

Anexo B: Formulación del problema termo elástico, mediante el método de elementos finitos- MEF

B.1 Condiciones del molde bajo cargas mecánicas y temperaturas.

La formulación del problema de elementos finitos obedece a un problema de cuerpo rígido sometido a cargas multi físicas, como son las temperaturas y las fuerzas mecánicas que actúan sobre el molde y sus cavidades. A partir de la formulación del problema de naturaleza multi físico y, específicamente, termo elástico, se realizará la formulación del problema desde un dominio de diseño continuo hasta discretizar, mediante el método elementos finitos, donde se realizará el abordaje discreto, considerando la matriz de rigidez local y global, el vector de carga del elemento finito seleccionado para discretizar dicho dominio, y conocer las incógnitas del problema, como serían los desplazamientos o dilataciones térmicas y mecánicas en las zonas de contacto, entre el material fundido y el molde (cavidades) (Chan et al., 2008).

B.2 Formulación del problema termo elástico

A continuación, se expone el desarrollo mediante el método de los elementos finitos de un problema mecánico en tres dimensiones afectado, por un incremento de temperatura, representadas por las condiciones térmicas en el proceso de moldeo por inyección. Como consecuencia de tratar un sólido tridimensional, todos los seis posibles esfuerzos (tres normales y tres cortantes), deben ser tomados en cuenta (estado general de esfuerzos), además de que el campo de desplazamiento involucra las tres posibles componentes u , v , w . Los elementos típicos para este problema son el tetraedro y el hexaedro, con tres grados de libertad de translación por nodo (Cook, 1995).

B.3 Ecuaciones gobernantes del problema termo mecánico en 3D

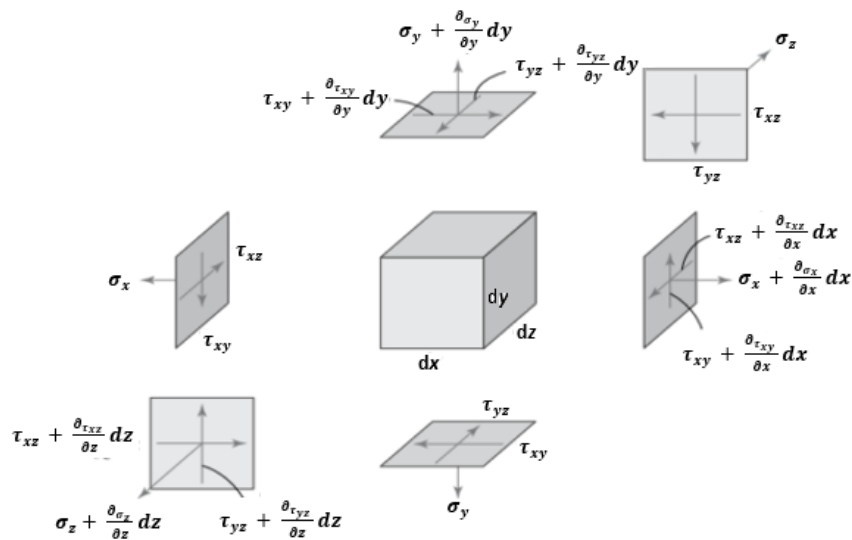
Los moldes de inyección son estructuras modeladas tridimensionalmente y, como se evidenció en el análisis presentado en el apartado 3.1, 3.1.1, y anexo A, se asumen como estructuras con comportamiento lineal; por lo tanto, el problema estará formulado de forma desacoplada, en el sentido de que las ecuaciones de calor no dependen de las ecuaciones de elasticidad.

Las ecuaciones gobernantes para este problema tridimensional se deducen, considerando un material elástico, lineal e isotrópico, que se presentan a continuación (Hutton, 2004).

B.3.1 Ecuaciones de equilibrio

La Fig. B.1 muestra un volumen infinitesimal de un sólido, con las tensiones y las fuerzas por unidad de volumen presentes en éste, σ_x , σ_y , σ_z y f_x , f_y , f_z , respectivamente. Se asume que los esfuerzos varían espacialmente y esta variación se puede expresar, por medio de series de Taylor, despreciando los términos de grado mayor o igual a dos. Adicionalmente, se considera que el elemento está sujeto a fuerzas axiales f_x , f_y , f_z . Estas fuerzas son expresadas por unidad de volumen y representan la acción de una influencia externa, que afecta al elemento como a un todo. Aplicando la condición de equilibrio de fuerzas en cada eje coordenado, se obtiene la Ec. B.0 (Hutton, 2004).

Fig. B.1 Estado de esfuerzos en 3D. Tomado de (Hutton, 2004).



$$\begin{aligned}
& \left(\sigma_x + \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} dx \right) dydz - \sigma_x dydz + \left(\tau_{xy} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} dy \right) dx dz - \tau_{xy} dx dz + \left(\tau_{xz} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} dz \right) dx dy - \tau_{xz} dx dy + f_x dx dy dz = 0 \\
& \left(\sigma_y + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} dy \right) dx dz - \sigma_y dx dz + \left(\tau_{xy} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} dx \right) dy dz - \tau_{xy} dy dz + \left(\tau_{yz} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} dz \right) dx dy - \tau_{yz} dx dy + f_y dx dy dz = 0 \\
& \left(\sigma_z + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} dz \right) dx dy - \sigma_z dx dy + \left(\tau_{xz} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} dz \right) dx dy - \tau_{xz} dx dy + \left(\tau_{yz} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} dy \right) dx dz - \tau_{yz} dx dz + f_z dx dy dz = 0
\end{aligned}$$

Ec. (B.0)

Simplificando la Ec. B.0, se obtiene la Ec. B.1, que es la ecuación de equilibrio para un sólido elástico en estado tridimensional de esfuerzos.

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} + f_x = 0, \quad \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} + f_y = 0, \quad \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + f_z = 0 \quad \text{Ec. (B.1)}$$

B.3.2 Ecuaciones cinemáticas

Las ecuaciones cinemáticas, también son conocidas como relaciones de deformación-desplazamiento y la derivación de su formulación matemática, se basa en el concepto de deformación normal, el cual es introducido y definido en el contexto de tensión uniaxial. La deformación de un espécimen de longitud original L_0 , que alcanza una longitud de L se puede expresar con la Ec. B.2.

$$\epsilon = \frac{L - L_0}{L_0} = \frac{\Delta L}{L_0} \quad \text{Ec. (B.2)}$$

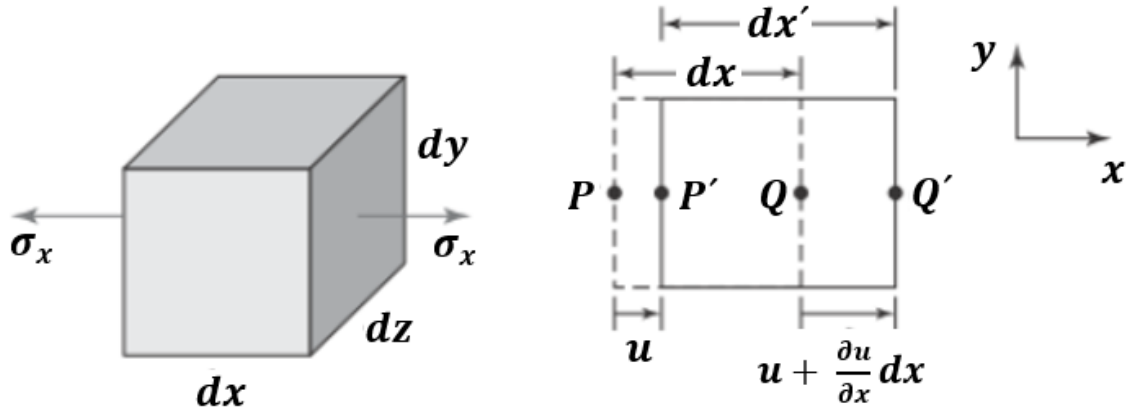
Aplicando el concepto anterior para un elemento infinitesimal, considerando los desplazamientos únicamente en la dirección x por simplicidad, como se ilustra en la Fig. B.2, se obtiene que el desplazamiento dx' es:

$$dx' = dx + u_q - u_p = dx + u + \frac{\partial u}{\partial x} dx - u = dx + \frac{\partial u}{\partial x} dx \quad \text{Ec. (B.3)}$$

Con la Ec. B.3 usada en la Ec. B.2, se obtiene la Ec. B.4:

$$\epsilon_x = \frac{dx' - dx}{dx} = \frac{\frac{\partial u}{\partial x} dx}{dx} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad \text{Ec. (B.4)}$$

Fig. B.2 Elemento infinitesimal sometido a esfuerzo uniaxial y deformación axial. Tomado de (Hutton, 2004).



De igual forma, a lo realizado para obtener la Ec.B.4, es posible hallar la deformación ϵ normal para las direcciones y, z . La Ec. B.5 presenta las deformaciones normales en las direcciones x, y, z .

$$\epsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \epsilon_y = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \epsilon_z = \frac{\partial w}{\partial z} \quad \text{Ec. (B.5)}$$

Para la deducción de las deformaciones cortantes, se usa la Fig. **B.3**, y con un procedimiento similar al anterior, se obtiene la Ec. B.6.

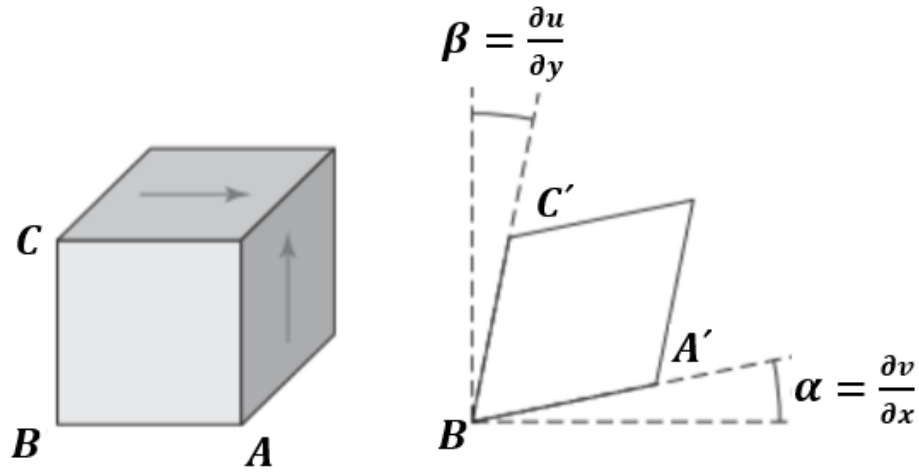
$$\gamma_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \gamma_{zx} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}, \quad \gamma_{yz} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \quad \text{Ec. (B.6)}$$

Las ecuaciones Ec. B.5 y Ec. B.6 proveen la definición de las seis posibles componentes independientes de las deformaciones en tres dimensiones.

Se debe notar que estas relaciones son válidas únicamente para pequeños desplazamientos. Dichas ecuaciones expresadas en forma matricial, se muestran en la Ec. B.7:

$$\{\epsilon\} = \begin{Bmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \epsilon_z \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} \end{Bmatrix} = [L]\{U\} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u \\ v \\ w \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial w}{\partial z} \\ \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \end{Bmatrix} \quad \text{Ec. (B.7)}$$

Fig. B.3 Elemento infinitesimal sometido a fuerza cortante y cambios angulares en dicho elemento usado para la definición de deformación cortante. Tomado de (Hutton, 2004).



Considerando la estructura tridimensional del molde sobre un dominio ω , con un material termo-elástico lineal (como se pudo evidenciar anteriormente en la sección 3.1.1 y anexo A), las ecuaciones del problema continuo para cada uno de los problemas físicos involucrado, como se presentan a continuación (Benitez et al., 2019; Frizelle, 2016; S. Jahan et al., 2019b; Montealegre Rubio et al., 2010b; Montealegre Rubio y E. C. Nelli, 2005; Muñoz et al., 2018; Ramírez Gil, 2013; Wu, Jahan, et al., 2017).

- Problema de conducción de calor: La ecuación gobernante del modo de transferencia de calor por conducción se presenta en la Ec. B.8 para el caso unidimensional, la cual es conocida como ley de Fourier, donde q_x es el flujo de calor por unidad de área en la dirección x (W/m²), c_t es la conductividad térmica del material (W/mK) y $\frac{dT}{dx}$ es el gradiente de temperatura (Kelvin/metro).

$$q_x = -c_t \frac{dT}{dx} \quad \text{Ec. (B.8)}$$

- Problema y dominio térmico: La ecuación que gobierna el problema térmico está dada por las expresiones B.9.

$$C_t * T + \dot{q}_t = 0 \text{ en } \omega \quad \text{Ec. (B.9)}$$

Donde C_t es la conductividad térmica del material, T la temperatura prescrita, \dot{q}_t es la tasa de generación de calor por unidad de volumen y ω el dominio de diseño de la estructura sometida al problema térmico.

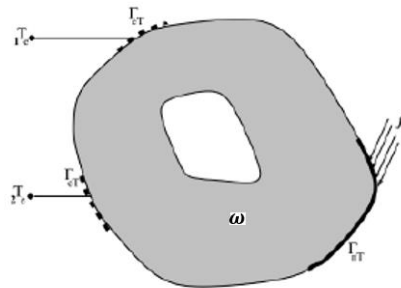
Para determinar la tasa de generación de calor \dot{q}_t se tiene la expresión B.10, que está referenciada en (Montealegre Rubio y E. C. Nelli, 2005) .

$$\dot{q}_t = -C_e v^2 - h (T_o - T) \quad \text{Ec. (B.10)}$$

$$\dot{q}_t = -h (T_o - T) \quad \text{Ec. (B.11)}$$

Donde C_e es la conductividad eléctrica del material, v el voltaje, h el coeficiente de convección y T_o es la temperatura impuesta del problema, es decir, la temperatura de servicio en la cual está en contacto el polímero fundido con las cavidades del molde de inyección. Considerando que el problema abordado para los moldes de inyección contiene componentes en fuerzas mecánicas y cargas térmicas, la expresión se simplifica a la expresión B.13. De acuerdo con el problema representado en la Fig. **B.4**, se obtiene la expresión B.14, considerando lo siguiente:

Fig. B.4 Representación gráfica del problema en un dominio térmico. Adaptado de (Ramírez Gil, 2013).



Considerando la expresión B.10, B.11 y la Fig. **B.4**, $T_o = T$ en la región de frontera restringida térmicamente Γ_{eT} , por lo tanto:

$$T_o = T \text{ en } \Gamma_{eT}$$

$$-C_t * T = f_t \text{ en } \Gamma_{et} \quad \text{Ec. (B.12)}$$

Donde f_t es el flujo de calor prescrito.

- Problema y dominio elástico: La ecuación que gobierna el problema elástico está dada por la expresión B.13:

$$\sigma + F = 0 \text{ en } \omega \quad \text{Ec. (B.13)}$$

Donde σ y F son los esfuerzos y fuerzas de volumen, y ω el dominio de diseño de la estructura sometida al problema mecánico. Para determinar la tasa de generación de volumen \dot{q}_t se tiene la expresión B.14, que está referenciada en (Montealegre Rubio y E. C. Nelli, 2005).

$$\sigma = E * (\epsilon - \alpha * (T - T_0)) \text{ en } \omega \quad \text{Ec. (B.14)}$$

Donde E , ϵ y α son el tensor elástico del material, la deformación y el tensor de expansión térmica, respectivamente. Las deformaciones ϵ se calculan con las expresiones B.7 a B.9, obteniendo la expresión B.15:

$$\epsilon = \frac{1}{2} [u_{xy} + u_{yx} + \gamma_{xy}] \text{ en } \omega \quad \text{Ec. (B.15)}$$

B.3.3 Ecuación constitutiva

La ecuación constitutiva también se conoce como relación de esfuerzo – deformación, donde para materiales homogéneos, isotrópicos y elásticos lineales (como es el caso de esta tesis, las propiedades del material requeridas son el módulo elástico (E) y relación de Poisson (ν). Para tensión uniaxial se define el módulo elástico como la pendiente de la curva esfuerzo -deformación en la región elástica $\sigma_x = E\epsilon_x$ (Cook, 1995). La relación de Poisson es una medida del fenómeno que presentan los cuerpos elásticos, los cuales se deforman en una dirección, deformándose también, en una dirección perpendicular a la anterior; por ejemplo, por una carga uniaxial en la dirección x el cuerpo se deforma en esta dirección, además, en la dirección perpendicular a esta (en las coordenadas y, z), a pesar de no existir cargas en estas direcciones. Formalmente, la relación de Poisson se define como se muestra en la expresión (B.16):

$$\nu = -\frac{\text{deformación lateral}}{\text{deformación axial}} \quad \text{Ec. (B.16)}$$

Notando que ν siempre es positivo, ya que la deformación lateral y axial tienen signos contrarios. Entonces, si un cuerpo está cargado en la dirección x , existe una deformación axial ϵ_x y las deformaciones inducidas serían $\epsilon_y = \epsilon_z = -\nu\epsilon_x$. Luego, para un sólido homogéneo, isotrópico elástico lineal en estado de tres dimensiones de deformaciones con cambios considerables de temperatura, la ecuación constitutiva es la Ec. (B.17):

$$\{\sigma\} = [D] \{\epsilon - \epsilon_T\} \quad \text{Ec. (B.17)}$$

$$\begin{Bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \end{Bmatrix} = [D] \left(\begin{Bmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \epsilon_z \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} \end{Bmatrix} - \alpha (T - T_0) \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \right) \quad \text{Ec. (B.18)}$$

Donde $[D]$ es la matriz de material y está dada por la expresión B.19:

$$[D] = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & 1-\nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & \nu & 1-\nu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1-2\nu)/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (1-2\nu)/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & (1-2\nu)/2 \end{bmatrix} \quad \text{Ec. (B.19)}$$

B.4 Formulación del elemento finito usado para los moldes

Se asume que las fuerzas volumétricas y la fuente interna de corriente son cero. El número de elementos finitos (EF), usados en la discretización es N y el número de nodos por EF, es n . Como el objetivo del MOT, basado en el modelo de material SIMP, es optimizar la distribución del material, a través del control de la pseudo-densidad (variable de diseño que varía de 0 a 1) de cada EF, las propiedades del material dependen de la pseudo-densidad

relativa (del elemento). Las propiedades dependientes de dicha densidad son la conductividad térmica y el módulo de Young. Ahora, el sistema termo-mecánico puede ser resuelto por dos problemas de EF, como se muestra a continuación, en la expresión B.20, los cuales se resuelven secuencialmente en el orden que aparecen, si las propiedades del material son independientes de la temperatura (problema lineal) [1], [4]:

$$[k_T(\tilde{x}_i)]\{T\} = \{Q(V, \tilde{x}_i)\} \quad y \quad [k_M(\tilde{x}_i)]\{U\} = \{F(T, \tilde{x}_i)\} \quad \text{Ec. (B.20)}$$

Donde $[k_T(\tilde{x}_i)]$ y $[k_M(\tilde{x}_i)]$ son las matrices globales de conductividad térmica y de rigidez mecánica, respectivamente, la matriz de rigidez global mecánica es de tamaño $3n \times 3n$ por tener tres grados de libertad por nodo (U_x, U_y, U_z). $\{T\}$ es el vector de temperaturas, de dimensión $n \times 1$, $\{U\}$ es el vector de desplazamientos de tamaño $3n \times 1$. $\{Q(V, \tilde{x}_i)\}$ es el vector global de carga del problema térmico y $\{F(T, \tilde{x}_i)\}$ es el vector global de carga del problema mecánico, todos estos términos son dependientes de \tilde{x}_i .

El sistema de matrices $[K]$ también dependen de la densidad relativa \tilde{x}_i y son ensambladas de forma usual, como una suma de todas las matrices locales del elemento, tal como se presenta a continuación en la expresión B.21:

$$[k_T(\tilde{x}_i)] = \sum_{e=1}^N [k_t^e(\tilde{x}_i^e)] + h^e \quad y \quad [k_M(\tilde{x}_i)] = \sum_{e=1}^N [k_m^e(\tilde{x}_i^e)] \quad \text{Ec. (B.21)}$$

El tamaño de las matrices $[k_t^e(\tilde{x}_i^e)]$ y $[k_m^e(\tilde{x}_i^e)]$ del elemento dependen del elemento finito seleccionado y se pueden expresar de la siguiente manera, en la expresión B.22:

$$[k_t^e(\tilde{x}_i^e)] = [k_t] \int_{v^e} [B_t^T][B_t] dv \quad \text{Ec. (B.22)}$$

$$[k_m^e(\tilde{x}_i)] = \int_{v^e} [B]^T [E](\tilde{x}_i)[B] dv$$

$$h^e = h \int_{s^e} [N_t^T][N_t] dS$$

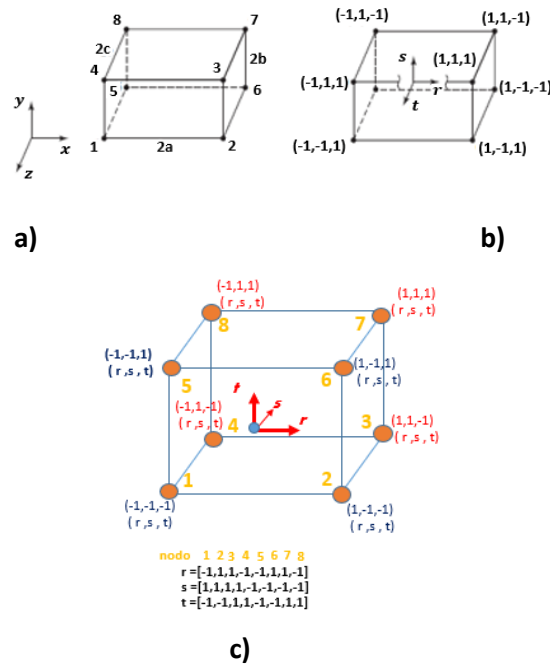
Donde $[k_t^e(\tilde{x}_i^e)]$ y $[k_m^e(\tilde{x}_i)]$ son la conductividad térmica y matriz de rigidez mecánica, a nivel del elemento, respectivamente, h es el coeficiente de convección, $[E(\tilde{x}_i)]$ es la matriz de elasticidad del elemento e, $[N_t]$ es un vector con las funciones, de forma que dependen

del elemento seleccionado, $[B_t]$ es la matriz gradiente de temperatura y $[B]$ es la matriz deformación – desplazamiento, finalmente v^e es el volumen del elemento finito.

B.4.1 Formulación isoparamétrica del elemento finito

Para calcular las matrices de conductividad térmica y de rigidez, así como los vectores de carga térmica y mecánica, es necesario realizar las derivadas parciales, con respecto a las coordenadas globales x, y, z de las funciones de forma y cálculo de las integrales de volumen en el dominio de diseño v . Lo primero se resuelve con la formulación isoparamétrica y el segundo con integración numérica (Kwon & Hyochoong Bang, 2000; Ramírez Gil, 2013). Para la integración numérica y el sistema de coordenadas a utilizar en la implementación del código MEF, se muestra la disposición del elemento, como se muestra en la Fig. B.5, de acuerdo con la literatura aplicada, a partir de Hutton (Hutton, 2004) .

Fig. B.5 Elemento brick de 8 nodos. a) Coordenadas cartesianas globales b) Coordenadas naturales con origen en el centro c) Disposición del elemento finito utilizado para código MEF en coordenadas naturales.



De acuerdo con la disposición presentada en la Fig. B.5 c) las funciones de forma del elemento referente se encuentran en términos de las coordenadas naturales r, s, t , como se presenta en la expresión B.23:

$$[N] = \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ N_4 \\ N_5 \\ N_5 \\ N_6 \\ N_7 \\ N_8 \end{bmatrix} = \frac{1}{8} \begin{bmatrix} (1-r) * (1+s) * (1-t) \\ (1+r) * (1+s) * (1-t) \\ (1+r) * (1+s) * (1+t) \\ (1-r) * (1+s) * (1+t) \\ (1-r) * (1-s) * (1-t) \\ (1+r) * (1-s) * (1-t) \\ (1+r) * (1-s) * (1+t) \\ (1-r) * (1-s) * (1+t) \end{bmatrix} \quad \text{Ec. (B.23)}$$

Mientras que la matriz gradiente $[B]$ está en términos de las coordenadas globales x, y, z . Como se indica enseguida, en la Ec. B.24.

$$[B] = [L][N_3] = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [N] & 0 & 0 \\ 0 & [N] & 0 \\ 0 & 0 & [N] \end{bmatrix} \quad \text{Ec. (B.24)}$$

Como se observa, la expresión B.24 está compuesta por una matriz de tamaño 6 filas y 3 columnas compuesta por la matriz de derivadas parciales, de las funciones de interpolación (Para el caso de este trabajo se calcula una matriz de 6 filas y 8 nodos con tres grados de libertad, ubicados según tres coordenadas globales posteriormente transformadas a naturales, será una matriz de 6 filas y 24 columnas). Aplicando el principio de energía potencial mínima descrito en (Hutton, 2004), se obtienen las expresiones B.25 y B.26, como se muestra a continuación:

$$\iiint_v [B]^T [D] [B] dV \{\delta\} = \{f\} \quad \text{Ec. (B.25)}$$

Como el sistema de ecuaciones de equilibrio nodal para el esfuerzo de un elemento tridimensional, a partir de la Ec. (B.25), se identifica la matriz de rigidez del elemento, como lo expresa la Ec. (B.26).

$$[k] = \iiint_v [B]^T [D] [B] dV \quad \text{Ec. (B.26)}$$

Así, la matriz de rigidez del elemento está definida, como una matriz simétrica $3n \times 3n$, Para un elemento de propiedades lineales y elásticas.

Consecuentemente, para ir de un sistema a otro, partiendo de la expresión B.24, se usa una transformación, mediante la expresión B.27.

$$x = \sum_{i=1}^8 N_i(r, s, t) x_i, \quad y = \sum_{i=1}^8 N_i(r, s, t) y_i, \quad z = \sum_{i=1}^8 N_i(r, s, t) z_i \quad \text{Ec. (B.27)}$$

Donde x_i , y_i y z_i son los valores de las coordenadas globales del nodo i y N_i son las funciones de forma dadas en la expresión B.23. Ahora, con el objetivo de calcular las derivadas, en términos de las variables r, s, t de las funciones dependientes de las coordenadas globales x, y, z , se hace uso de la regla de la cadena presentada en la siguiente expresión B.28:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial s} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial s} \\ \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} \end{aligned} \quad \text{Ec. (B.28)}$$

Reescribiendo la expresión B.28 en términos matriciales se obtiene:

$$\underbrace{\begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial s} \\ \frac{\partial}{\partial t} \end{Bmatrix}}_{\text{Derivadas locales}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial z}{\partial s} \\ \frac{\partial x}{\partial t} & \frac{\partial y}{\partial t} & \frac{\partial z}{\partial t} \end{bmatrix}}_{\text{Jacobiano}} \underbrace{\begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{Bmatrix}}_{\text{Derivadas globales}} \quad \text{Ec. (B.29)}$$

De acuerdo con la expresión B.30 se muestra la matriz jacobiana $[J]$, la cual es la matriz de transformación de las coordenadas cartesianas a las naturales o simplemente el Jacobiano. La matriz del Jacobiano es la que relaciona de manera biunívoca el plano Euclidiano, con el plano Gaussiano. El Jacobiano se calcula de forma directa, usando la expresión B.30, B.31 y B.32, como se evidencia a continuación:

$$[J] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial z}{\partial s} \\ \frac{\partial x}{\partial t} & \frac{\partial y}{\partial t} & \frac{\partial z}{\partial t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^8 \frac{\partial N_i(r,s,t)}{\partial r} x_i & \sum_{i=1}^8 \frac{\partial N_i(r,s,t)}{\partial r} y_i & \sum_{i=1}^8 \frac{\partial N_i(r,s,t)}{\partial r} z_i \\ \sum_{i=1}^8 \frac{\partial N_i(r,s,t)}{\partial s} x_i & \sum_{i=1}^8 \frac{\partial N_i(r,s,t)}{\partial s} y_i & \sum_{i=1}^8 \frac{\partial N_i(r,s,t)}{\partial s} z_i \\ \sum_{i=1}^8 \frac{\partial N_i(r,s,t)}{\partial t} x_i & \sum_{i=1}^8 \frac{\partial N_i(r,s,t)}{\partial t} y_i & \sum_{i=1}^8 \frac{\partial N_i(r,s,t)}{\partial t} z_i \end{bmatrix} \quad \text{Ec. (B.30)}$$

$$[J] = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^8 \frac{\partial N_i(r,s,t)}{\partial r} \\ \sum_{i=1}^8 \frac{\partial N_i(r,s,t)}{\partial s} \\ \sum_{i=1}^8 \frac{\partial N_i(r,s,t)}{\partial t} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 \\ x_5 & y_5 & z_5 \\ x_6 & y_6 & z_6 \\ x_7 & y_7 & z_7 \\ x_8 & y_8 & z_8 \end{bmatrix} \quad \text{Ec. (B.31)}$$

$$[J] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial r} & \frac{\partial N_2}{\partial r} & \frac{\partial N_3}{\partial r} & \frac{\partial N_4}{\partial r} & \frac{\partial N_5}{\partial r} & \frac{\partial N_6}{\partial r} & \frac{\partial N_7}{\partial r} & \frac{\partial N_8}{\partial r} \\ \frac{\partial N_1}{\partial s} & \frac{\partial N_2}{\partial s} & \frac{\partial N_3}{\partial s} & \frac{\partial N_4}{\partial s} & \frac{\partial N_5}{\partial s} & \frac{\partial N_6}{\partial s} & \frac{\partial N_7}{\partial s} & \frac{\partial N_8}{\partial s} \\ \frac{\partial N_1}{\partial t} & \frac{\partial N_2}{\partial t} & \frac{\partial N_3}{\partial t} & \frac{\partial N_4}{\partial t} & \frac{\partial N_5}{\partial t} & \frac{\partial N_6}{\partial t} & \frac{\partial N_7}{\partial t} & \frac{\partial N_8}{\partial t} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 \\ x_5 & y_5 & z_5 \\ x_6 & y_6 & z_6 \\ x_7 & y_7 & z_7 \\ x_8 & y_8 & z_8 \end{bmatrix} \quad \text{Ec. (B.32)}$$

El Jacobiano se presenta de forma compacta en la expresión B.33:

$$[J] = \begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} & J_{13} \\ J_{21} & J_{22} & J_{23} \\ J_{31} & J_{32} & J_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left\{ \frac{\partial N_i}{\partial r} \right\} \\ \left\{ \frac{\partial N_i}{\partial s} \right\} \\ \left\{ \frac{\partial N_i}{\partial t} \right\} \end{bmatrix} [\{x_i\} \quad \{y_i\} \quad \{z_i\}] \quad \text{Ec. (B.33)}$$

La inversa de la matriz jacobiana se denota como $[R]$, en la expresión B.34:

$$[R] = [J^e]^{-1} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{bmatrix} \quad \text{Ec. (B.34)}$$

Luego, las derivadas con respecto a las coordenadas globales se obtienen de las expresiones B.29 y B.34, quedando como se presenta a continuación en la expresión B.35:

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial s} \\ \frac{\partial}{\partial t} \end{Bmatrix} \quad \text{Ec. (B.35)}$$

B.4.2 Integración numérica

Para calcular las matrices de conductividad térmica y la matriz de rigidez, así como los vectores de carga térmica y mecánica, es necesario hacer una integración triple sobre el dominio del elemento; sin embargo, dicha integración realizada por métodos analíticos puede ser muy complicada, por el hecho de que, en el contexto de los elementos finitos, se requiere un gran número de integraciones, donde los métodos analíticos pueden ser ineficientes.

En consecuencia, se usa integración numérica, como la cuadratura de Gauss-Legrende (o simplemente Gauss) que, a pesar de ser una técnica numérica, la integración puede ser exacta dependiendo del número de puntos de integración y el grado del polinomio integrado.

De especial interés resulta para el análisis por elementos finitos que, con la cuadratura de Gauss, se puede integrar de forma exacta. Si se usan M puntos y pesos de integración, resulta que la integral es exacta para un polinomio de grado $2M-1$ (Kwon & Hyochoong Bang, 2000).

En esta tesis, la expresión para hallar tanto la matriz de conductividad térmica como la matriz de rigidez, es un polinomio de grado 2 para cada una de las variables r , s y t .

Por lo tanto, el número de puntos de integración debe ser $2M-1=2 \rightarrow M=3/2$ y se aproxima al número entero superior, lo cual significa que se deben usar 2 puntos y pesos de integración por cada variable, al usar la integración numérica para obtener una integración exacta.

En el caso del elemento “Brick” que está compuesto, por funciones de forma tri-lineales, se usa un esquema de $2 \times 2 \times 2$ para la integración exacta, donde los puntos de integración y los pesos se presentan en la Tabla **B.1**.

En la Fig. **B.6** se muestra la ubicación de los puntos de integración en el elemento hexaédrico.

Tabla B.1 Puntos y pesos de integración para el elemento “Brick” de 8 nodos (Hutton, 2004).

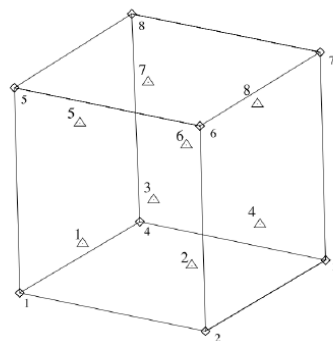
Coordenada	Localización	Peso
r	$\pm \frac{1}{\sqrt{3}}$	1,1
s	$\pm \frac{1}{\sqrt{3}}$	1,1
t	$\pm \frac{1}{\sqrt{3}}$	1,1

Luego, una integral triple o de volumen se puede aproximar, por la expresión B.36:

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f(r, s, t) dr ds dt = \sum_{i=1}^{M_i} \sum_{j=1}^{M_j} \sum_{k=1}^{M_k} f(r_i, s_j, t_k) W_i W_j W_k \quad \text{Ec. (B.36)}$$

En donde M es el número de puntos de integración, r_i, s_j, t_k son los puntos de integración y W_i, W_j, W_k son coeficientes llamados pesos de integración, con el fin de hallar valores estándares para los puntos y pesos de integración, es necesario que el dominio de integración esté normalizado y las variables usadas solo varíen entre -1 y 1 (Kwon & Hyochoong Bang, 2000; Ramírez Gil, 2013).

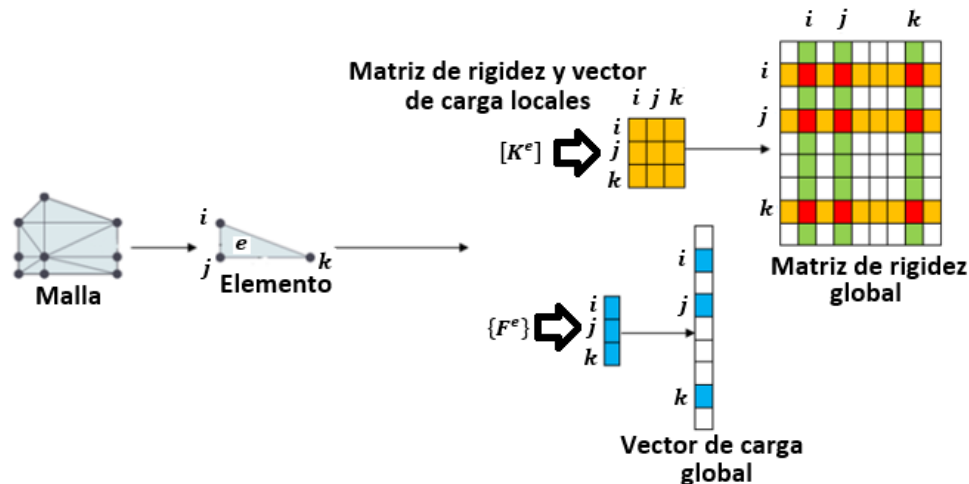
Fig. B.6 Localización de los nodos y puntos de integración para el elemento “Brick” (Ramírez Gil, 2013).



B.5 Implementación del Método de los Elementos Finitos (MEF)

Básicamente, el algoritmo para la solución de problemas, mediante el MEF, el cual consta de cuatro pasos principales (Ramírez Gil, 2013). El primer paso es el cálculo de la matriz de rigidez y el vector de carga de cada elemento (locales), seguido por su respectivo ensamble en el sistema global (ver Fig. B.7). Se debe notar que, para mallas no estructuradas como la presentada en la Fig. B.7, estos dos primeros pasos se deben hacer para cada uno de los elementos presentes en dicha malla; mientras que, para mallas estructuradas, basta con el cálculo de un solo elemento, puesto que los demás tienen la misma matriz de rigidez local. El tercer paso se da una vez obtenida la matriz de rigidez global y el vector de carga global, con la aplicación de las condiciones de frontera sobre dichos sistemas. Finalmente, se soluciona un sistema lineal de ecuaciones, que se obtiene de los pasos anteriores, en el cual se hallan las variables de estado del problema considerado. Nótese que la anterior descripción es aplicable, tanto en el problema térmico como mecánico. En las subsecciones que se presentan, a continuación, se hará una descripción de la implementación en Matlab de cada una de estas etapas del MEF.

Fig. B.7 Representación gráfica para el cálculo y ensamble de la matriz de rigidez y del vector de carga de un elemento triangular de tres nodos, con un grado de libertad por nodo. Tomado de (Ramírez Gil, 2013).



Continuando con la matriz de rigidez $[k]$, expresada anteriormente en la Ec. B.26, obtenida para la misma de un elemento es:

$$[k] = \iiint_V [B]^T [D] [B] dV \quad \text{Ec. (B.26)}$$

En ella aparece la matriz $[B]$, que se obtiene derivando la matriz de funciones de interpolación $[N]$, respecto a las coordenadas x, y, z ; sin embargo, la matriz $[N]$ está definida en las coordenadas locales normalizadas del elemento (coordenadas naturales) r, s, t , por lo que es necesario transformar las derivadas entre unas coordenadas y otras. Una vez obtenida la matriz $[B]$, hay que efectuar la integral anterior al dominio de todo el elemento. Esto es muy simple en coordenadas locales, pero no es sencillo en coordenadas generales, dado que el elemento podría ser curvo. Para resolver este problema, lo que se hace es evaluar la integral anterior en coordenadas naturales r, s, t , pasando todas las expresiones necesarias a dichas coordenadas. En la expresión de la matriz $[B]$, de la ecuación B. 24, se observa que es necesario disponer de todas las derivadas de las funciones de interpolación, respecto a las coordenadas globales x, y, z .

El procedimiento para la obtención de las derivadas y las ecuaciones se expusieron entre las expresiones B.23 y B.35. En la Fig. 3.1, del capítulo 3, se presenta, en detalle, los pasos 1 y 2 del algoritmo de elementos finitos para la estructura tipo molde, donde se muestra en la parte izquierda el cálculo de la matriz de rigidez y matriz de conductividad local a nivel del elemento, con sus respectivos vectores de carga térmico y mecánico. Posteriormente, se realiza el ensamble de las matrices locales en la matriz global (paso 2), estos procesos y líneas de código se muestran en las líneas punteadas en rojo.

La Fig. 3.1, del capítulo 3, presenta los pasos 3 y 4 del algoritmo, los cuales consisten en la aplicación de las condiciones de frontera, para el caso de la estructura, las cargas térmicas o temperaturas en las cavidades del molde (temperatura de material fundido) y las cargas mecánicas en las diferentes componentes FX , FY y FZ , de acuerdo con la fuerza de cierre experimentada por el molde. Aplicadas las condiciones de frontera del problema termo mecánico, se procede a realizar la solución del sistema de ecuaciones lineales, ensamblado para el problema térmico en principio, conocer el comportamiento de las temperaturas nodales, en función de las cargas térmicas y la matriz de conductividad, el comportamiento de los desplazamientos, en función de las fuerzas y la matriz de rigidez. Finalmente, los desplazamientos en la estructura, producto de las cargas térmicas y mecánicas.