy, B. Starly, S. Raman, y A. Christensen, "Mechanical evaluation of porous titanium (ti6al4v) structures with electron beam melting (EBM)," *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, vol. 3, no. 3, pp. 249–259, apr 2010. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2009.10.006>
- [50] T. Bormann, R. Schumacher, B. Müller, M. Mertmann, y M. de Wild, "Tailoring selective laser melting process parameters for NiTi implants," *Journal of Materials Engineering and Performance*, vol. 21, no. 12, pp. 2519–2524, jul 2012. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s11665-012-0318-9>
- [51] V. J. Challis, X. Xu, L. C. Zhang, A. P. Roberts, J. F. Grotowski, y T. B. Sercombe, "High specific strength and stiffness structures produced using selective laser melting," *Materials & Design*, vol. 63, pp. 783–788, nov 2014. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2014.05.064>
- [52] L. Mullen, R. C. Stamp, W. K. Brooks, E. Jones, y C. J. Sutcliffe, "Selective laser melting: A regular unit cell approach for the manufacture of porous, titanium, bone in-growth constructs, suitable for orthopedic applications," *Journal of Biomedical Materials Research Part B: Applied Biomaterials*, vol. 89B, no. 2, pp. 325–334, oct 2008. Disponible: <https://doi.org/10.1002%2Fjbm.b.31219>

- [53] A. Ataee, Y. Li, M. Brandt, y C. Wen, “Ultrahigh-strength titanium gyroid scaffolds manufactured by selective laser melting (SLM) for bone implant applications,” *Acta Materialia*, vol. 158, pp. 354–368, oct 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.08.005>
- [54] Y. Li, Y. Ding, K. Munir, J. Lin, M. Brandt, A. Atrens, Y. Xiao, J. R. Kanwar, y C. Wen, “Novel  $\beta$ -ti35zr28nb alloy scaffolds manufactured using selective laser melting for bone implant applications,” *Acta Biomaterialia*, vol. 87, pp. 273–284, mar 2019. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2019.01.051>
- [55] Y. Lu, W. Zhao, Z. Cui, H. Zhu, y C. Wu, “The anisotropic elastic behavior of the widely-used triply-periodic minimal surface based scaffolds,” *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, vol. 99, pp. 56–65, nov 2019. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2019.07.012>
- [56] J. Banhart, “Manufacture, characterisation and application of cellular metals and metal foams,” *Progress in Materials Science*, vol. 46, no. 6, pp. 559–632, jan 2001. Disponible: [https://doi.org/10.1016/s0079-6425\(00\)00002-5](https://doi.org/10.1016/s0079-6425(00)00002-5)
- [57] R. Singh, P. D. Lee, R. J. Dashwood, y T. C. Lindley, “Titanium foams for biomedical applications: a review,” *Materials Technology*, vol. 25, no. 3-4, pp. 127–136, Sep. 2010. Disponible: <https://doi.org/10.1179/175355510x12744412709403>
- [58] B. Arifvianto y J. Zhou, “Fabrication of metallic biomedical scaffolds with the space holder method: A review,” *Materials*, vol. 7, no. 5, pp. 3588–3622, may 2014. Disponible: <https://doi.org/10.3390/ma7053588>
- [59] L. Stanev, M. Kolev, B. Drenchev, y L. Drenchev, “Open-cell metallic porous materials obtained through space holders—part i: Production methods. a review,” *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, vol. 139, no. 5, nov 2016. Disponible: <https://doi.org/10.1115/1.4034439>
- [60] M. M. Shbeh y R. Goodall, “Open celled porous titanium,” *Advanced Engineering Materials*, vol. 19, no. 11, p. 1600664, jan 2017. Disponible: <https://doi.org/10.1002/adem.201600664>
- [61] Y. Torres, P. Trueba, J. Pavón, I. Montealegre, y J. Rodríguez-Ortiz, “Designing, processing and characterisation of titanium cylinders with graded porosity: An alternative to stress-shielding solutions,” *Materials & Design*, vol. 63, pp. 316–324, Nov. 2014. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2014.06.012>
- [62] A. Rodríguez-Contreras, M. Punset, J. A. Calero, F. J. Gil, E. Ruperez, y J. M. Manero, “Powder metallurgy with space holder for porous titanium implants: A review,” *Journal of Materials Science & Technology*, vol. 76, pp. 129–149, jun 2021. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2020.11.005>

- [63] D. Mondal, H. Jain, S. Das, y A. Jha, "Stainless steel foams made through powder metallurgy route using  $\text{NH}_4\text{HCO}_3$  as space holder," *Materials & Design*, vol. 88, pp. 430–437, dec 2015. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2015.09.020>
- [64] C. Wen, M. Mabuchi, Y. Yamada, K. Shimojima, Y. Chino, y T. Asahina, "Processing of biocompatible porous ti and mg," *Scripta Materialia*, vol. 45, no. 10, pp. 1147–1153, nov 2001. Disponible: [https://doi.org/10.1016/S1359-6462\(01\)01132-0](https://doi.org/10.1016/S1359-6462(01)01132-0)
- [65] N. Jha, D. Mondal, J. D. Majumdar, A. Badkul, A. Jha, y A. Khare, "Highly porous open cell ti-foam using NaCl as temporary space holder through powder metallurgy route," *Materials & Design*, vol. 47, pp. 810–819, may 2013. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2013.01.005>
- [66] D. rong Tian, Y. hua Pang, L. Yu, y L. Sun, "Production and characterization of high porosity porous fe-cr-c alloys by the space holder leaching technique," *International Journal of Minerals, Metallurgy, and Materials*, vol. 23, no. 7, pp. 793–798, jul 2016. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s12613-016-1293-1>
- [67] R. W. Rice, "Fabrication of ceramics with designed porosity," in *Ceramic Engineering and Science Proceedings*. John Wiley & Sons, Inc., 2002, pp. 149–160. Disponible: <https://doi.org/10.1002/9780470294758.ch17>
- [68] I. N. Orbulov y A. Szlancsik, "On the mechanical properties of aluminum matrix syntactic foams," *Advanced Engineering Materials*, vol. 20, no. 5, p. 1700980, jan 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1002/adem.201700980>
- [69] E. Ryshkewitch, "Compression strength of porous sintered alumina and zirconia." *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 36, no. 2, pp. 65–68, Feb. 1953. Disponible: <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1953.tb12837.x>
- [70] W. Duckworth, "Discussion of ryshkewitch paper by winston duckworth," *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 36, no. 2, pp. 68–68, feb 1953. Disponible: <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1953.tb12838.x>
- [71] A. J. Moulson, "Reaction-bonded silicon nitride: its formation and properties," *Journal of Materials Science*, vol. 14, no. 5, pp. 1017–1051, may 1979. Disponible: <https://doi.org/10.1007/bf00561287>
- [72] K. K. Phani y S. K. Niyogi, "Elastic modulus-porosity relationship for  $\text{si}_3\text{n}_4$ ," *Journal of Materials Science Letters*, vol. 6, no. 5, pp. 511–515, may 1987. Disponible: <https://doi.org/10.1007/bf01739269>

- [73] A. Selçuk y A. Atkinson, “Elastic properties of ceramic oxides used in solid oxide fuel cells (SOFC),” *Journal of the European Ceramic Society*, vol. 17, no. 12, pp. 1523–1532, jan 1997. Disponible: [https://doi.org/10.1016/s0955-2219\(96\)00247-6](https://doi.org/10.1016/s0955-2219(96)00247-6)
- [74] F. P. KNUDSEN, “Effect of porosity on young’s modulus of alumina,” *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 45, no. 2, pp. 94–95, 1962. Disponible: <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1962.tb11089.x>
- [75] R. W. Rice, “The compressive strength of ceramics,” in *Ceramics in Severe Environments*. Springer US, 1971, pp. 195–229. Disponible: [https://doi.org/10.1007/978-1-4684-3141-4\\_14](https://doi.org/10.1007/978-1-4684-3141-4_14)
- [76] M. Radovic y E. Lara-Curzio, “Mechanical properties of tape cast nickel-based anode materials for solid oxide fuel cells before and after reduction in hydrogen,” *Acta Materialia*, vol. 52, no. 20, pp. 5747–5756, dec 2004. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2004.08.023>
- [77] K. Schiller, “Mechanical properties of non-metallic brittle materials,” *Wear*, vol. 2, no. 6, p. 501, oct 1959. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0043-1648\(59\)90258-3](https://doi.org/10.1016/0043-1648(59)90258-3)
- [78] —, “Strength of porous materials,” *Cement and Concrete Research*, vol. 1, no. 4, pp. 419–422, jul 1971. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0008-8846\(71\)90035-4](https://doi.org/10.1016/0008-8846(71)90035-4)
- [79] R. W. Rice, “Microstructure dependence of mechanical behavior of ceramics,” in *Properties and Microstructure*. Elsevier, 1977, pp. 199–381. Disponible: <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-341811-1.50010-8>
- [80] N. Ramakrishnan y V. S. Arunachalam, “Effective elastic moduli of porous solids,” *Journal of Materials Science*, vol. 25, no. 9, pp. 3930–3937, sep 1990. Disponible: <https://doi.org/10.1007/bf00582462>
- [81] —, “Effective elastic moduli of porous ceramic materials,” *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 76, no. 11, pp. 2745–2752, Nov. 1993. Disponible: <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1993.tb04011.x>
- [82] H. Nakajima, “Fabrication, properties and application of porous metals with directional pores,” *Progress in Materials Science*, vol. 52, no. 7, pp. 1091–1173, sep 2007. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2006.09.001>
- [83] J. Kováčik, “Correlation between shear modulus and porosity in porous materials,” *Journal of Materials Science Letters*, vol. 20, no. 21, pp. 1953–1955, 2001.
- [84] J. Kováčik, “Correlation between poisson’s ratio and porosity in porous materials,” *Journal of materials science*, vol. 41, no. 4, pp. 1247–1249, 2006. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s10853-005-4237-0>

- [85] J. Kováčik, “Correlation between elastic modulus, shear modulus, poisson’s ratio and porosity in porous materials,” *Advanced Engineering Materials*, vol. 10, no. 3, pp. 250–252, 2008. Disponible: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adem.200700266>
- [86] J. A. Choren, S. M. Heinrich, y M. B. Silver-Thorn, “Young’s modulus and volume porosity relationships for additive manufacturing applications,” *Journal of Materials Science*, vol. 48, no. 15, pp. 5103–5112, apr 2013. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s10853-013-7237-5>
- [87] L. J. Gibson y M. F. Ashby, *Cellular Solids*. Cambridge University Press, may 1997. Disponible: <https://doi.org/10.1017/cbo9781139878326>
- [88] L. J. Gibson, “Biomechanics of cellular solids,” *Journal of Biomechanics*, vol. 38, no. 3, pp. 377–399, Mar. 2005. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jbiomech.2004.09.027>
- [89] L. Stanev, M. Kolev, B. Drenchev, y L. Drenchev, “Open-cell metallic porous materials obtained through space holders—part II: Structure and properties. a review,” *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, vol. 139, no. 5, nov 2016. Disponible: <https://doi.org/10.1115/1.4034440>
- [90] H. Bramfeld, G. Sabra, V. Centis, y P. Vermette, “Scaffold vascularization: A challenge for three-dimensional tissue engineering,” *Current Medicinal Chemistry*, vol. 17, no. 33, pp. 3944–3967, nov 2010. Disponible: <https://doi.org/10.2174/092986710793205327>
- [91] E. Onal, J. Frith, M. Jurg, X. Wu, y A. Molotnikov, “Mechanical properties and in vitro behavior of additively manufactured and functionally graded ti6al4v porous scaffolds,” *Metals*, vol. 8, no. 4, p. 200, mar 2018. Disponible: <https://doi.org/10.3390/met8040200>
- [92] K. Alvarez y H. Nakajima, “Metallic scaffolds for bone regeneration,” *Materials*, vol. 2, no. 3, pp. 790–832, jul 2009. Disponible: <https://doi.org/10.3390/ma2030790>
- [93] A. Kumar, K. C. Nune, L. E. Murr, y R. D. K. Misra, “Biocompatibility and mechanical behaviour of three-dimensional scaffolds for biomedical devices: process–structure–property paradigm,” *International Materials Reviews*, vol. 61, no. 1, pp. 20–45, jan 2016. Disponible: <https://doi.org/10.1080/09506608.2015.1128310>
- [94] J. Rouwkema, N. C. Rivron, y C. A. van Blitterswijk, “Vascularization in tissue engineering,” *Trends in Biotechnology*, vol. 26, no. 8, pp. 434–441, aug 2008. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.tibtech.2008.04.009>
- [95] D. D. Majumdar, V. Kumar, A. Roychowdhury, D. Mondal, M. Ghosh, y S. Nandi, “In vivo analysis of bone-tissue interface in medical grade titanium and porous titanium with and without cenosphere as space holder,” *Materialia*, vol. 9, p. 100623, mar 2020. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.mtla.2020.100623>

- [96] N. Taniguchi, S. Fujibayashi, M. Takemoto, K. Sasaki, B. Otsuki, T. Nakamura, T. Matsushita, T. Kokubo, y S. Matsuda, “Effect of pore size on bone ingrowth into porous titanium implants fabricated by additive manufacturing: An in vivo experiment,” *Materials Science and Engineering: C*, vol. 59, pp. 690–701, Feb. 2016. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.msec.2015.10.069>
- [97] C. Torres-Sanchez, F. A. Mushref, M. Norrito, K. Yendall, Y. Liu, y P. Conway, “The effect of pore size and porosity on mechanical properties and biological response of porous titanium scaffolds,” *Materials Science and Engineering: C*, vol. 77, pp. 219–228, Ago. 2017. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.msec.2017.03.249>
- [98] C. Torres-Sanchez, J. McLaughlin, y A. Fotticchia, “Porosity and pore size effect on the properties of sintered ti35nb4sn alloy scaffolds and their suitability for tissue engineering applications,” *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 731, pp. 189–199, Ene. 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.10.026>
- [99] Q. Ran, W. Yang, Y. Hu, X. Shen, Y. Yu, Y. Xiang, y K. Cai, “Osteogenesis of 3d printed porous ti6al4v implants with different pore sizes,” *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, vol. 84, pp. 1–11, Ago. 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2018.04.010>
- [100] Y. Chen, J. E. Frith, A. Dehghan-Manshadi, H. Attar, D. Kent, N. D. M. Soro, M. J. Birmingham, y M. S. Dargusch, “Mechanical properties and biocompatibility of porous titanium scaffolds for bone tissue engineering,” *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, vol. 75, pp. 169–174, nov 2017. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2017.07.015>
- [101] J. Lu, B. Flautre, K. Anselme, P. Hardouin, A. Gallur, M. Descamps, y B. Thierry, “Role of interconnections in porous bioceramics on bone recolonization in vitro and in vivo,” *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, vol. 10, no. 2, pp. 111–120, 1999. Disponible: <https://doi.org/10.1023/A:1008973120918>
- [102] M. Kaur y K. Singh, “Review on titanium and titanium based alloys as biomaterials for orthopaedic applications,” *Materials Science and Engineering: C*, vol. 102, pp. 844–862, Sep. 2019. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.msec.2019.04.064>
- [103] F. Guillemot, “Recent advances in the design of titanium alloys for orthopedic applications,” *Expert Review of Medical Devices*, vol. 2, no. 6, pp. 741–748, nov 2005. Disponible: <https://doi.org/10.1586/17434440.2.6.741>
- [104] I. Weiss y S. Semiatin, “Thermomechanical processing of alpha titanium alloys—an overview,” *Materials Science and Engineering: A*, vol. 263, no. 2, pp. 243–256, may 1999. Disponible: [https://doi.org/10.1016/s0921-5093\(98\)01155-1](https://doi.org/10.1016/s0921-5093(98)01155-1)

- [105] J.-H. Shim, C.-S. Oh, y D. N. Lee, "A thermodynamic evaluation of the ti-mo-c system," *Metallurgical and Materials Transactions B*, vol. 27, no. 6, pp. 955–966, Dic. 1996. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s11663-996-0009-8>
- [106] M. Peters, J. Hemptenmacher, J. Kumpfert, y C. Leyens, *Structure and Properties of Titanium and Titanium Alloys*. John Wiley & Sons, Ltd, 2003, ch. 1, pp. 1–36. Disponible: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/3527602119.ch1>
- [107] G. Terlinde y G. Fischer, *Beta Titanium Alloys*. John Wiley & Sons, Ltd, 2003, ch. 2, pp. 37–57. Disponible: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/3527602119.ch2>
- [108] L. Kunčická, R. Kocich, y T. C. Lowe, "Advances in metals and alloys for joint replacement," *Progress in Materials Science*, vol. 88, pp. 232–280, jul 2017. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2017.04.002>
- [109] C. Marker, S.-L. Shang, J.-C. Zhao, y Z.-K. Liu, "Thermodynamic description of the ti-mo-nb-ta-zr system and its implications for phase stability of ti bio-implant materials," *Calphad*, vol. 61, pp. 72–84, jun 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2018.02.004>
- [110] P. J. Bania, "Beta titanium alloys and their role in the titanium industry," *JOM*, vol. 46, no. 7, pp. 16–19, jul 1994. Disponible: <https://doi.org/10.1007/bf03220742>
- [111] R. Kolli y A. Devaraj, "A review of metastable beta titanium alloys," *Metals*, vol. 8, no. 7, p. 506, jun 2018. Disponible: <https://doi.org/10.3390/met8070506>
- [112] C. J. Burstone y A. Goldberg, "Beta titanium: A new orthodontic alloy," *American Journal of Orthodontics*, vol. 77, no. 2, pp. 121–132, feb 1980. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0002-9416\(80\)90001-9](https://doi.org/10.1016/0002-9416(80)90001-9)
- [113] Z. Liu y G. Welsch, "Effects of oxygen and heat treatment on the mechanical properties of alpha and beta titanium alloys," *Metallurgical Transactions A*, vol. 19, no. 3, pp. 527–542, mar 1988. Disponible: <https://doi.org/10.1007/bf02649267>
- [114] N. Clément, A. Lenain, y P. J. Jacques, "Mechanical property optimization via microstructural control of new metastable beta titanium alloys," *JOM*, vol. 59, no. 1, pp. 50–53, jan 2007. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s11837-007-0010-y>
- [115] M. P. Walker, D. Ries, K. Kula, M. Ellis, y B. Fricke, "Mechanical properties and surface characterization of beta titanium and stainless steel orthodontic wire following topical fluoride treatment," *The Angle Orthodontist*, vol. 77, no. 2, pp. 342–348, 2007. Disponible: [https://doi.org/10.2319/0003-3219\(2007\)077\[0342:MPASCO\]2.0.CO;2](https://doi.org/10.2319/0003-3219(2007)077[0342:MPASCO]2.0.CO;2)

- [116] Y. L. Hao, R. Yang, M. Niinomi, D. Kuroda, Y. L. Zhou, K. Fukunaga, y A. Suzuki, “Young’s modulus and mechanical properties of ti-29nb-13ta-4.6zr in relation to  $\alpha''$  martensite,” *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 33, no. 10, pp. 3137–3144, oct 2002. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s11661-002-0299-7>
- [117] N. Sakaguchi, M. Niinomi, T. Akahori, J. Takeda, y H. Toda, “Relationships between tensile deformation behavior and microstructure in ti-nb-ta-zr system alloys,” *Materials Science and Engineering: C*, vol. 25, no. 3, pp. 363–369, may 2005. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.msec.2004.12.014>
- [118] M. Niinomi, T. Akahori, S. Katsura, K. Yamauchi, y M. Ogawa, “Mechanical characteristics and microstructure of drawn wire of ti-29nb-13ta-4.6zr for biomedical applications,” *Materials Science and Engineering: C*, vol. 27, no. 1, pp. 154–161, jan 2007. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.msec.2006.04.008>
- [119] S. Acharya, A. G. Panicker, D. V. Laxmi, S. Suwas, y K. Chatterjee, “Study of the influence of zr on the mechanical properties and functional response of ti-nb-ta-zr-o alloy for orthopedic applications,” *Materials & Design*, vol. 164, p. 107555, feb 2019. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2018.107555>
- [120] M. Abdel-Hady, K. Hinoshita, y M. Morinaga, “General approach to phase stability and elastic properties of  $\beta$ -type ti-alloys using electronic parameters,” *Scripta Materialia*, vol. 55, no. 5, pp. 477–480, sep 2006. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2006.04.022>
- [121] T. Saito, T. Furuta, J.-H. Hwang, S. Kuramoto, K. Nishino, N. Suzuki, R. Chen, A. Yamada, K. Ito, Y. Seno, T. Nonaka, H. Ikehata, N. Nagasako, C. Iwamoto, Y. Ikuhara, y T. Sakuma, “Multifunctional alloys obtained via a dislocation-free plastic deformation mechanism,” *Science*, vol. 300, no. 5618, pp. 464–467, apr 2003. Disponible: <https://doi.org/10.1126/science.1081957>
- [122] J. S. Benjamin, “Mechanical alloying,” *Scientific American*, vol. 234, no. 5, pp. 40–49, may 1976. Disponible: <https://doi.org/10.1038/scientificamerican0576-40>
- [123] C. Suryanarayana, E. Ivanov, y V. Boldyrev, “The science and technology of mechanical alloying,” *Materials Science and Engineering: A*, vol. 304-306, pp. 151–158, May 2001. Disponible: [https://doi.org/10.1016/s0921-5093\(00\)01465-9](https://doi.org/10.1016/s0921-5093(00)01465-9)
- [124] P. W. L. Asm International Handbook Committee, *ASM Handbook: Volume 7: Powder Metal Technologies and Applications (Asm Handbook) (Asm Handbook) (Asm Handbook)*, 2nd ed., ser. Asm Handbook Asm Handbook Asm Handbook. ASM International, 1998.

- [125] C. Suryanarayana, "Mechanical alloying and milling," *Progress in Materials Science*, vol. 46, no. 1-2, pp. 1–184, Ene. 2001. Disponible: [https://doi.org/10.1016/s0079-6425\(99\)00010-9](https://doi.org/10.1016/s0079-6425(99)00010-9)
- [126] E. Chicardi, C. Gutiérrez-González, M. Sayagués, y C. García-Garrido, "Development of a novel TiNbTa material potentially suitable for bone replacement implants," *Materials & Design*, vol. 145, pp. 88–96, May 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2018.02.042>
- [127] E. Chicardi, C. Aguilar, M. Sayagués, y C. García-Garrido, "Influence of the Mn content on the TiNbxMn alloys with a novel FCC structure," *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 746, pp. 601–610, May 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2018.02.306>
- [128] C. García-Garrido, C. Gutiérrez-González, R. Torrecillas, L. Pérez-Pozo, C. Salvo, y E. Chicardi, "Manufacturing optimisation of an original nanostructured (beta + gamma)-TiNbTa material," *Journal of Materials Research and Technology*, May 2019. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2019.03.004>
- [129] J. Normand, R. Moriche, C. García-Garrido, R. E. S. Ferrer, y E. Chicardi, "Development of a TiNbTaMoZr-based high entropy alloy with low young's modulus by mechanical alloying route," *Metals*, vol. 10, no. 11, p. 1463, Nov. 2020. Disponible: <https://doi.org/10.3390/met10111463>
- [130] Y. Li, C. Yang, H. Zhao, S. Qu, X. Li, y Y. Li, "New developments of ti-based alloys for biomedical applications," *Materials*, vol. 7, no. 3, pp. 1709–1800, mar 2014. Disponible: <https://doi.org/10.3390/ma7031709>
- [131] N. Nomura, K. Sakamoto, K. Takahashi, S. Kato, Y. Abe, H. Doi, Y. Tsutsumi, M. Kobayashi, E. Kobayashi, W.-J. Kim, K.-H. Kim, y T. Hanawa, "Fabrication and mechanical properties of porous ti/HA composites for bone fixation devices," *Materials Transactions*, vol. 51, no. 8, pp. 1449–1454, 2010. Disponible: <https://doi.org/10.2320/matertrans.m2010092>
- [132] Z. Esen y Ş. Bor, "Characterization of ti-6al-4v alloy foams synthesized by space holder technique," *Materials Science and Engineering: A*, vol. 528, no. 7-8, pp. 3200–3209, mar 2011. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2011.01.008>
- [133] V. Brailovski, S. Prokoshkin, M. Gauthier, K. Inaekyan, S. Dubinskiy, M. Petrzhik, y M. Filonov, "Bulk and porous metastable beta ti-nb-zr(ta) alloys for biomedical applications," *Materials Science and Engineering: C*, vol. 31, no. 3, pp. 643–657, apr 2011. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.msec.2010.12.008>
- [134] X. Rao, C. Chu, y Y. Zheng, "Phase composition, microstructure, and mechanical properties of porous ti-nb-zr alloys prepared by a two-step foaming powder metallurgy method," *Journal*

- of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, vol. 34, pp. 27–36, jun 2014. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2014.02.001>
- [135] D. H. A. Besisa y E. M. M. Ewais, “Advances in functionally graded ceramics – processing, sintering properties and applications,” in *Advances in Functionally Graded Materials and Structures*. InTech, mar 2016. Disponible: <https://doi.org/10.5772/62612>
- [136] Y. Miyamoto, W. Kaysser, B. Rabin, A. Kawasaki, y R. G. Ford, *Functionally graded materials: design, processing and applications*. Springer Science & Business Media, 2013, vol. 5.
- [137] C. Kaya, “Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-y-TZP/al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> functionally graded composites of tubular shape from nano-sols using double-step electrophoretic deposition,” *Journal of the European Ceramic Society*, vol. 23, no. 10, pp. 1655–1660, sep 2003. Disponible: [https://doi.org/10.1016/s0955-2219\(02\)00370-9](https://doi.org/10.1016/s0955-2219(02)00370-9)
- [138] D. Mahmoud y M. Elbestawi, “Lattice structures and functionally graded materials applications in additive manufacturing of orthopedic implants: A review,” *Journal of Manufacturing and Materials Processing*, vol. 1, no. 2, p. 13, Oct. 2017. Disponible: <https://doi.org/10.3390/jmmp1020013>
- [139] T. Kunimine, H. Sato, E. Miura-Fujiwara, y Y. Watanabe, “New processing routes for functionally graded materials and structures through combinations of powder metallurgy and casting,” in *Advances in Functionally Graded Materials and Structures*. InTech, mar 2016. Disponible: <https://doi.org/10.5772/62393>
- [140] A. Sola, D. Bellucci, y V. Cannillo, “Functionally graded materials for orthopedic applications – an update on design and manufacturing,” *Biotechnology Advances*, vol. 34, no. 5, pp. 504–531, sep 2016. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.biotechadv.2015.12.013>
- [141] Y. Chino y D. C. Dunand, “Directionally freeze-cast titanium foam with aligned, elongated pores,” *Acta Materialia*, vol. 56, no. 1, pp. 105–113, jan 2008. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2007.09.002>
- [142] H.-D. Jung, S.-W. Yook, H.-E. Kim, y Y.-H. Koh, “Fabrication of titanium scaffolds with porosity and pore size gradients by sequential freeze casting,” *Materials Letters*, vol. 63, no. 17, pp. 1545–1547, Jul. 2009. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2009.04.012>
- [143] P. Trueba, J. R. B. Suárez, A. M. Beltrán, J. A. Rodríguez-Ortiz, Y. T. Hernández, J. J. P. Palacio, E. A. Álvarez, y D. C. Dunand, “A simple and economical device to process ti cylinders with elongated porosity by freeze-casting techniques: Design and manufacturing,” *Key Engineering Materials*, vol. 770, pp. 255–261, May 2018. Disponible: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/kem.770.255>

- [144] F. Liu, Z. Mao, P. Zhang, D. Z. Zhang, J. Jiang, y Z. Ma, “Functionally graded porous scaffolds in multiple patterns: New design method, physical and mechanical properties,” *Materials & Design*, vol. 160, pp. 849–860, Dic. 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2018.09.053>
- [145] C. Han, Y. Li, Q. Wang, S. Wen, Q. Wei, C. Yan, L. Hao, J. Liu, y Y. Shi, “Continuous functionally graded porous titanium scaffolds manufactured by selective laser melting for bone implants,” *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, vol. 80, pp. 119–127, Abr. 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2018.01.013>
- [146] Q. Han, C. Wang, H. Chen, X. Zhao, y J. Wang, “Porous tantalum and titanium in orthopedics: A review,” *ACS Biomaterials Science & Engineering*, vol. 5, no. 11, pp. 5798–5824, Sep. 2019. Disponible: <https://doi.org/10.1021/acsbiomaterials.9b00493>
- [147] G. Jiang, Q. Li, C. Wang, J. Dong, y G. He, “Fabrication of graded porous titanium–magnesium composite for load-bearing biomedical applications,” *Materials & Design*, vol. 67, pp. 354–359, Feb. 2015. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2014.12.001>
- [148] X. Li, Q. Huang, L. Liu, W. Zhu, T. A. Elkhooly, Y. Liu, Q. Feng, Q. Li, S. Zhou, Y. Liu, y H. Wu, “Reduced inflammatory response by incorporating magnesium into porous TiO<sub>2</sub> coating on titanium substrate,” *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, vol. 171, pp. 276–284, Nov. 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.colsurfb.2018.07.032>
- [149] R. Yamanoglu, N. Gulsoy, E. Olevsky, y H. Gulsoy, “Production of porous ti5al2.5fe alloy via pressureless spark plasma sintering,” *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 680, pp. 654–658, Sep. 2016. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.04.176>
- [150] A. Civantos, C. Domínguez, R. J. Pino, G. Setti, J. J. Pavón, E. Martínez-Campos, F. J. G. Garcia, J. A. Rodríguez, J. P. Allain, y Y. Torres, “Designing bioactive porous titanium interfaces to balance mechanical properties and in vitro cells behavior towards increased osseointegration,” *Surface and Coatings Technology*, vol. 368, pp. 162–174, jun 2019. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2019.03.001>
- [151] M. Thieme, K.-P. Wieters, F. Bergner, D. Scharnweber, H. Worch, J. Ndop, T. J. Kim, y W. Grill, “Titanium powder sintering for preparation of a porous functionally graded material destined for orthopaedic implants,” *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, vol. 12, no. 3, pp. 225–231, 2001. Disponible: <https://doi.org/10.1023/a:1008958914818>
- [152] K. A. Nazari, T. Hilditch, M. S. Dargusch, y A. Nouri, “Functionally graded porous scaffolds made of ti-based agglomerates,” *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, vol. 63, pp. 157–163, Oct. 2016. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2016.06.016>

- [153] P. Trueba, E. Chicardi, J. A. Rodríguez-Ortiz, J. J. Pavón, J. Cobos, y Y. Torres, “Design, processing and characterization of materials with controlled radial porosity for biomedical and nuclear applications,” *Key Engineering Materials*, vol. 704, pp. 325–333, Ago. 2016. Disponible: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/kem.704.325>
- [154] P. Trueba, E. Chicardi, J. Rodríguez-Ortiz, y Y. Torres, “Development and implementation of a sequential compaction device to obtain radial graded porosity cylinders,” *Journal of Manufacturing Processes*, vol. 50, pp. 142–153, Feb. 2020. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.jmapro.2019.12.011>
- [155] F. A. España, V. K. Balla, S. Bose, y A. Bandyopadhyay, “Design and fabrication of CoCrMo alloy based novel structures for load bearing implants using laser engineered net shaping,” *Materials Science and Engineering: C*, vol. 30, no. 1, pp. 50–57, Ene. 2010. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.msec.2009.08.006>
- [156] S. Limmahakhun, A. Oloyede, N. Chantarapanich, P. Jiamwatthanachai, K. Sitthiseripratip, Y. Xiao, y C. Yan, “Alternative designs of load-sharing cobalt chromium graded femoral stems,” *Materials Today Communications*, vol. 12, pp. 1–10, Sep. 2017. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2017.05.002>
- [157] S. Arabnejad, B. Johnston, M. Tanzer, y D. Pasini, “Fully porous 3d printed titanium femoral stem to reduce stress-shielding following total hip arthroplasty,” *Journal of Orthopaedic Research*, vol. 35, no. 8, pp. 1774–1783, oct 2016. Disponible: <https://doi.org/10.1002/jor.23445>
- [158] A. Spencer, *Continuum Mechanics*, ser. Dover books on physics. Dover Publications, 2004. Disponible: <https://books.google.cl/books?id=AJdfQL0rggC>
- [159] W. Lai, *Introduction to continuum mechanics*. Amsterdam Boston: Butterworth-Heinemann/Elsevier, 2010.
- [160] H.-C. Wu, *Continuum mechanics and plasticity*. Crc Press, 2004.
- [161] D. Caillerie, “Non homogeneous plate theory and conduction in fibered composites,” in *Homogenization techniques for composite media*. Springer-Verlag Berlin, 1987, vol. 272, pp. 1–62.
- [162] G. Pavliotis y A. Stuart, *Multiscale Methods*. Springer New York, 2008. Disponible: <https://doi.org/10.1007/978-0-387-73829-1>
- [163] W. Voigt, *Lehrbuch der kristallphysik:(mit ausschluss der kristalloptik)*. BG Teubner, 1910, vol. 34.

- [164] A. Reuß, “Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle.” *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, vol. 9, no. 1, pp. 49–58, 1929.
- [165] J. Katz, “Hard tissue as a composite material—i. bounds on the elastic behavior,” *Journal of Biomechanics*, vol. 4, no. 5, pp. 455–473, oct 1971. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0021-9290\(71\)90064-9](https://doi.org/10.1016/0021-9290(71)90064-9)
- [166] S. Shrikanth, R. Prasad, y S. Neelakantan, “Biaxial modulus in fiber-textured thin films: Coinciding voigt and reuss bounds and planes of isotropy,” *Journal of Applied Physics*, vol. 129, no. 21, p. 215101, jun 2021. Disponible: <https://doi.org/10.1063/5.0041016>
- [167] J. D. Eshelby, “The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 241, no. 1226, pp. 376–396, aug 1957. Disponible: <https://doi.org/10.1098/rspa.1957.0133>
- [168] R. Hill, “A self-consistent mechanics of composite materials,” *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 13, no. 4, pp. 213–222, aug 1965. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(65\)990010-4](https://doi.org/10.1016/0022-5096(65)990010-4)
- [169] M. Lefik, D. Boso, y B. Schrefler, “Generalized self-consistent homogenization using the finite element method,” *ZAMM*, vol. 89, no. 4, pp. 306–319, apr 2009. Disponible: <https://doi.org/10.1002/zamm.200800215>
- [170] Z. Hashin y S. Shtrikman, “A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials,” *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 11, no. 2, pp. 127–140, mar 1963. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(63\)90060-7](https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90060-7)
- [171] J. P. Watt, “Hashin-shtrikman bounds on the effective elastic moduli of polycrystals with monoclinic symmetry,” *Journal of Applied Physics*, vol. 51, no. 3, pp. 1520–1524, mar 1980. Disponible: <https://doi.org/10.1063/1.327803>
- [172] J. P. Watt y L. Peselnick, “Clarification of the hashin-shtrikman bounds on the effective elastic moduli of polycrystals with hexagonal, trigonal, and tetragonal symmetries,” *Journal of Applied Physics*, vol. 51, no. 3, pp. 1525–1531, mar 1980. Disponible: <https://doi.org/10.1063/1.327804>
- [173] J. Nadeau y M. Ferrari, “On optimal zeroth-order bounds with application to hashin-shtrikman bounds and anisotropy parameters,” *International Journal of Solids and Structures*, vol. 38, no. 44-45, pp. 7945–7965, nov 2001. Disponible: [https://doi.org/10.1016/s0020-7683\(00\)00393-0](https://doi.org/10.1016/s0020-7683(00)00393-0)

- [174] T. Mori y K. Tanaka, "Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions," *Acta Metallurgica*, vol. 21, no. 5, pp. 571–574, may 1973. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(73\)90064-3](https://doi.org/10.1016/0001-6160(73)90064-3)
- [175] Y. Benveniste, "A new approach to the application of mori-tanaka's theory in composite materials," *Mechanics of Materials*, vol. 6, no. 2, pp. 147–157, 1987. Disponible: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0167663687900056>
- [176] J. Guedes y N. Kikuchi, "Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 83, no. 2, pp. 143–198, oct 1990. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(90\)90148-f](https://doi.org/10.1016/0045-7825(90)90148-f)
- [177] V. Kouznetsova, M. Geers, y W. Brekelmans, "Multi-scale second-order computational homogenization of multi-phase materials: a nested finite element solution strategy," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 193, no. 48-51, pp. 5525–5550, Dic. 2004. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2003.12.073>
- [178] S. Oller, J. M. Canet, y F. Zalamea, "Composite material behavior using a homogenization double scale method," *Journal of Engineering Mechanics*, vol. 131, no. 1, pp. 65–79, 2005.
- [179] M. Ameen, R. Peerlings, y M. Geers, "A quantitative assessment of the scale separation limits of classical and higher-order asymptotic homogenization," *European Journal of Mechanics - A/Solids*, vol. 71, pp. 89–100, sep 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2018.02.011>
- [180] S. Ghosh, K. Lee, y S. Moorthy, "Two scale analysis of heterogeneous elastic-plastic materials with asymptotic homogenization and voronoi cell finite element model," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 132, no. 1-2, pp. 63–116, may 1996. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(95\)00974-4](https://doi.org/10.1016/0045-7825(95)00974-4)
- [181] M. Ostoja-Starzewski, "Material spatial randomness: From statistical to representative volume element," *Probabilistic Engineering Mechanics*, vol. 21, no. 2, pp. 112–132, apr 2006. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.probengmech.2005.07.007>
- [182] J. Fish y A. Wagiman, "Multiscale finite element method for a locally nonperiodic heterogeneous medium," *Computational Mechanics*, vol. 12, no. 3, pp. 164–180, 1993. Disponible: <https://doi.org/10.1007/bf00371991>
- [183] L. F. Nielsen, "Elastic properties of two-phase materials," *Materials Science and Engineering*, vol. 52, no. 1, pp. 39–62, jan 1982. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0025-5416\(82\)90068-4](https://doi.org/10.1016/0025-5416(82)90068-4)

- [184] Z. Hashin, "Analysis of composite materials—a survey," *Journal of Applied Mechanics*, vol. 50, no. 3, pp. 481–505, sep 1983. Disponible: <https://doi.org/10.1115/1.3167081>
- [185] M. Ostoja-Starzewski y C. Wang, "Linear elasticity of planar delaunay networks. part II: Voigt and reuss bounds, and modification for centroids," *Acta Mechanica*, vol. 84, no. 1-4, pp. 47–61, mar 1990. Disponible: <https://doi.org/10.1007/bf01176087>
- [186] M. Jiang, K. Alzebdeh, I. Jasiuk, y M. Ostoja-Starzewski, "Scale and boundary conditions effects in elastic properties of random composites," *Acta Mechanica*, vol. 148, no. 1-4, pp. 63–78, Mar. 2001. Disponible: <https://doi.org/10.1007/bf01183669>
- [187] C. C. Mei y B. Vernescu, *Homogenization Methods for Multiscale Mechanics*. WORLD SCIENTIFIC, Sep. 2010. Disponible: <https://doi.org/10.1142/7427>
- [188] E. Andrews, G. Gioux, P. Onck, y L. Gibson, "Size effects in ductile cellular solids. part II: experimental results," *International Journal of Mechanical Sciences*, vol. 43, no. 3, pp. 701–713, Dic. 2001. Disponible: [https://doi.org/10.1016/s0020-7403\(00\)00043-6](https://doi.org/10.1016/s0020-7403(00)00043-6)
- [189] S. Kari, H. Berger, R. Rodriguez-Ramos, y U. Gabbert, "Computational evaluation of effective material properties of composites reinforced by randomly distributed spherical particles," *Composite Structures*, vol. 77, no. 2, pp. 223–231, Ene. 2007. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2005.07.003>
- [190] R. Hill, "Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 11, no. 5, pp. 357–372, Sep. 1963. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(63\)90036-x](https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90036-x)
- [191] S. Hazanov, "Hill condition and overall properties of composites," *Archive of Applied Mechanics (Ingenieur Archiv)*, vol. 68, no. 6, pp. 385–394, Jul. 1998. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s004190050173>
- [192] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, y D. Jeulin, "Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach," *International Journal of Solids and Structures*, vol. 40, no. 13-14, pp. 3647–3679, Jun. 2003. Disponible: [https://doi.org/10.1016/s0020-7683\(03\)00143-4](https://doi.org/10.1016/s0020-7683(03)00143-4)
- [193] P. A. Cundall y O. D. L. Strack, "A discrete numerical model for granular assemblies," *Géotechnique*, vol. 29, no. 1, pp. 47–65, Mar. 1979. Disponible: <https://doi.org/10.1680/geot.1979.29.1.47>
- [194] P. W. Cleary, R. Morrisson, y S. Morrell, "Comparison of DEM and experiment for a scale model SAG mill," *International Journal of Mineral Processing*, vol. 68, no. 1-4, pp. 129–165, Ene. 2003. Disponible: [https://doi.org/10.1016/s0301-7516\(02\)00065-0](https://doi.org/10.1016/s0301-7516(02)00065-0)

- [195] F. A. Tavarez y M. E. Plesha, “Discrete element method for modelling solid and particulate materials,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 70, no. 4, pp. 379–404, 2007. Disponible: <https://doi.org/10.1002/nme.1881>
- [196] H. Deresiewicz, R. Mindlin, y C. U. D. of Civil Engineering, *Elastic Spheres in Contact Under Varying Oblique Forces*. Columbia University, 1952. Disponible: <https://books.google.cl/books?id=Xe0fHwAACAAJ>
- [197] H. C. Li, W. M. Dong, y X. P. Xie, “Analysis of mill performance of industrial scale ball mill using DEM simulation,” *Advanced Materials Research*, vol. 634-638, pp. 3732–3736, Ene. 2013. Disponible: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/amr.634-638.3732>
- [198] Y. Zhou, B. Wright, R. Yang, B. Xu, y A. Yu, “Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 269, no. 2-4, pp. 536–553, jul 1999. Disponible: [https://doi.org/10.1016/s0378-4371\(99\)00183-1](https://doi.org/10.1016/s0378-4371(99)00183-1)
- [199] T. Li, Y. Peng, Z. Zhu, S. Zou, y Z. Yin, “Discrete element method simulations of the inter-particle contact parameters for the mono-sized iron ore particles,” *Materials*, vol. 10, no. 5, p. 520, may 2017. Disponible: <https://doi.org/10.3390/ma10050520>
- [200] A. Shabana, *Computational Dynamics*. Wiley, 2009.
- [201] C. B. Padrós, “Discrete element simulations with liggghts,” *College of Engineering in Computational Mechanics*. Swansea University, 2014.
- [202] R. Rajamani, B. Mishra, R. Venugopal, y A. Datta, “Discrete element analysis of tumbling mills,” *Powder Technology*, vol. 109, no. 1-3, pp. 105–112, Abr. 2000. Disponible: [https://doi.org/10.1016/s0032-5910\(99\)00230-2](https://doi.org/10.1016/s0032-5910(99)00230-2)
- [203] M. Otsubo, C. O’Sullivan, y T. Shire, “Empirical assessment of the critical time increment in explicit particulate discrete element method simulations,” *Computers and Geotechnics*, vol. 86, pp. 67 – 79, 2017. Disponible: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0266352X16303299>
- [204] L. Verlet, “Computer experiments on classical fluids. i. thermodynamical properties of lennard-jones molecules,” *Phys. Rev.*, vol. 159, pp. 98–103, Jul. 1967. Disponible: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.159.98>
- [205] E. Hairer, C. Lubich, y G. Wanner, “Geometric numerical integration illustrated by the störmer-verlet method,” *Acta numerica*, vol. 12, pp. 399–450, 2003.
- [206] A. Podlozhnyuk, S. Pirker, y C. Kloss, “Efficient implementation of superquadric particles in discrete element method within an open-source framework,” *Computational Particle Mechanics*, vol. 4, no. 1, pp. 101–118, Ene. 2017. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s40571-016-0131-6>

- [207] S. Plimpton, “Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics,” *Journal of Computational Physics*, vol. 117, no. 1, pp. 1 – 19, 1995. Disponible: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199918571039X>
- [208] A. Munjiza y K. R. F. Andrews, “Nbs contact detection algorithm for bodies of similar size,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 43, no. 1, pp. 131–149, 1998. Disponible: [https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19980915\)43%3A1%3C131%3A%3AAID-NME447%3E3.0.CO%3B2-S](https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/(SICI)1097-0207(19980915)43%3A1%3C131%3A%3AAID-NME447%3E3.0.CO%3B2-S)
- [209] A. Munjiza, E. Rougier, y N. W. M. John, “Mr linear contact detection algorithm,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 66, no. 1, pp. 46–71, 2006. Disponible: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nme.1538>
- [210] C. Kloss, C. Goniva, A. Hager, S. Amberger, y S. Pirker, “Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM,” *Progress in Computational Fluid Dynamics, An International Journal*, vol. 12, no. 2/3, p. 140, 2012. Disponible: <https://doi.org/10.1504/pcfd.2012.047457>
- [211] J. L. Bentley y J. H. Friedman, “Data structures for range searching,” *ACM Computing Surveys*, vol. 11, no. 4, pp. 397–409, dec 1979. Disponible: <https://doi.org/10.1145/356789.356797>
- [212] J. Bonet y J. Peraire, “An alternating digital tree (ADT) algorithm for 3d geometric searching and intersection problems,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 31, no. 1, pp. 1–17, jan 1991. Disponible: <https://doi.org/10.1002/nme.1620310102>
- [213] J. Boris, “A vectorized “near neighbors” algorithm of order n using a monotonic logical grid,” *Journal of Computational Physics*, vol. 66, no. 1, pp. 1–20, sep 1986. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(86\)90050-1](https://doi.org/10.1016/0021-9991(86)90050-1)
- [214] P. Gonnet, “Pairwise verlet lists: Combining cell lists and verlet lists to improve memory locality and parallelism,” *Journal of Computational Chemistry*, vol. 33, no. 1, pp. 76–81, sep 2011. Disponible: <https://doi.org/10.1002/jcc.21945>
- [215] —, “Pseudo-verlet lists: a new, compact neighbour list representation,” *Molecular Simulation*, vol. 39, no. 9, pp. 721–727, aug 2013. Disponible: <https://doi.org/10.1080/08927022.2012.762097>
- [216] G. Nikishkov, “Introduction to the finite element method,” *University of Aizu*, pp. 1–70, 2004.
- [217] T. R. Chandrupatla y A. D. Belegundu, *Introduction to finite elements in engineering*. Prentice Hall Upper Saddle River, NJ, 2012.
- [218] O. Zienkiewicz, R. Taylor, y J. Zhu, *The Finite Element Method: its Basis and Fundamentals*. Elsevier, 2013. Disponible: <https://doi.org/10.1016/c2009-0-24909-9>

- [219] E. Madenci y I. Guven, *The Finite Element Method and Applications in Engineering Using ANSYS®*. Springer US, 2015. Disponible: <https://doi.org/10.1007/978-1-4899-7550-8>
- [220] E. B. Becker, G. F. Carey, y J. T. Oden, *Finite elements: an introduction*. Prentice Hall, 1981, vol. 1.
- [221] G. Dhatt, G. Touzot, y E. Lefrançois, *Finite Element Method*. John Wiley & Sons, Inc., oct 2012. Disponible: <https://doi.org/10.1002/9781118569764>
- [222] G. P. Nikishkov, *Programming finite elements in Java [trademark symbol]*. London: Springer-Verlag, 2010.
- [223] M. A. Eisenberg y L. E. Malvern, “On finite element integration in natural co-ordinates,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 7, no. 4, pp. 574–575, 1973. Disponible: <https://doi.org/10.1002/nme.1620070421>
- [224] J. Hammersley, *Monte Carlo Methods*, ser. Monographs on Statistics and Applied Probability. Springer Netherlands, 2013. Disponible: <https://books.google.cl/books?id=3rDvCAAAQBAJ>
- [225] R. Kaas y J. Buhrman, “Mean, median and mode in binomial distributions,” *Statistica Neerlandica*, vol. 34, no. 1, pp. 13–18, mar 1980. Disponible: <https://doi.org/10.1111/j.1467-9574.1980.tb00681.x>
- [226] B. Büeler, A. Enge, y K. Fukuda, “Exact volume computation for polytopes: A practical study,” in *Polytopes — Combinatorics and Computation*. Birkhäuser Basel, 2000, pp. 131–154. Disponible: [https://doi.org/10.1007/978-3-0348-8438-9\\_6](https://doi.org/10.1007/978-3-0348-8438-9_6)
- [227] A. Florian, “An efficient sampling scheme: Updated latin hypercube sampling,” *Probabilistic Engineering Mechanics*, vol. 7, no. 2, pp. 123–130, jan 1992. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0266-8920\(92\)90015-a](https://doi.org/10.1016/0266-8920(92)90015-a)
- [228] W.-L. Loh, “On latin hypercube sampling,” *The Annals of Statistics*, vol. 24, no. 5, oct 1996. Disponible: <https://doi.org/10.1214/aos/1069362310>
- [229] M. J. Gilman, “A brief survey of stopping rules in monte carlo simulations,” Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), Tech. Rep., 1968.
- [230] F. Ballio y A. Guadagnini, “Convergence assessment of numerical monte carlo simulations in groundwater hydrology,” *Water Resources Research*, vol. 40, no. 4, apr 2004. Disponible: <https://doi.org/10.1029/2003wr002876>
- [231] L. Pérez, S. Lascano, C. Aguilar, D. Estay, U. Messner, I. Figueroa, y I. Alfonso, “Dem-fea estimation of pores arrangement effect on the compressive young’s modulus for

- mg foams,” *Computational Materials Science*, vol. 110, pp. 281 – 286, 2015. Disponible: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025615005510>
- [232] W.-Y. Jang, A. M. Kraynik, y S. Kyriakides, “On the microstructure of open-cell foams and its effect on elastic properties,” *International Journal of Solids and Structures*, vol. 45, no. 7-8, pp. 1845–1875, apr 2008. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2007.10.008>
- [233] M. Marvi-Mashhadi, C. S. Lopes, y J. LLorca, “Surrogate models of the influence of the microstructure on the mechanical properties of closed- and open-cell foams,” *Journal of Materials Science*, vol. 53, no. 18, pp. 12937–12948, jun 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s10853-018-2598-4>
- [234] M. Haeri y M. Haeri, “ImageJ plugin for analysis of porous scaffolds used in tissue engineering,” *Journal of Open Research Software*, vol. 3, jan 2015. Disponible: <https://doi.org/10.5334/jors.bn>
- [235] F. Cazals, H. Kanhere, y S. Lorient, “Computing the volume of a union of balls,” *ACM Transactions on Mathematical Software*, vol. 38, no. 1, pp. 1–20, nov 2011. Disponible: <https://doi.org/10.1145/2049662.2049665>
- [236] M. S. Till y G. M. Ullmann, “McVol - a program for calculating protein volumes and identifying cavities by a monte carlo algorithm,” *Journal of Molecular Modeling*, vol. 16, no. 3, pp. 419–429, jul 2009. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s00894-009-0541-y>
- [237] M. Campillo, P. Pérez, J. Daher, y L. Pérez, “Percentage porosity computation of three-dimensional non-convex porous geometries using the direct monte carlo simulation,” *Engineering with Computers*, vol. 37, no. 2, pp. 951–973, sep 2019. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s00366-019-00866-2>
- [238] B. Mishra y R. K. Rajamani, “The discrete element method for the simulation of ball mills,” *Applied Mathematical Modelling*, vol. 16, no. 11, pp. 598–604, nov 1992. Disponible: [https://doi.org/10.1016/0307-904x\(92\)90035-2](https://doi.org/10.1016/0307-904x(92)90035-2)
- [239] S. J. Burns y K. J. Hanley, “Establishing stable time-steps for DEM simulations of non-collinear planar collisions with linear contact laws,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 110, no. 2, pp. 186–200, sep 2016. Disponible: <https://doi.org/10.1002/nme.5361>
- [240] S. J. Burns, P. T. Piiroinen, y K. J. Hanley, “Critical time step for DEM simulations of dynamic systems using a hertzian contact model,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 119, no. 5, pp. 432–451, mar 2019. Disponible: <https://doi.org/10.1002/nme.6056>

- [241] C. O'Sullivan y J. D. Bray, "Selecting a suitable time step for discrete element simulations that use the central difference time integration scheme," *Engineering Computations*, vol. 21, no. 2/3/4, pp. 278–303, mar 2004. Disponible: <https://doi.org/10.1108/02644400410519794>
- [242] M. Lupo, D. Sofia, D. Barletta, y M. Poletto, "Calibration of dem simulation of cohesive particles," *Chemical Engineering Transactions*, vol. 74, pp. 379–384, 2019. Disponible: <https://doi.org/10.3303/CET1974064>
- [243] E. Sanchez-Palencia y A. Zaoui, Eds., *Homogenization Techniques for Composite Media*. Springer Berlin Heidelberg, 1987. Disponible: <https://doi.org/10.1007/3-540-17616-0>
- [244] V. Kouznetsova, M. G. D. Geers, y W. A. M. Brekelmans, "Multi-scale constitutive modelling of heterogeneous materials with a gradient-enhanced computational homogenization scheme," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 54, no. 8, pp. 1235–1260, 2002. Disponible: <https://doi.org/10.1002/nme.541>
- [245] Z. Li y R. C. Bradt, "The single-crystal elastic constants of cubic (3c) SiC to 1000 c," *Journal of Materials Science*, vol. 22, no. 7, pp. 2557–2559, jul 1987. Disponible: <https://doi.org/10.1007/bf01082145>
- [246] A. T. Huber y L. J. Gibson, "Anisotropy of foams," *Journal of Materials Science*, vol. 23, no. 8, pp. 3031–3040, aug 1988. Disponible: <https://doi.org/10.1007/bf00547486>
- [247] Z. Hashin, "THEORY OF MECHANICAL BEHAVIOR OF HETEROGENEOUS MEDIA," The Towne School of Civil and Mechanical Engineering University of Pennsylvania, Tech. Rep., jul 1963. Disponible: <https://doi.org/10.21236/ad0412503>
- [248] Z. F. Khisaeva y M. Ostoja-Starzewski, "On the size of RVE in finite elasticity of random composites," *Journal of Elasticity*, vol. 85, no. 2, pp. 153–173, Ago. 2006. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s10659-006-9076-y>
- [249] V. Nguyen, B. Nedjar, H. Colina, y J. Torrenti, "A separation of scales homogenization analysis for the modelling of calcium leaching in concrete," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 195, no. 52, pp. 7196–7210, nov 2006. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2005.02.036>
- [250] Disponible: <https://asm.matweb.com/search/SpecificMaterial.asp?bassnum=mtu040>
- [251] S. Muñoz, J. Pavón, J. Rodríguez-Ortiz, A. Civantos, J. Allain, y Y. Torres, "On the influence of space holder in the development of porous titanium implants: Mechanical, computational and biological evaluation," *Materials Characterization*, vol. 108, pp. 68–78, oct 2015. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2015.08.019>

- [252] ASTM-E9:2019, “Test methods of compression testing of metallic materials at room temperature.” Disponible: <https://doi.org/10.1520/e0009-19>
- [253] ISO-13314:2011, “Mechanical testing of metals. ductility testing. compression test for porous and cellular metals,” 2011. Disponible: <https://doi.org/10.3403/30203544u>
- [254] Y. Torres, J. Pavón, y J. Rodríguez, “Processing and characterization of porous titanium for implants by using NaCl as space holder,” *Journal of Materials Processing Technology*, vol. 212, no. 5, pp. 1061–1069, may 2012. Disponible: <https://doi.org/10.1016/Fj.jmatprotec.2011.12.015>
- [255] G. Al Kassem, “Micromechanical material models for polymer composites through advanced numerical simulation techniques,” Ph.D. dissertation, RWTH Aachen University, Aachen, 2010, aachen, Techn. Hochsch., Diss., 2009. Disponible: <http://publications.rwth-aachen.de/record/51389>
- [256] Z. Yuan y J. Fish, “Toward realization of computational homogenization in practice,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 73, no. 3, pp. 361–380, 2007. Disponible: <https://doi.org/10.1002/nme.2074>
- [257] M. B. Brown y A. B. Forsythe, “Robust tests for the equality of variances,” *Journal of the American Statistical Association*, vol. 69, no. 346, pp. 364–367, jun 1974. Disponible: <https://doi.org/10.1080/01621459.1974.10482955>
- [258] J. L. Gastwirth, Y. R. Gel, y W. Miao, “The impact of levene’s test of equality of variances on statistical theory and practice,” *Statistical Science*, vol. 24, no. 3, aug 2009. Disponible: <https://doi.org/10.1214/09-sts301>
- [259] M. Campillo, R. Sedaghati, R. A. L. Drew, I. Alfonso, y L. Pérez, “Development of an RVE using a DEM–FEM scheme under modified approximate periodic boundary condition to estimate the elastic mechanical properties of open foams,” *Engineering with Computers*, vol. 38, no. S3, pp. 1767–1785, mar 2021. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s00366-021-01355-1>
- [260] K. R. Rajagopal, “On the nonlinear elastic response of bodies in the small strain range,” *Acta Mechanica*, vol. 225, no. 6, pp. 1545–1553, oct 2013. Disponible: <https://doi.org/10.1007/s00707-013-1015-y>
- [261] R. Bustamante y K. Rajagopal, “Modelling residual stresses in elastic bodies described by implicit constitutive relations,” *International Journal of Non-Linear Mechanics*, vol. 105, pp. 113–129, oct 2018. Disponible: <https://doi.org/10.1016/j.ijnonlinmec.2018.06.007>

## Firmas

---

Mauricio Alejandro Campillo Canto  
Alumno

---

Luís Carlos Pérez Pozo  
Director de Tesis