

Trabajo Fin de Grado

Simulación por elementos finitos del ensayo de nanoindentación para la caracterización de materiales biológicos

Autor

Borja Navarro Ausere

Director/es

José Manuel García Aznar

Clara Valero Lázaro

Escuela de Ingeniería y Arquitectura

Año 2015



DECLARACIÓN DE AUTORÍA Y ORIGINALIDAD

(Este documento debe acompañar al Trabajo Fin de Grado (TFG)/Trabajo Fin de Máster (TFM) cuando sea depositado para su evaluación).

D./Dª. BORJA NAVARRO AUSERE,

con nº de DNI 73022186S en aplicación de lo dispuesto en el art. 14 (Derechos de autor) del Acuerdo de 11 de septiembre de 2014, del Consejo de Gobierno, por el que se aprueba el Reglamento de los TFG y TFM de la Universidad de Zaragoza,

Declaro que el presente Trabajo de Fin de (Grado/Máster) Grado _____, (Título del Trabajo)

Simulación por elementos finitos del ensayo de nanoindentación para la caracterización de materiales biológicos

es de mi autoría y es original, no habiéndose utilizado fuente sin ser citada debidamente.

Zaragoza, a 11 de junio de 2015

Fdo: BORJA NAVARRO AUSERE

Agradecimientos

A José Manuel García y a Clara Valero que se han prestado en todo momento a dedicarme su tiempo y su ayuda, y han realizado un seguimiento exhaustivo del proyecto lo cual me ha permitido progresar de forma continuada así como me ha servido de motivación personal para su realización.

Simulación por elementos finitos del ensayo de nanoindentación para la caracterización de materiales biológicos

RESUMEN

Uno de los ensayos más utilizados para la caracterización de las propiedades mecánicas de materiales es el de tracción uniaxial. Sin embargo, estos ensayos no permiten caracterizar determinados materiales muy blandos, como por ejemplo los materiales biológicos. Para determinar correctamente las propiedades de estos materiales, se han desarrollado otros métodos basados en indentación, como el que utiliza el microscopio de fuerza atómica (AFM).

Con este trabajo se pretende investigar, utilizando modelos de simulación basados en elementos finitos, el comportamiento de algunos materiales, entre ellos los biológicos. De esta manera, mediante la obtención de determinadas propiedades, se puede entender y definir el modo en el que se van a comportar estos materiales ante determinados esfuerzos.

Para ello se ha llevado a cabo la simulación de ensayos de nanoindentación, mediante el programa de simulación por elementos finitos Abaqus/CAE 6.12, de tal forma que se ha desarrollado un modelo paramétrico, que permite la simulación de cualquier casuística de ensayo con un microscopio de fuerza atómica.

Para la simulación de este tipo de ensayos, se han utilizado modelos de comportamiento con distintas propiedades mecánicas, empezando por los materiales más sencillos (material elástico lineal) para llegar a los más complejos (material hiperelástico anisótropo fibrado).

Los resultados obtenidos muestran el fuerte comportamiento no lineal que tienen estos materiales hiperelásticos, el cual se intensifica conforme aumenta la profundidad de la indentación, y por tanto la deformación. En el caso del modelo de comportamiento del material hiperelástico anisótropo fibrado, se ha observado la enorme influencia que tienen las direcciones de las familias de fibras que lo forman.

Por último, se han analizado los resultados comparándolos con el modelo teórico de Hertz, que es el más utilizado para determinar experimentalmente las propiedades mecánicas en este tipo de ensayos. Se ha observado cómo se comporta la ley de Hertz para los modelos de comportamiento simulados, y se ha concluido, que para poderse utilizar la ley de Hertz, es necesario aplicar una corrección. Sin esta corrección, las predicciones del modelo teórico distan sustancialmente de las de elementos finitos, especialmente para materiales con comportamiento fuertemente no lineal.

Índice

1	Introducción.....	3
1.1	Nanoindentación y AFM	3
1.2	Materiales biológicos.....	4
1.3	Definición del modelo de Hertz.....	4
1.3.1	Hipótesis del modelo	4
1.3.2	Ecuación Hertz.....	4
1.4	Estudios previos	5
1.5	Objetivo	6
2	Métodos y cálculos.....	6
2.1	Hipótesis de partida.....	6
2.2	Materiales analizados.....	6
2.2.1	Material elástico lineal	7
2.2.2	Material hiperelástico isótropo.....	7
2.2.3	Material hiperelástico anisótropo.....	8
2.3	Modelo 2D axisimétrico	9
2.3.1	Geometría	9
2.3.2	Condiciones de contorno.....	10
2.3.3	Interacción	10
2.3.4	Mallado	11
2.3.5	Simulación	12
2.4	Modelo 3D.....	12
2.4.1	Geometría, condiciones de contorno y mallado	12
3	Resultados	13
3.1	Material elástico lineal	13
3.2	Material hiperelástico isótropo	17
3.3	Material hiperelástico anisótropo	19
4	Conclusiones y discusión	23
5	Bibliografía	24
5.1	Artículos	24
5.2	Otros	25
6	Anexos	26

6.1 Dimensionamiento de la muestra	26
6.2 Densidad de energía del modelo neo-Hookeano.....	29
6.3 Densidad de energía del modelo Holzapfel	30
6.4 Modelo axisimétrico en Abaqus CAE.....	31
6.5 Mallado en Abaqus CAE	32
6.6 Código de la simulación del ensayo 2D en Abaqus para una muestra de un material elástico.....	36
6.6.1 Modificación para una muestra de material neo-Hookeano.....	40

1 Introducción

Uno de los ensayos más utilizados, para obtener las propiedades mecánicas de los materiales, son los ensayos uniaxiales. Sin embargo, con estos ensayos resulta muy difícil la caracterización de materiales blandos, entre ellos los biológicos, debido a que la escala necesaria para medir magnitudes, es mucho menor que la que un ensayo uniaxial puede proporcionar. Por ello se ha comenzado a utilizar otros métodos, como es el AFM (Atomic Force Microscopy).

1.1 Nanoindentación y AFM

Un ensayo de indentación consiste, esencialmente, en hacer incidir un material cuyas propiedades mecánicas son conocidas en otro cuya propiedades mecánicas nos interesa conocer.

La nanoindentación es una variedad de los ensayos de dureza que se caracteriza por ser aplicada a pequeños volúmenes, ya que la escala utilizada es a nivel nanométrico. Por lo tanto, se diferencia principalmente del resto de ensayos de dureza en que el tamaño del indentador y el de la huella aplicada, son de unos pocos micrómetros.

El fin del ensayo de nanoindentación es determinar el módulo de Young y la dureza del material ensayado a partir de las cargas y desplazamientos medidos. De esta forma, es posible estimar las propiedades mecánicas de dicho material.

Los ensayos por AFM presentan diferencias frente a los ensayos de dureza tradicionales, ya que inicialmente en un ensayo de dureza se aplica una carga y cuando ésta es retraída se mide la huella que el indentador ha impreso. Sin embargo, en los ensayos de nanoindentación la profundidad de penetración debe ser medida conforme la carga es aplicada. Este tipo de ensayos se han podido llevar a cabo recientemente debido al desarrollo de esta tecnología en las últimas décadas. El instrumento más utilizado para realizar este tipo de ensayos es el microscopio de fuerza atómica [1]. Se trata de un microscopio capaz de medir fuerzas del orden de los nanonewtons en tiempo real. Como se puede observar en la *Figura 1*, está formado por un voladizo de silicio de unos 200 µm con una punta en su extremo. Las interacciones entre la punta y la muestra quedan registradas y las deflexiones del voladizo se detectan mediante un rayo láser, que se refleja en el extremo del voladizo sobre un detector.

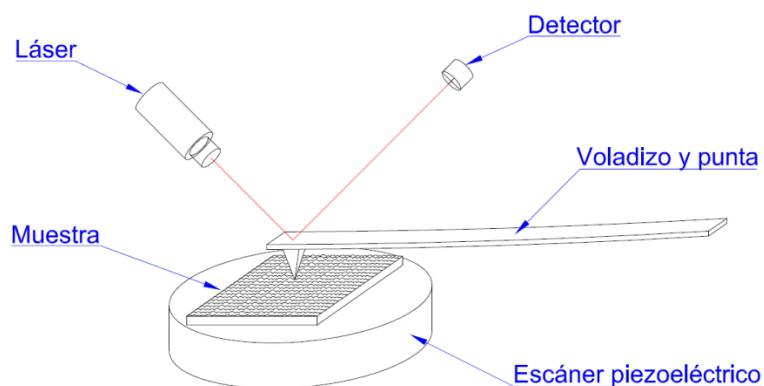


Figura 1: Diagrama de un microscopio de fuerza atómica.

1.2 Materiales biológicos

Los ensayos de nanoindentación son aplicados a materiales con módulos de Young muy pequeños, es decir, materiales blandos. Entre este tipo de materiales se encuentran los tejidos biológicos (pulmones, músculo esquelético, corazón, arterias, ligamentos, tendones, piel...). Estos materiales se caracterizan por tener un comportamiento no lineal, que genera grandes desplazamientos y deformaciones, y hace que su comportamiento sea muy complejo. Esto es debido a que las propiedades estructurales y el comportamiento de estos materiales están definidos por la relación entre los desplazamientos y deformaciones generados, o lo que es equivalente, la relación entre tensión y deformación.

Si se habla de materiales ideales, hay que tener en cuenta que su comportamiento es isótropo y homogéneo, es decir, tienen las mismas propiedades en todas las direcciones y la composición del material es la misma en su totalidad. Sin embargo, en el caso de los materiales biológicos, se trata con materiales anisótropos y no homogéneos, lo que dificulta más su estudio; además de lo anterior, tienen un comportamiento viscoelástico, esto es, que exhiben propiedades viscosas, así como elásticas, cuando se deforman [2, 3].

1.3 Definición del modelo de Hertz

El modelo de Hertz, es el modelo más utilizado para analizar las fuerzas microscópicas en un ensayo de nanoindentación en relación con la profundidad aplicada.

1.3.1 Hipótesis del modelo

Las hipótesis en las que se basa el modelo de Hertz son [4]:

- Material isótropo, que se caracteriza por tener las mismas propiedades físicas y mecánicas en todas las direcciones.
- Material homogéneo, que tiene las mismas propiedades físicas y mecánicas en todo su volumen.
- Material elástico lineal, este material se caracteriza por la recuperación del material a su estado original una vez hayan cesado las tensiones aplicadas en él.
- Pequeñas deformaciones, de forma que se eviten las no linealidades geométricas.
- Muestra semi-infinita, para suprimir los efectos debidos a las condiciones de contorno.
- Superficie de contacto entre el indentador y la muestra sin fricción, así como se asume que el indentador no sufre deformaciones.

1.3.2 Ecuación Hertz

La geometría de las puntas de los ensayos de nanoindentación puede ser esférica, cónica [5, 6] o piramidal [7, 8].

En indentación esférica, la relación entre la fuerza aplicada y profundidad de indentación (δ) viene dada por la siguiente expresión [1, 4, 9, 10, 11, 12]:

$$F = \frac{4ER^{1/2}\delta^{3/2}}{3(1-\nu^2)}$$

donde E y ν son respectivamente el modulo de Young y el coeficiente de Poisson de la muestra y R hace referencia al radio del indentador (*Figura 2*).

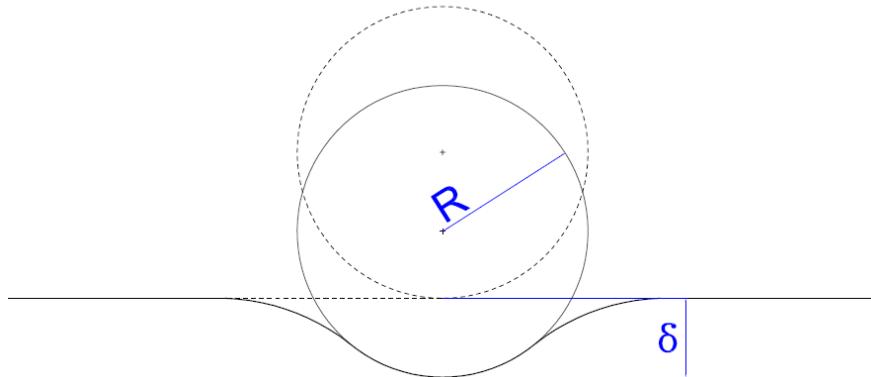


Figura 2: Contacto entre un indentador rígido y una muestra. Definición parámetros R y δ .

1.4 Estudios previos

Existen estudios en los que se han analizado los ensayos de nanoindentación esférica, mediante experimentación y simulación en elementos finitos. En *Lin et al.*, [9] establecen las funciones de densidad de energía de varios modelos hiperelásticos y posteriormente, las comparan con los resultados que obtienen de dichos modelos en simulaciones de elementos finitos y a la vez con el modelo de Hertz. Este trabajo concluye que los resultados del modelo de Hertz son aceptables para un límite de $\delta/R=0.2$.

Por otro lado, en el *capítulo 3 de la tesis “Computational Modelling of Single Cell Probing”* [13], se estudia un material hiperelástico mediante el modelo de Ogden, que es comparado con el modelo de Hertz con el fin de establecer cuándo es válido dicho modelo y bajo qué condiciones. Para finalizar el estudio, aplican una serie de correcciones al modelo de Hertz basándose en otro estudio similar (*Dimitriadis et al.*, [12]).

Del mismo modo, *Long et al.*, [11] analiza las limitaciones del modelo de Hertz, concluyendo que éste sobreestima el módulo de Young y por lo tanto, ve necesario aplicar una serie de correcciones para poder ser utilizado.

Otros estudios, como *Ladjal et al.*, [4] utilizan la técnica AFM sobre muestras esféricas. *Ladjal et al.*, [4] realiza un experimento sobre células madre de embriones de ratón, comparándolo con una simulación de elementos finitos y con el modelo teórico de Hertz. Se concluye que los resultados teóricos y de elementos finitos son sólo válidos para pequeñas deformaciones.

1.5 Objetivo

El objetivo del proyecto es comprender el comportamiento de distintos materiales, mediante la simulación de modelos de comportamiento en un ensayo de nanoindentación con el programa Abaqus CAE, y poder ser capaces de entender este tipo de ensayo. Estos materiales presentan distinto comportamiento mecánico: elástico lineal, hiperelástico isótropo e hiperelástico anisótropo. Se prestará especial atención al material hipereástico anisótropo debido a que los trabajos publicados hasta la fecha, implementan materiales hiperelásticos isótropos para simular materiales blandos tales como geles. Sin embargo, no se han utilizado otro tipo de materiales como son los hiperelásticos anisótropos. Estos materiales están formados por varias familias de fibras con distinta orientación. Este tipo de estructura se encuentra en numerosos tejidos, tales como la piel o tejidos vasculares.

Por último, se comparará el modelo de Hertz con los resultados de las simulaciones y se determinará bajo qué condiciones, éste, es aplicable para los modelos de comportamiento analizados.

2 Métodos y cálculos

Para llevar a cabo las simulaciones es necesario conocer las hipótesis del modelo utilizado, así como los materiales que van a ser analizados.

2.1 Hipótesis de partida

Para realizar las simulaciones se han utilizado varias hipótesis de partida de tal forma que la simulación quede lo mejor adaptada posible a lo que sería un ensayo real. Se han simulado indentadores esféricos ya que éstos reducen las deformaciones no lineales generadas durante el ensayo, permitiendo obtener una estimación del módulo de Young más fiable respecto a otro tipo de geometrías, como pudiera ser un indentador cónico o piramidal.

El indentador utilizado, tiene un módulo de Young mucho mayor que la muestra, $E=200000\text{ MPa}$ y $v=0.3$, para que éste no sea deformable.

La altura y la anchura de las muestras son mucho más grandes que el tamaño del indentador, ya que de esta forma se suprimen los efectos debido a las condiciones de contorno (ver Anexo 6.1).

Por último, se ha supuesto que en el contacto entre el indentador y la muestra, no existe fricción. Si el material a analizar fuesen células, habría que considerar que éstas disponen de una membrana, que se debería tener en cuenta en la simulación [14].

2.2 Materiales analizados

Se ha partido de un material elástico lineal, debido a que es el material más sencillo de analizar y es el material base para el que la ley de Hertz se cumple. A partir de este

material, se han ido complicando los modelos de comportamiento introducidos en las simulaciones, adaptándolos a materiales que reflejarían un tejido más real y por tanto con un comportamiento mucho más complejo y desconocido.

2.2.1 Material elástico lineal

Los materiales elástico lineales se caracterizan por recuperar su forma inicial, una vez se haya retraído la carga que los deforma. En ellos las tensiones son directamente proporcionales a las deformaciones.

La rigidez de un material representa la capacidad de éste para resistir las deformaciones, quedando definida mediante el módulo de Young, el cual es constante en los materiales elástico lineales. Con el módulo de Young y el coeficiente de Poisson quedarían definidas las propiedades del material.

Como módulo de Young se ha tomado $E=3\text{kPa}$, ya que se está hablando de materiales blandos, es decir, con módulos de Young no muy elevados [10].

Se ha tomado un coeficiente de Poisson de $v=0.5$ (material no compresible), que es el más utilizado para materiales blandos, en los que puede variar entre 0.3 y 0.5 [15].

2.2.2 Material hiperelástico isótropo

Los materiales hiperelásticos se caracterizan por tener un comportamiento no lineal, es decir, el material se rigidiza conforme se deforma. Este comportamiento puede observarse en la *Figura 3*, donde se representa un ensayo uniaxial de dos probetas, para comparar las diferencias entre un material elástico y uno hiperelástico neo-Hookeano.

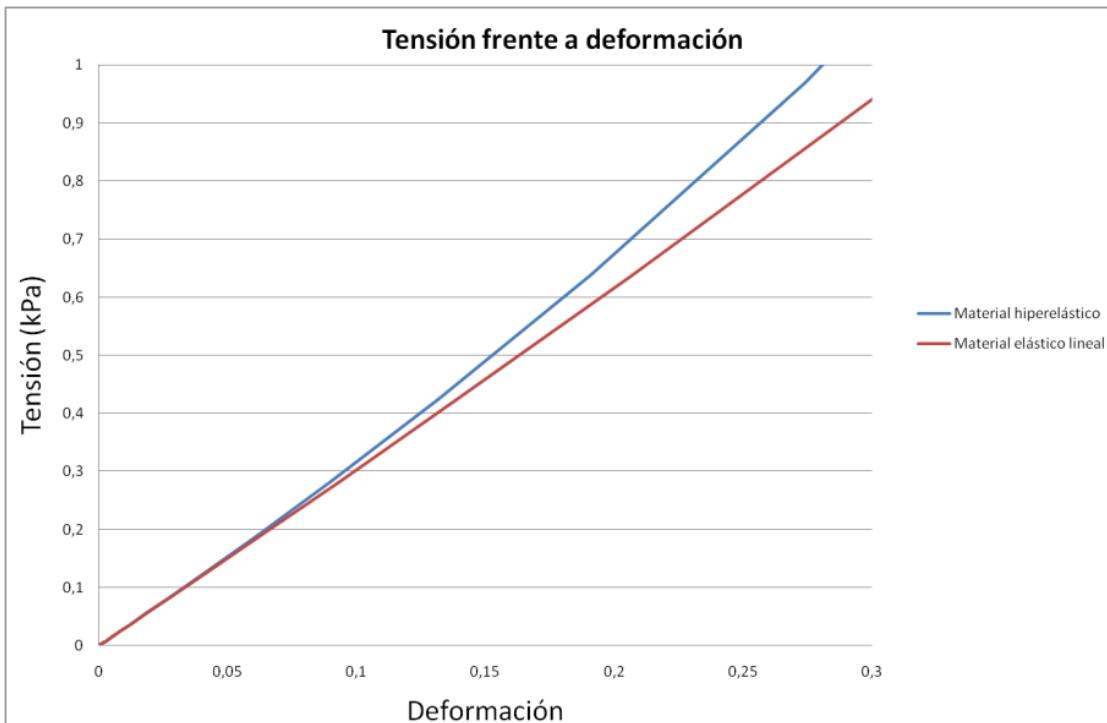


Figura 3: Tensión frente a deformación de un ensayo uniaxial de un modelo de comportamiento elástico lineal y de uno hiperelástico.

Para poder comparar con la muestra elástica, se han calculado el módulo de rigidez (μ) y el módulo de compresibilidad (κ) a partir de los parámetros de la muestra elástica. De esta forma se ha podido definir en Abaqus el modelo neo-Hookeano a partir de esos dos parámetros (ver Anexo 6.2). Para implementar estos parámetros en Abaqus, se ha tenido en cuenta que dicho programa define dos relaciones a partir de los parámetros calculados, las cuales son $C10=\mu/2$ y $D1=2/\kappa$, obteniendo como resultado $C10=0.5$ y $D1=0$.

$$\mu = \frac{E}{2(1 + v)} \quad \kappa = \frac{E}{3(1 - 2v)}$$

Además del modelo neo-Hookeano pueden ser utilizados otros modelos hiperelásticos, como el de Mooney-Rivlin, Ogden y Polynomial, para simular materiales del tipo biológico.

2.2.3 Material hiperelástico anisótropo

Existe una gran cantidad de materiales biológicos formados por varias familias de fibras orientadas de diversas formas embebidas en una matriz formada por colágeno y otros constituyentes. Un ejemplo de estos materiales se encuentra en el tejido arterial, que está compuesto por dos familias de fibras con dos direcciones preferentes.

Este material es más complejo que los anteriores, debido a que para caracterizarlo se ha de definir familias de fibras con una orientación determinada. Además este tejido tiene un fuerte comportamiento no lineal.

Para simular este tipo de material en Abaqus, se ha utilizado el modelo Holzapfel (ver Anexo 6.3), en el que se han definido dos orientaciones de las fibras (a_1 y a_2), con un semiángulo entre ellas de $\gamma=49.98^\circ$, según queda reflejado en la *Figura 4*.

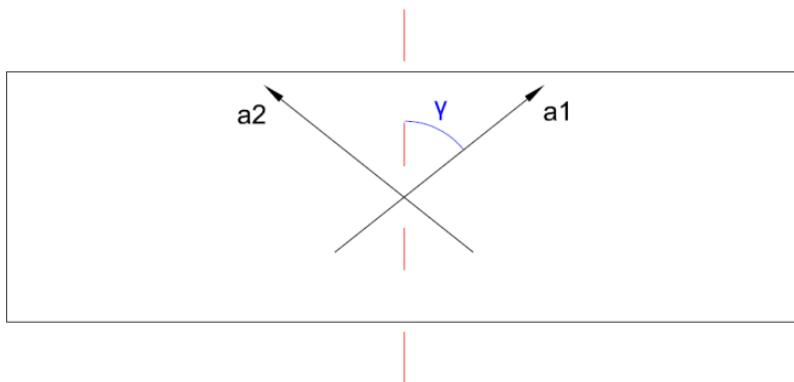


Figura 4: Orientación de las fibras en un modelo de comportamiento hiperelástico anisótropo.

Otros coeficientes que se han tenido que definir, relacionados con la función de densidad de energía, han sido los parámetros k_1 y k_2 , los cuales están relacionados con el comportamiento anisótropo de las fibras. Los módulos de rigidez y de compresibilidad de la matriz, se han definido de igual modo que en el caso del material neo-Hookeano, y por último, se ha definido el grado de anisotropía del material (κ). Tal y como queda representado en la *Figura 5*, dicho parámetro corresponde a la dispersión de las fibras del

material, que puede variar entre $0 < \kappa < 1/3$. El límite más bajo $\kappa=0$ supone que las fibras están perfectamente alineadas y, el límite mayor $\kappa=1/3$ supone que las fibras están orientadas de forma aleatoria y el material se comporta isotrópicamente.

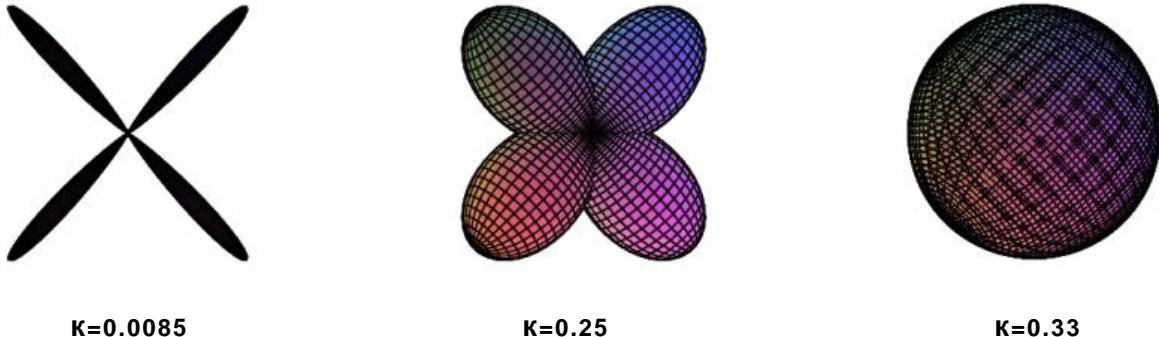


Figura 5: Representación tridimensional de la orientación de las fibras. Imagen extraída de un artículo publicado en el BMES (Biomedical Engineering Society) [16].

Tal y como se muestra en la *tabla 1*, los coeficientes que se utilizaron para realizar la simulación del tejido arterial provienen del artículo Gasser et al.[17], en el que se realizaban unos ensayos de tracción para diversas muestras extraídas de una arteria.

γ	C10	D	k1	k2	κ
49.98°	3.82kPa	0	996.6kPa	524.6	0.226

Tabla 1: Coeficientes utilizados en la simulación de tejido arterial.

2.3 Modelo 2D axisimétrico

A excepción del tipo de material de las muestras utilizadas, el resto de parámetros definidos para cada simulación son casi idénticos. El modelo se ha generado con axisimetría (ver Anexo 6.4) para reducir el coste computacional y el tiempo de cálculo. La geometría, condiciones de contorno, interacción entre el indentador y la muestra y parte del mallado, se han mantenido para todas las simulaciones en 2D.

2.3.1 Geometría

Para representar el indentador, se ha trazado en el plano XY un semicírculo de radio $R=1.125 \mu\text{m}$, y para representar la muestra de material, un rectángulo de anchura $a=100 \mu\text{m}$ y de altura $h=100 \mu\text{m}$, entre los cuales se ha dejado una distancia infinitesimal para evitar el contacto inicial entre ambos. Esto queda reflejado en la *Figura 6*, en la que se ha representado el eje de axisimetría en color rojo.

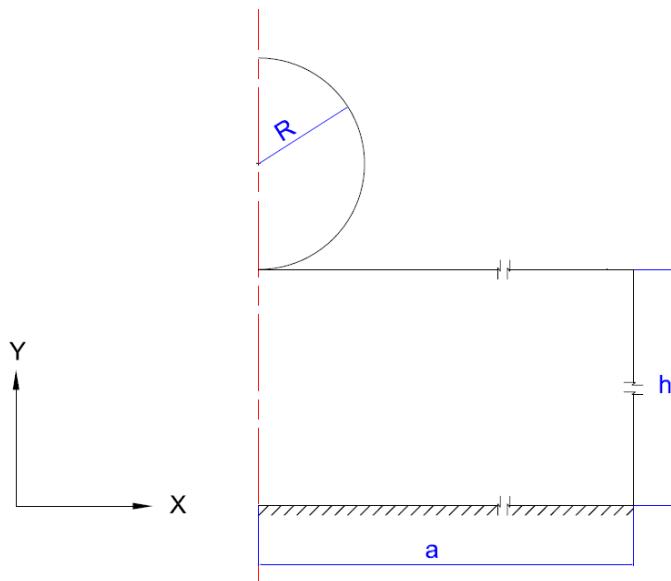


Figura 6: Geometría del indentador y la muestra de un modelo axisimétrico de un ensayo de nanoindentación cuyo eje de axisimetría se muestra en rojo.

2.3.2 Condiciones de contorno

En el lateral izquierdo, donde se encuentra el eje de axisimetría, se ha establecido la condición de simetría tanto para el indentador como para la muestra, ya que para reducir al máximo el número de cálculos, se ha representado la mitad del indentador y de la muestra.

En la cara inferior de la muestra se han limitado los desplazamientos en los tres ejes, de esta forma, se simularía la situación de la muestra situada encima de la placa en la que se va a realizar el ensayo.

Por último, se ha impuesto un pequeño desplazamiento δ de $0.5\mu\text{m}$ en el eje Y al indentador, que simula la indentación sobre la muestra a ensayar. Esto es debido a que se está tratando con pequeñas deformaciones, y por encima de indentaciones de $0.5\mu\text{m}$ las deformaciones serían excesivamente grandes.

2.3.3 Interacción

Se ha establecido la superficie de contacto entre el indentador y la muestra sin fricción, ya que, como se observa en la Figura 7, los resultados no varían a pesar de aplicar un coeficiente de fricción $\mu=0.03-0.1$ considerado adecuado para materiales biológicos [18]. Se ha establecido la superficie exterior del indentador como maestra, y la superficie de la cara superior de la muestra como esclava.

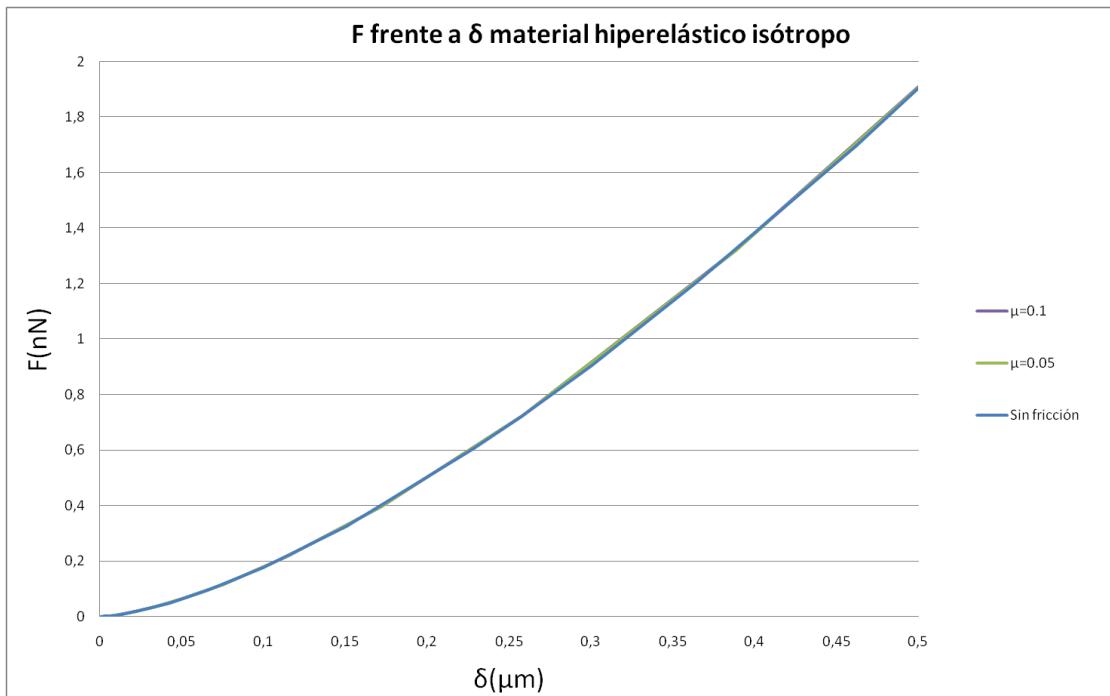


Figura 7: Comparativa de la fuerza frente al desplazamiento del indentador para diferentes coeficientes de fricción.

2.3.4 Mallado

Tras realizar un exhaustivo análisis del mallado (ver anexo 6.5), se ha concluido que el tipo de elemento más adecuado a utilizar eran cuadrángulos estructurados (Figura 8) y que el elemento idóneo era el CAX4 (C=continuo, AX=axisimétrico, 4=Nodos).

Se han generado en el indentador 2693 elementos, y en el caso de la muestra 7818 elementos. Hay que tener en cuenta que el tamaño de los elementos, a lo largo de toda la muestra, es mucho mayor que en la zona de contacto entre el indentador y la muestra, ya que es la zona que se va a estudiar posteriormente.

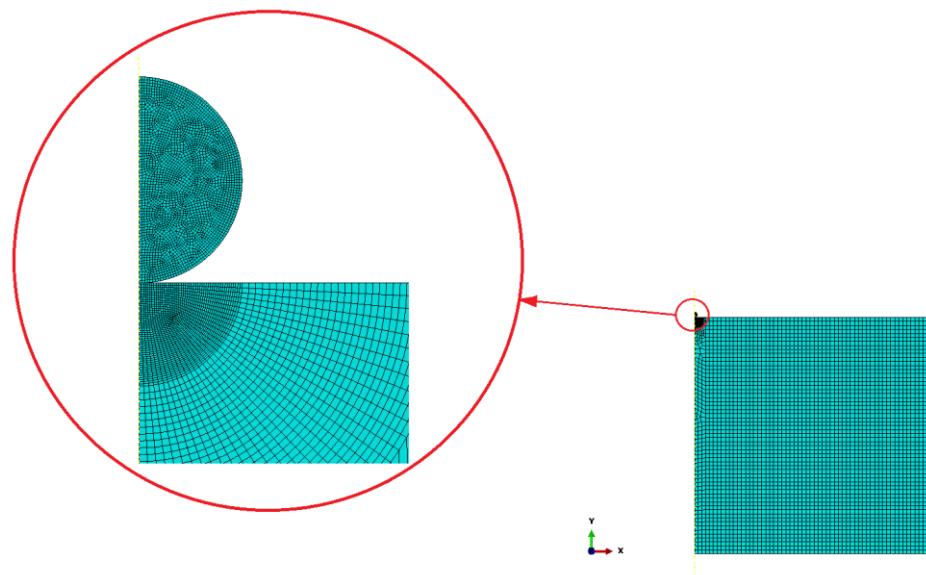


Figura 8: Mallado modelo 2D axisimétrico.

2.3.5 Simulación

Para llevar a cabo las simulaciones, se ha programado el código necesario mediante comandos en Python en el programa Abaqus/CAE 6.12 (ver Anexo 6.6).

Esta técnica permite parametrizar el modelo en función de los parámetros geométricos elegidos. De esta forma se puede, por ejemplo, variar la altura de la muestra para ver su influencia cambiando únicamente un dato numérico, en vez de tener que realizar un modelo totalmente nuevo. En definitiva, se ha rentabilizado el tiempo evitando repetir el proceso completo para cada caso estudiado.

2.4 Modelo 3D

Como se ha explicado en el apartado anterior, se ha realizado un modelo 2D axisimétrico para evitar el tiempo de cálculo que supondría hacer el mismo modelo en 3D. Sin embargo, la estructura del material hipereástico anisótropo exige tener que realizar un modelo en 3D, debido a que las fibras pueden estar orientadas en las 3 direcciones. Por lo tanto, mediante un modelo en 3D la muestra de material fibrado quedaría simulada de manera más cercana a la realidad.

2.4.1 Geometría, condiciones de contorno y mallado

La geometría utilizada es la misma que en el caso 2D. Las condiciones de contorno también son las mismas, eliminando las condiciones de simetría de la muestra y el indentador, puesto que se simula la geometría completa.

En el caso del mallado se han utilizado hexaedros dominados mediante la técnica libre, debido a que no era posible aplicar la estructurada. Hay que tener en cuenta que, para refinar la malla en el eje de la altura de la muestra, es necesario crear capas (*Figura 9*), lo que aumenta notablemente el coste computacional y con ello también el tiempo de cálculo.

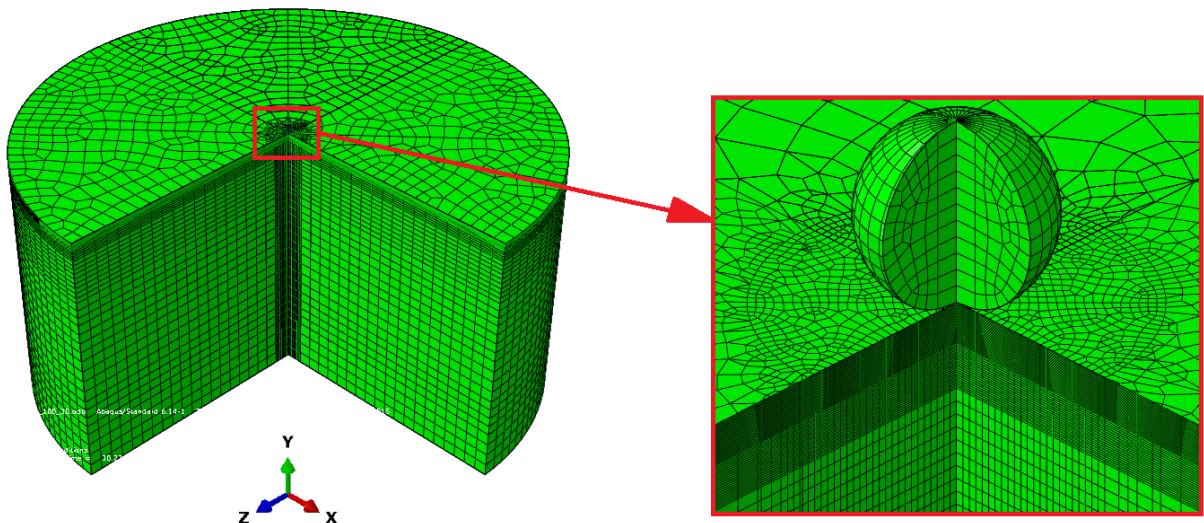


Figura 9: Mallado modelo 3D con un corte para poder visualizar las capas generadas en el eje Y.

3 Resultados

Las simulaciones reflejan la diferente respuesta que presentan los modelos de comportamiento estudiados, ante una pequeña profundidad de indentación δ de $0.5\mu\text{m}$ (*Figura 10*).

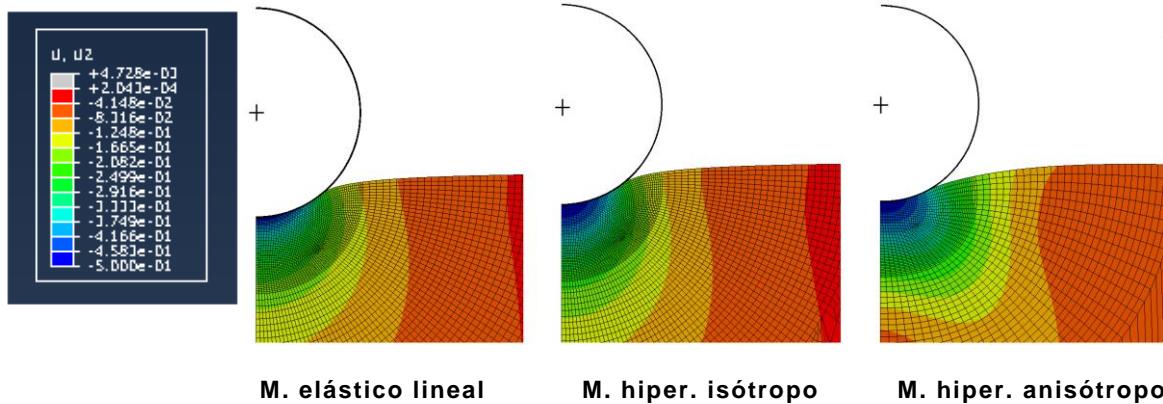


Figura 10: Distribución del desplazamiento en el eje Y para los modelos de comportamiento simulados.

Esta profundidad de indentación es la misma para todas las muestras, sin embargo, el comportamiento que sufren es totalmente distinto. Si se compara el material elástico lineal con el hiperelástico isótropo, se observa que en éste último los desplazamientos son mayores. En el caso del material hiperelástico anisótropo se observa, como debido a la influencia de las fibras, se genera una distribución diferente a la de los otros dos casos.

3.1 Material elástico lineal

Tras realizar la simulación con el modelo de comportamiento elástico lineal, con las propiedades que se han definido anteriormente, se obtienen las distribuciones mostradas en la *Figura 11*.

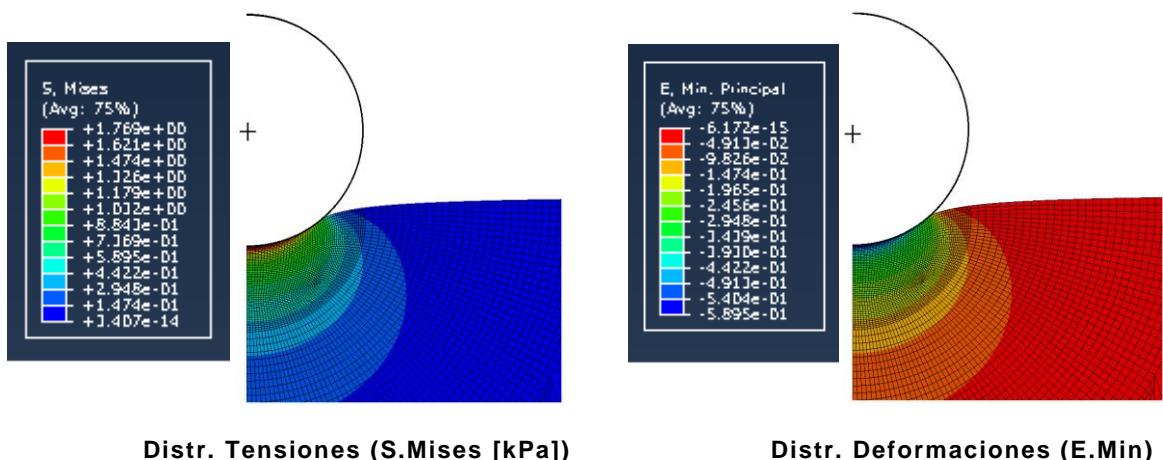


Figura 11: Distribución de tensiones y deformaciones para un modelo de comportamiento elástico lineal.

En las distribuciones se observa que, tanto las tensiones como las deformaciones mayores, se generan en la zona de contacto entre el indentador y la muestra.

Si se compara la fuerza de reacción sobre el indentador, respecto a la profundidad de indentación con el modelo teórico de Hertz, se obtienen las siguientes curvas mostradas en la *Figura 12*.

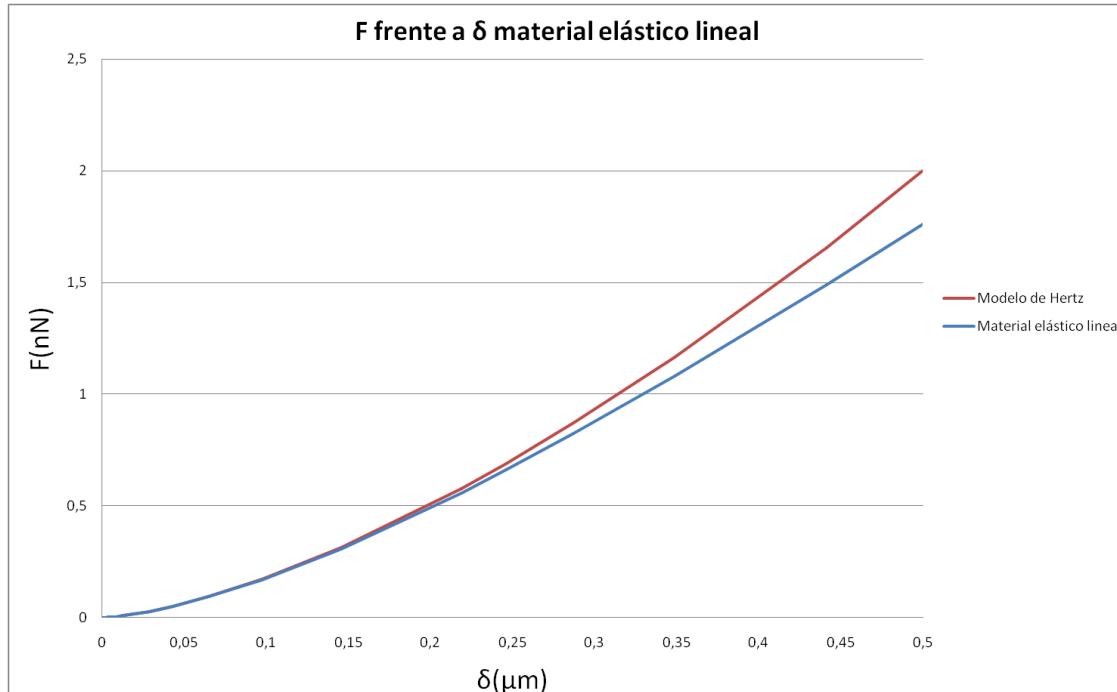


Figura 12: Fuerza reacción frente a la profundidad de indentación del modelo teórico y de elementos finitos.

Como se ve en la figura anterior, para un desplazamiento del indentador comprendido entre 0 y $0.2\mu\text{m}$ los resultados teóricos del modelo de Hertz coinciden con los de la simulación. Sin embargo, a partir de $0.2\mu\text{m}$ conforme la profundidad de indentación aumenta las diferencias entre el modelo teórico y el de elementos finitos también lo hacen.

Calculando el módulo de Young a partir de la simulación mediante la fórmula teórica de Hertz, y comparando con el propio modelo (*Figura 13*) se obtiene:

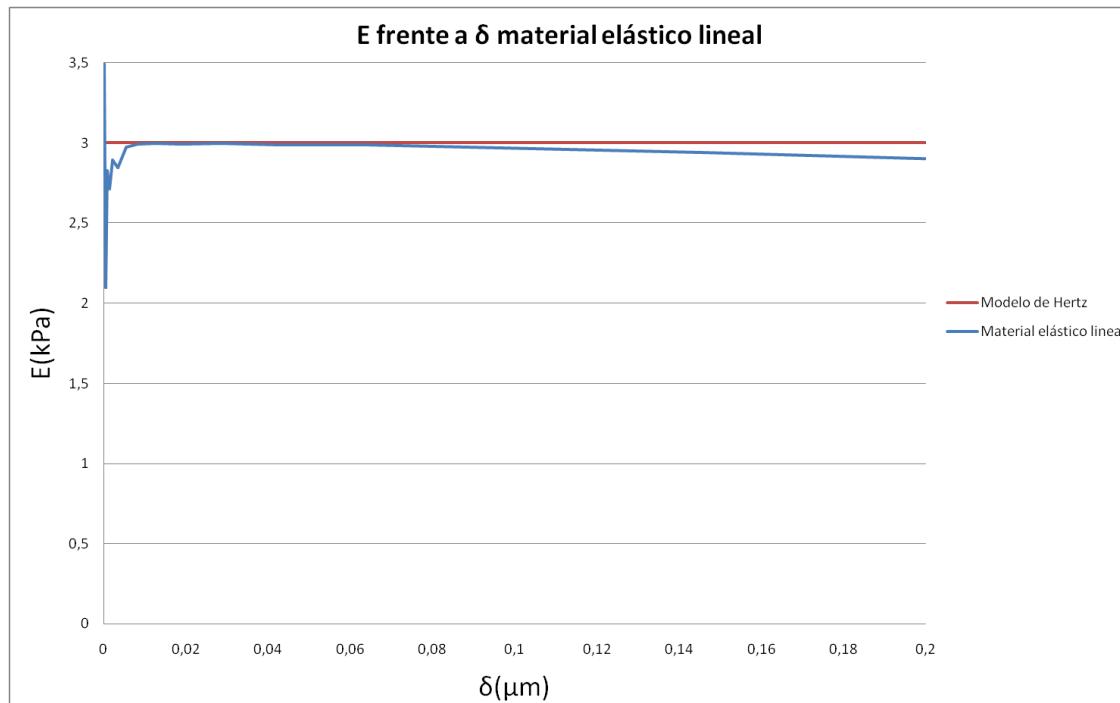


Figura 13: Módulo de Young para cada δ . Comparativa entre el teórico y el de elementos finitos.

Al comienzo de la gráfica ($0 < \delta < 0.005\mu\text{m}$), se aprecian unos resultados del módulo de Young muy inestables, esto es debido a que en dicho instante se produce el contacto entre el indentador y la muestra.

En la gráfica se observa cómo el modelo de Hertz hace una sobreestimación del módulo de Young para desplazamientos del indentador mayores que $\delta = 0.08\mu\text{m}$, esto conllevaría a una caracterización errónea del material analizado, por lo que habría que hacer una pequeña corrección sobre el modelo de Hertz.

Definiendo la rigidez aparente como cociente entre K_H^* y K [13], donde:

$$K_H^* = \frac{3 F_{EF}}{4 R^{1/2} \delta^{3/2}} \quad K = \frac{E}{(1 - \nu^2)}$$

y representando dicho cociente frente al desplazamiento del indentador, se obtiene la ecuación de la curva a partir de la cual se ha calculado la corrección necesaria (Figura 14).

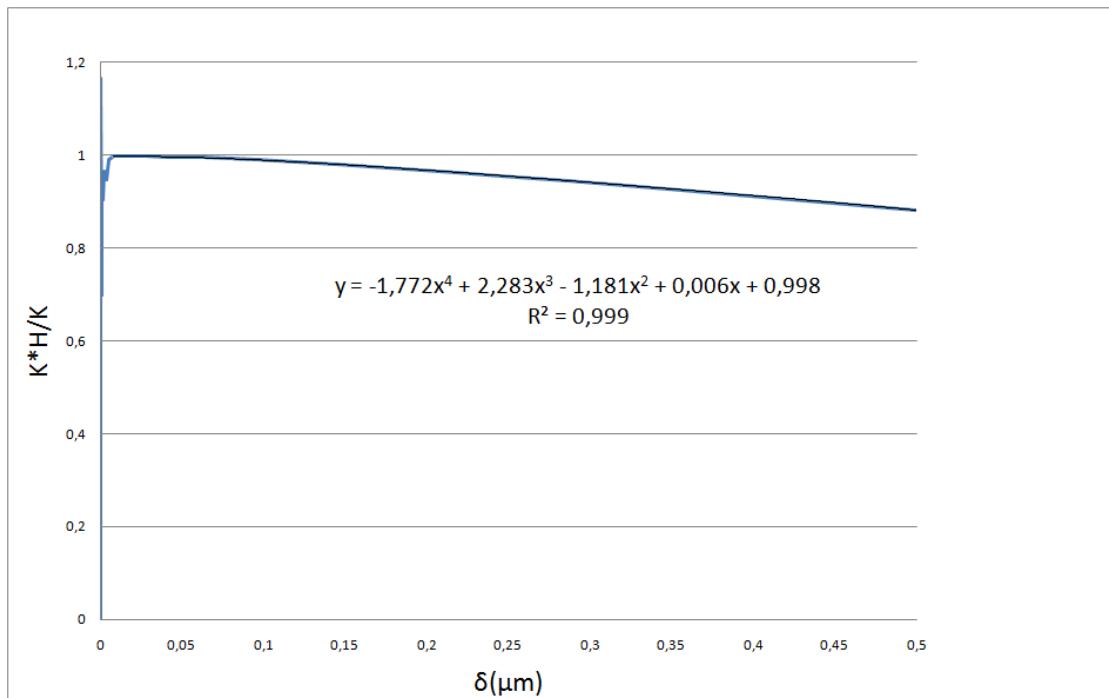


Figura 14: Rigidez aparente frente a δ .

Adimensionalizando la ecuación en función del parámetro $\chi = \delta/R$, se obtiene el siguiente factor de corrección:

$$F_c = -2.838\chi^4 + 3.250\chi^3 - 1.494\chi^2 + 0.006\chi + 0.998$$

Aplicando dicho factor al modelo de Hertz, se ve como la curva teórica y la de elementos finitos coinciden sin ningún error (Figura 15).

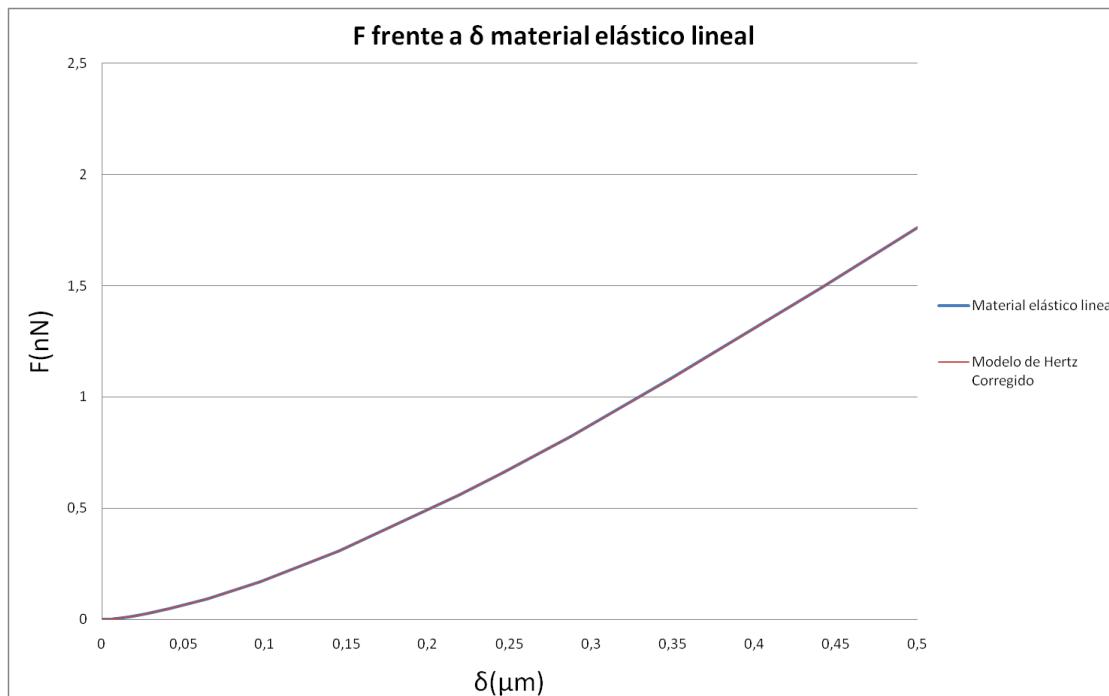


Figura 15: Fuerza frente a δ . Comparación modelo de elementos finitos con el teórico de Hertz.

Tal y como se observa en la *Figura 16*, la corrección anterior sería aplicable al modelo de Hertz para materiales elástico lineales con módulos de Young comprendidos entre un rango de 1kPa y 1000kPa. Hay que tener en cuenta que el rango anterior engloba todos los materiales considerados blandos.

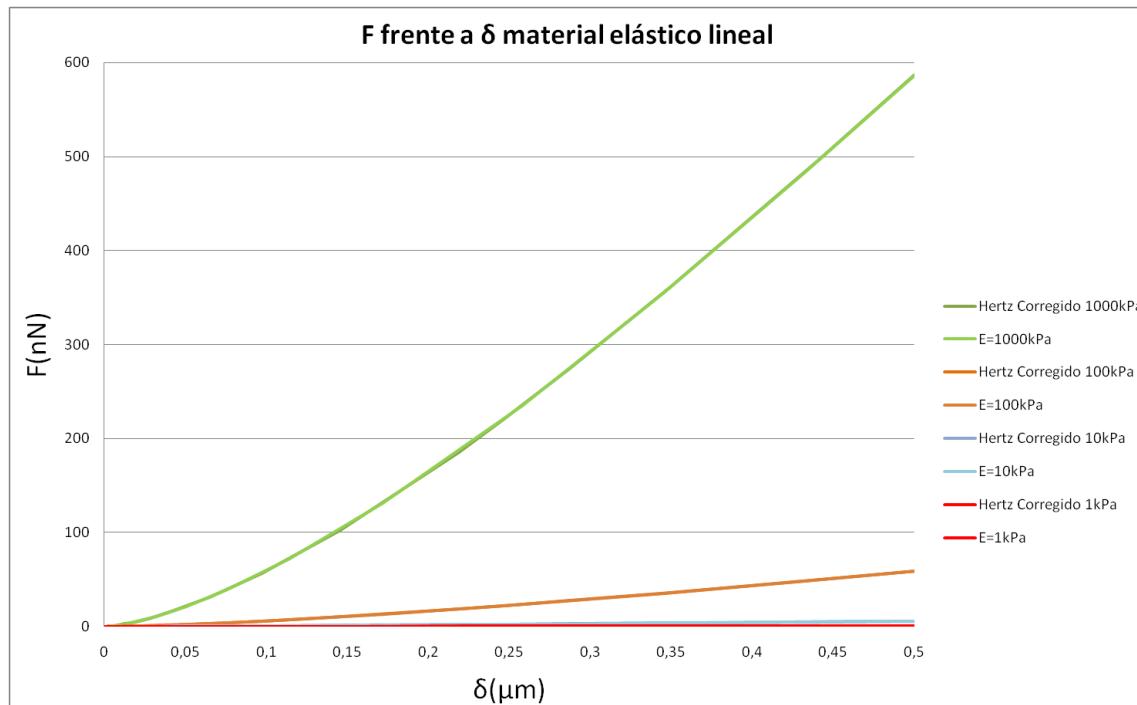


Figura 16: Fuerza frente a δ . Comparación modelo de elementos finitos con el teórico de Hertz corregido, para distintos módulos de Young.

3.2 Material hiperelástico isótropo

Para el caso del modelo de comportamiento neo-Hookeano (hiperelástico isótropo) las distribuciones obtenidas son las que se muestran en la *Figura 17*.

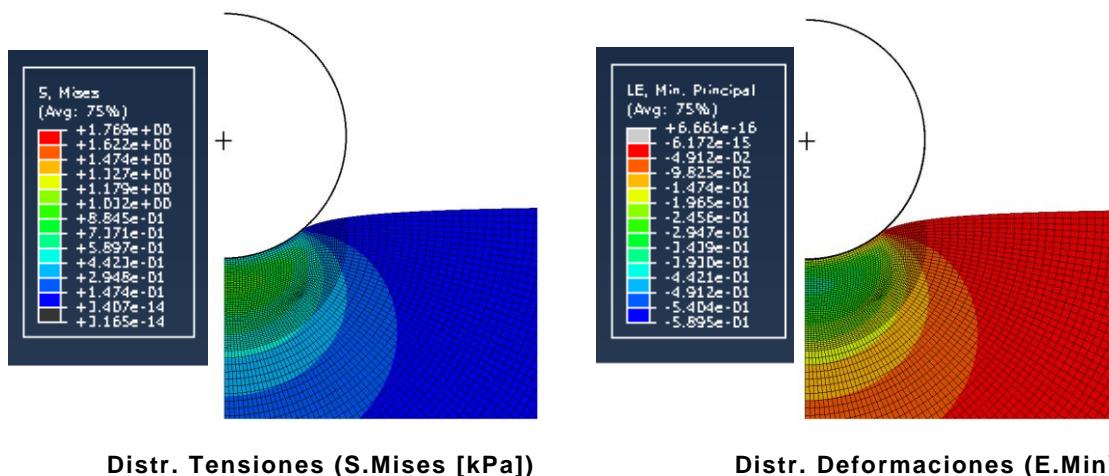


Figura 17: Distribución de tensiones y deformaciones para un modelo de comportamiento hiperelástico isótropo.

Comparando con el modelo de comportamiento elástico lineal, se observa que las tensiones y deformaciones máximas no se generan en la zona de contacto entre el indentador y la muestra, si no que lo hacen ligeramente más abajo, debido a la rigidización del material hiperelástico.

Si se compara la fuerza de reacción sobre el indentador, respecto a la profundidad de indentación con el modelo teórico de Hertz, y con el modelo de comportamiento elástico lineal (*Figura 18*), se observa que modelo de comportamiento neo-Hookeano tiene un comportamiento más cercano al que dicta el modelo de Hertz. Sin embargo, sigue habiendo ciertas diferencias para desplazamientos del indentador mayores de $\delta=0.2\mu\text{m}$.

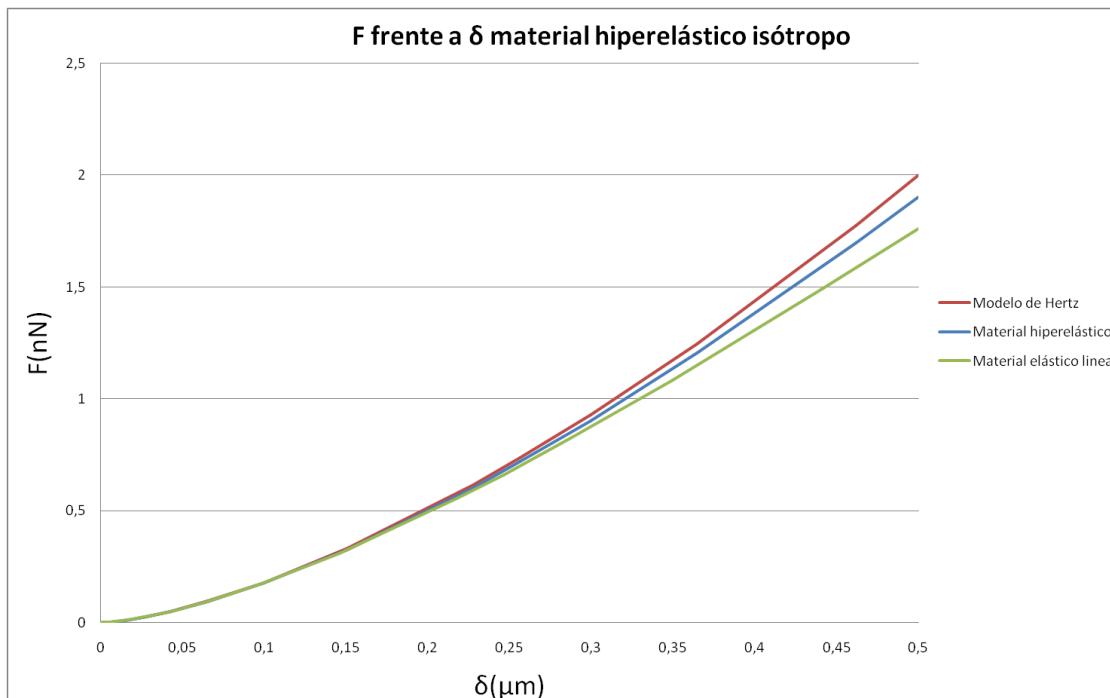


Figura 18: Fuerza frente a δ de los dos modelos de comportamiento analizados y del modelo de Hertz.

Si se procede del mismo modo que en el caso anterior, se obtendría el siguiente factor de corrección:

$$F_c = -4.145\chi^4 + 4.366\chi^3 - 1.621\chi^2 + 0.135\chi + 0.989$$

Como se observa en la *Figura 19*, este factor aproxima la curva de Hertz a la de elementos finitos del material neo-Hookeano, para un rango de módulos de Young comprendidos entre 1 kPa y 1000 kPa.

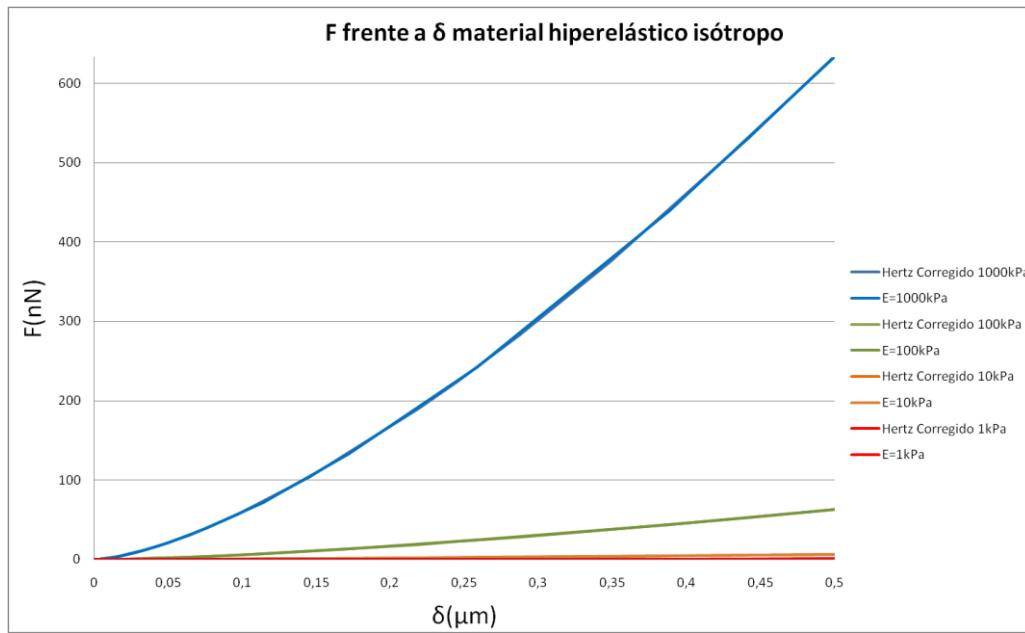


Figura 19: Fuerza frente a δ . Comparación modelo de elementos finitos con el teórico de Hertz corregido, para distintos módulos de Young.

3.3 Material hiperelástico anisótropo

Tal como se indicó anteriormente, se realizó un modelo 3D para el caso del modelo de comportamiento fibrado, debido a la distribución espacial de las fibras. Si se compara la distribución de tensiones y deformaciones para el caso 2D axisimétrico y 3D se ve que hay mucha diferencia entre ambos modelos (*Figura 20*).

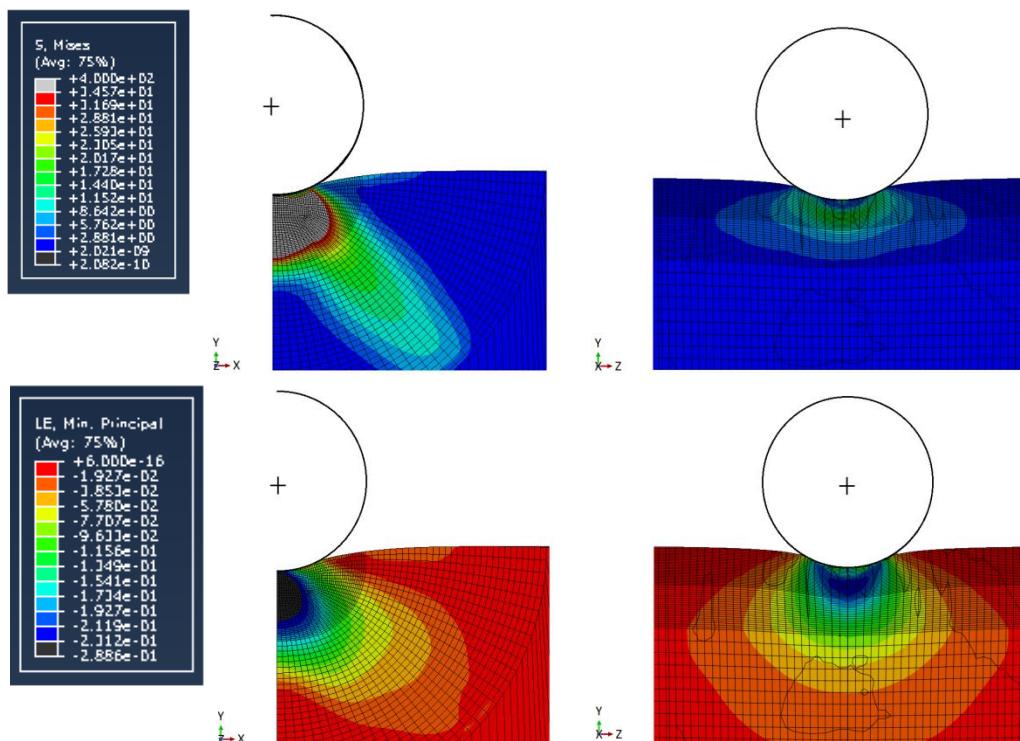


Figura 20: Distribución de tensiones [kPa] y deformaciones del modelo 2D y 3D para un modelo de comportamiento fibrado.

Por lo tanto, es de esperar que al presentar la fuerza de reacción frente al desplazamiento del indentador también existan grandes diferencias (*Figura 21*).

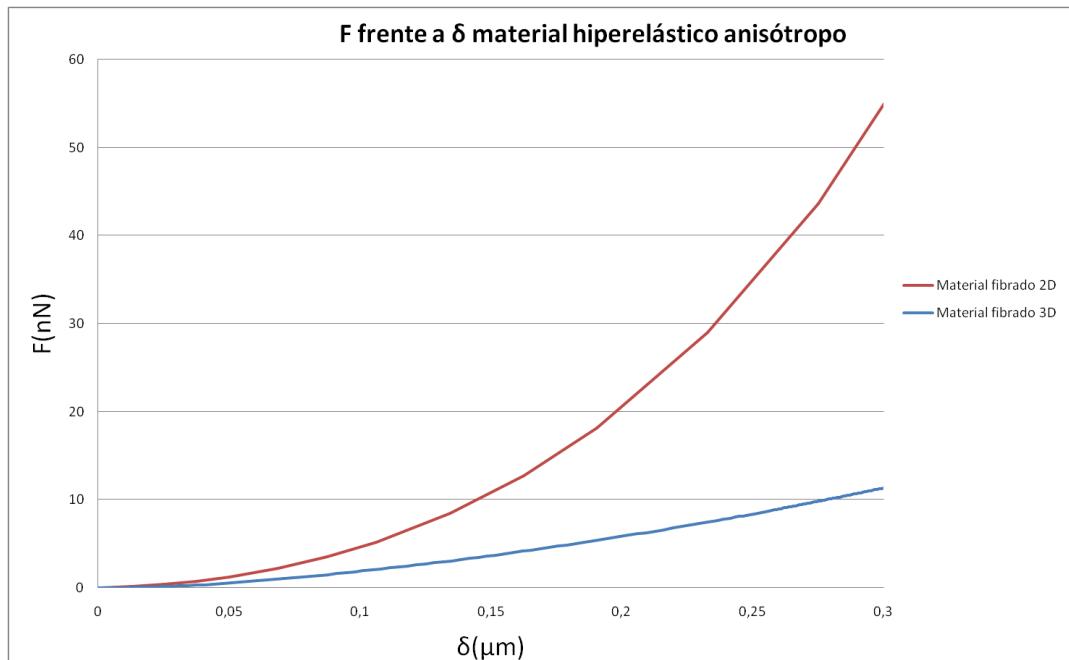


Figura 21: Fuerza frente a profundidad de indentación del modelo 2D y 3D para un modelo de comportamiento fibrado.

Hasta el momento, se ha considerado que las fibras que forman el modelo de comportamiento forman un semiángulo de $\gamma=49.98^\circ$ respecto al eje Y. Sin embargo, para conocer cómo afecta realmente la orientación de las fibras, se debería variar el ángulo entre las dos familias de fibras que componen el modelo de comportamiento. Tras realizar varias simulaciones con el modelo axisimétrico, para distintas orientaciones de fibras (*Figura 22*), se observó que la orientación tiene una gran influencia de cara a caracterizar el material, ya que según su orientación actúa únicamente una familia de fibras (caso 90°), ninguna (caso 180°) o ambas (caso 49.98°).

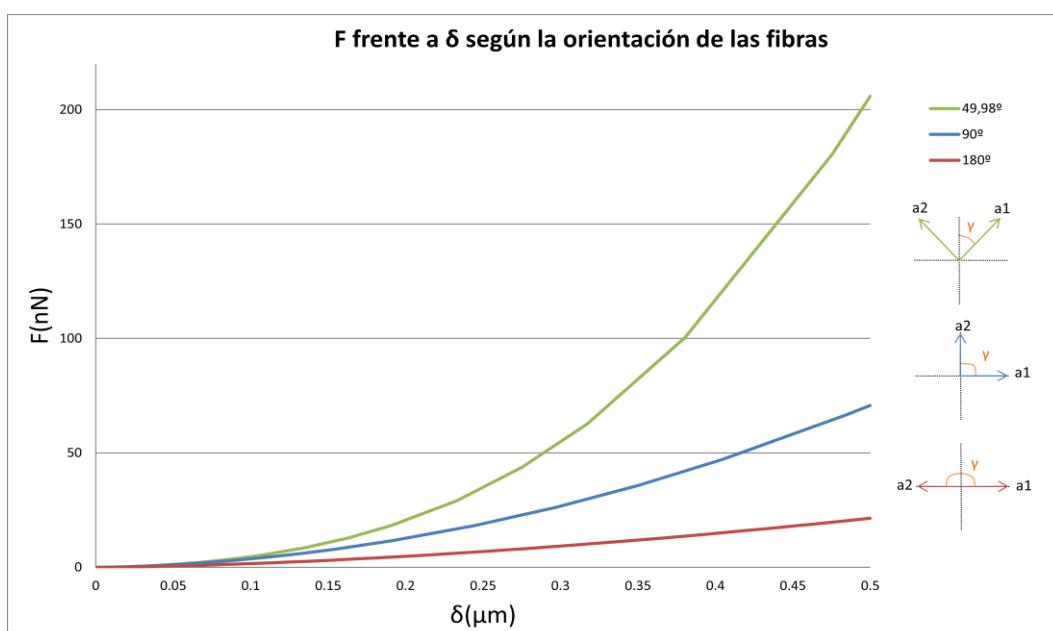


Figura 22: Fuerza frente a profundidad de indentación según la orientación de las fibras.

Tal como se observa en la figura anterior, el material tiene una fuerte dependencia de la orientación de las fibras. Esto supone que a la hora de realizar un experimento con este tipo de materiales, es esencial conocer cuál es la orientación exacta de las fibras de la muestra que se ha tomado, así como la orientación en la que se sitúa la muestra para hacer el experimento.

Para poder comparar con los modelos de comportamiento anteriores hay que conocer el módulo de Young y el coeficiente de Poisson equivalente del modelo de comportamiento arterial, ya que este tipo de modelos de comportamiento se definen en base a distintos parámetros. Para ello, se realizó un ensayo uniaxial de una probeta para obtener la tensión y deformación del modelo de comportamiento, conforme estaba siendo sometido a tracción, y así poder obtener el módulo de Young inicial y el coeficiente de Poisson inicial. Al tratarse de un material hiperelástico, conforme se deforma más se rigidiza, lo que se traduce en un aumento de su módulo de Young. Tras realizar la simulación del ensayo uniaxial, se obtuvo que el módulo de Young era $E=24.42\text{kPa}$ y el coeficiente de Poisson $\nu=0.5$.

Si comparamos las distribuciones de tensión y deformación con el resto de modelos de comportamiento, se obtienen las distribuciones que se muestran en la *Figura 23*.

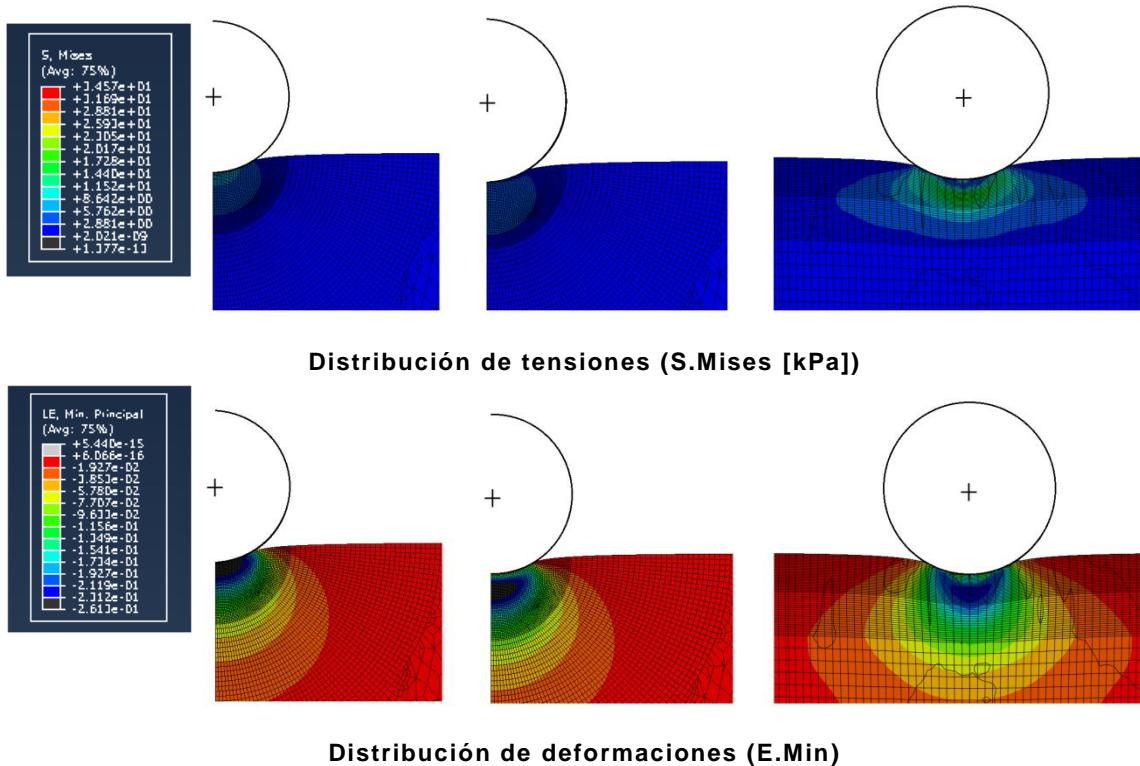


Figura 23: Comparativa distribuciones para los distintos modelos de comportamiento cuando δ es $0.3\mu\text{m}$.

Si se compara el modelo de comportamiento anisótropo, con el resto de modelos, se observa cómo se asemeja únicamente para pequeños desplazamientos ($\delta=0.05\mu\text{m}$), ya que dicho modelo tiene un fuerte comportamiento no lineal. Ésto queda claramente reflejado en la *Figura 24*.

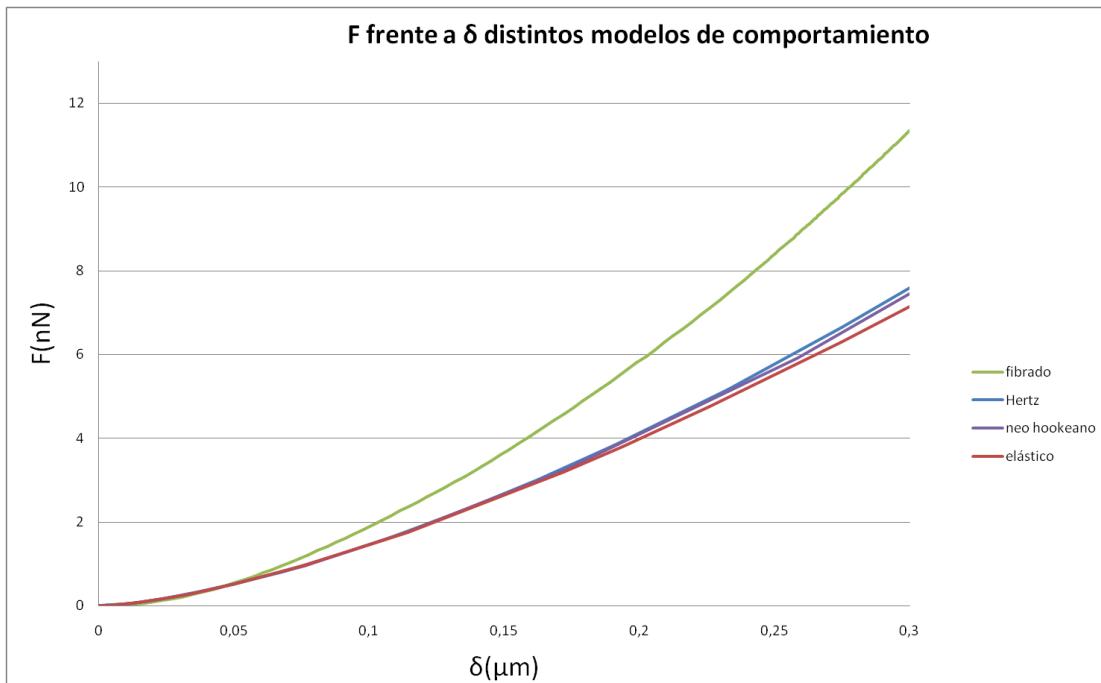


Figura 24: Comparativa fuerza frente a profundidad de indentación de todos los modelos de comportamiento simulados.

Para el caso del modelo de comportamiento fibrado, procediendo de forma análoga a los otros dos casos, también se podría corregir el modelo de Hertz para adaptarlo.

$$F_c = -706.877\chi^4 + 533.366\chi^3 - 147.060\chi^2 + 18.506\chi + 0.478$$

Como se observa en la Figura 25, tras aplicar el factor de corrección anterior, la curva del modelo teórico y el arterial se asemejan.

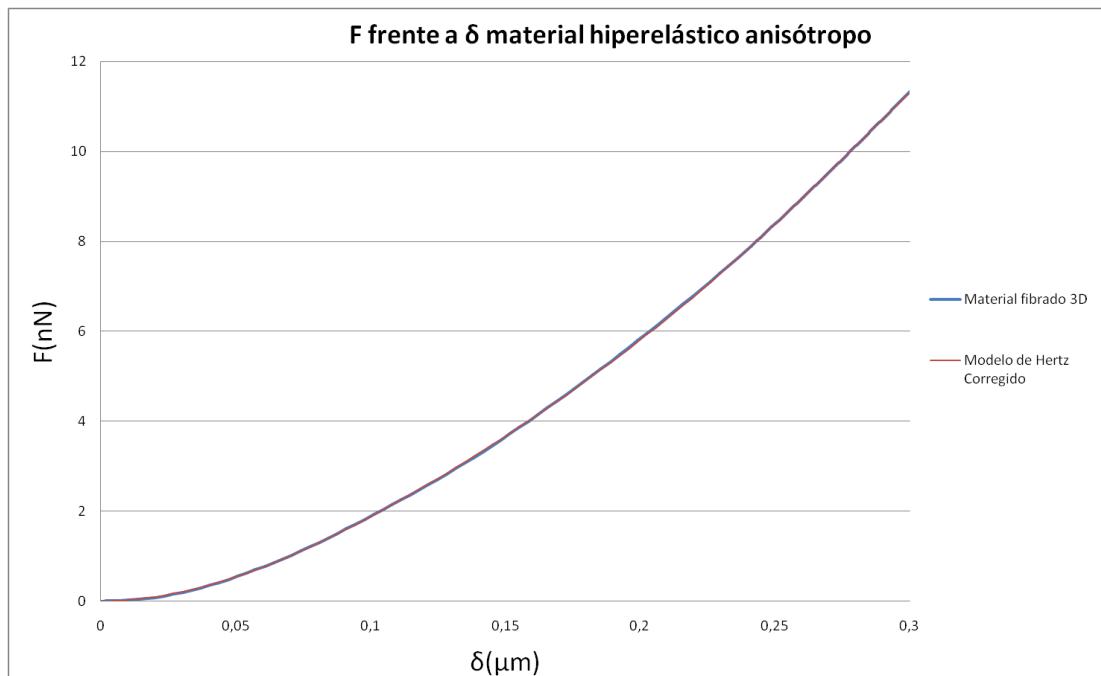


Figura 25: Corrección del modelo de Hertz para el modelo de comportamiento hiperelástico anisótropo.

4 Conclusiones y discusión

Atendiendo al ensayo de nanoindentación, se ha visto como con el manejo de un programa de elementos finitos, se puede proceder a realizar una simulación de un ensayo de nanoindentación. Este método permite el estudio bajo diferentes condiciones, y sirve de complemento para los métodos experimentales.

Si se comparan los distintos modelos de comportamiento analizados, se observa que el hiperelástico isótropo se caracteriza por tener un comportamiento no lineal. En el caso del material hiperelástico anisótropo, la orientación de las fibras que posee es un factor determinante para llevar a cabo su caracterización, ya que según se encuentran orientadas las fibras el comportamiento del material varía considerablemente.

Por último, para poder comparar con el modelo de Hertz hay que tener en cuenta varias consideraciones. La teoría de Hertz se puede aplicar a materiales con módulos de Young no muy elevados, la altura de la muestra tiene que tener un tamaño como mínimo de 100 μm para indentadores con un radio de 1.125 μm , y el radio de la muestra a analizar debe ser de 100 μm o más. También se ha observado que el modelo de Hertz se asemeja al de las simulaciones para pequeños desplazamientos del indentador, comprendidos entre 0 y 0.2 μm , pero conforme los desplazamientos son mayores, y con ello las deformaciones, los resultados del modelo teórico distan considerablemente de la simulación, especialmente para el caso del modelo de comportamiento fibrado. Sin embargo, esto puede ser subsanado mediante la aplicación de diversos factores de corrección según el modelo de comportamiento analizado. Para el caso elástico lineal y el hiperelástico isótropo, el factor de corrección aplicado al modelo de Hertz, sería adecuado para módulos de Young comprendidos entre 1 y 1000kPa, es decir, para materiales blandos. Si se comparan los factores de corrección de los tres casos, se observa que el modelo de comportamiento elástico lineal e hiperelástico isótropo, tienen factores de corrección similares, ya que estos dos modelos tienen ciertas similitudes en su comportamiento. Sin embargo, para el caso hiperelástico anisótropo la corrección a aplicar es muy distinta a las anteriores, debido a la gran influencia que tienen las familias de fibras que lo forman.

5 Bibliografía

5.1 Artículos

[3] Finite element modelling of nanoindentation based methods for mechanical properties of cells

Jinju Chen, Guoxing Lu

Journal of Biomechanics – August 2013

[4] Atomic force microscopy-based single-cell indentation: Experimentation and Finite element simulation.

Hamid Ladjal, Jean-Luc Hanus, Anand Pillarisetti, Carol Keefer, A. Ferreira, Jaydev Desai.

The 2009 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems

[5] Analysis of Indentation: Implications for Measuring Mechanical Properties With Atomic Force Microscopy

K. D. Costa, F. C. P. Yin

Journal of Biomechanical Engineering - October 1999

[6] Determination of the elastic moduli of thin samples and adherent cells using conical atomic force microscope tips

Núria Gavara, Richard S. Chadwick

Nature nanotechnology - September 2012

[7] Regular Pyramid Punch Problem

G. G. Bilodeau

Journal of Applied Mechanics - September 1992

[8] Probing mechanical properties of living cells by atomic force microscopy with blunted pyramidal cantilever tips

Félix Rico, Pere Roca-Cusachs, Núria Gavara, Ramon Farré, Mar Rotger, and Daniel Navajas

American Physical Society, PHYSICAL REVIEW E - August 2005

[9] Spherical indentation of soft matter beyond the Hertzian regime: numerical and experimental validation of hyperelastic models

David C. Lin, David I. Shreiber, Emilios K. Dimitriadis, and Ferenc Horkay

Biomech Model Mechanobiol - 2009

[10] Determining the elastic modulus of biological samples using atomic force microscopy.

JPK Instruments AG

[11] Effects of Gel Thickness on Microscopic Indentation Measurements of Gel Modulus

Rong Long, Matthew S. Hall, Mingming Wu, and Chung-Yuen Hui

Biophysical Journal - August 2011

[12] Determination of elastic moduli of thin layers of soft material using the atomic force

Emilios K. Dimitriadis, Ferenc Horkay, Julia Maresca, Bechara Kachar, and Richard S. Chadwick
Biophysical Journal - May 2002

[14] If Cell Mechanics Can Be Described by Elastic Modulus: Study of Different Models and Probes Used in Indentation Experiments

Nataliia Guz, Maxim Dokukin, Vivekanand Kalaparthi, and Igor Sokolov
Biophysical Journal - August 2014

[16] Automated Estimation of Collagen Fibre Dispersion in the Dermis and its Contribution to the Anisotropic Behaviour of Skin

Asling Ni'Annaidh, Karine Bruye'Re, Michel Destrade, Michael D.Gilchrist, Corrado Maurini, Melanie Otte'Nio, and Giuseppe Saccomandi.
BMES (Biomedical Engineering Society) – August 2012

[17] Anisotropic hyperelastic modeling of arterial layers.

T. Christian Gasser, Ray W Ogden, Gerhard A Holzapfel.
Journal of the Royal Society - February 2006

[18] Macroscopic Friction Coefficient Measurements on Living Endothelial Cells

Alison C. Dunn, Toral D. Zaveri, Benjamin G. Keselowsky, W. Gregory Sawyer
Springer Science+Business Media – April 2007

5.2 Otros

[1] Current Microscopy Contributions to Advances in Science and Technology
A. Méndez-Vilas (Ed.)

Vol.1: Pages 528-532. **Atomic force microscopy: Studying mechanical properties of a cell.**

J. Malohlava, H. Zapletalova, K. Tomankova and H. Kolarova
2012 FORMATEX

[2] Design of Artificial Human Joints and Organs. Chapter 2: Mechanical Properties of Biological Materials.

Pal Subrata. Ed. Springer.

[13] Computational Modelling of Single Cell Probing. Chapter 3: Atomic Force Microscopy.

Karen Coghlan, B.Eng.

A thesis submitted to the National University of Ireland.

Department of Mechanical and biomedical Engineering, National University of Ireland, Galway – September 2010

[15] Introduction to cell Mechanics and Mechanobiology

Christopher R.Jacobs, Hayden Huang, Ronald Y. Kwon
Ed. GS (Garland Science)

Abaqus 6.12 Scripting User's Manual

Abaqus 6.10 Scripting Reference Manual

6 Anexos

6.1 Dimensionamiento de la muestra

Para conocer el tamaño óptimo de la muestra, sin que afecten las condiciones de contorno de sus límites, se han realizado simulaciones variando la geometría. De esta forma, se puede observar a partir de qué dimensiones las condiciones de contorno afectan lo suficiente como para interferir en los resultados.

Teniendo en cuenta que el radio del indentador es de $1.125\mu\text{m}$, ya que es el tamaño común que se utiliza en indentadores para los ensayos de AMF, y tras realizar las simulaciones para una altura de 2, 5, 10, 50, 100 y $1000\mu\text{m}$ sobre un modelo de comportamiento neo-Hookeano, se observan los siguientes resultados mostrados en la *Figura 26*.

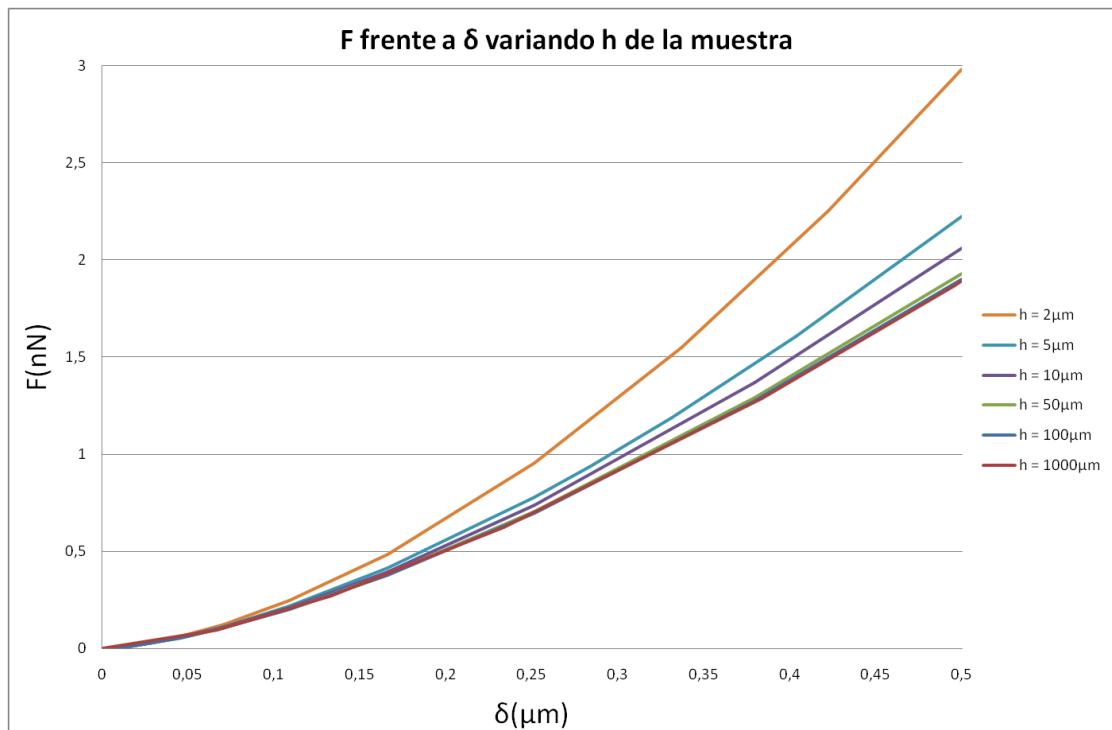


Figura 26: Comparación entre la fuerza de reacción en el indentador y la profundidad de indentación para distintas alturas de la muestra a analizar.

Se puede apreciar que conforme se disminuye la altura de la muestra, la fuerza de reacción en el indentador aumenta. Esto es debido a que las paredes de la muestra interfieren en dicha fuerza, ya que se generan tensiones en las zonas cercanas a las condiciones de contorno (*Figura 27*).

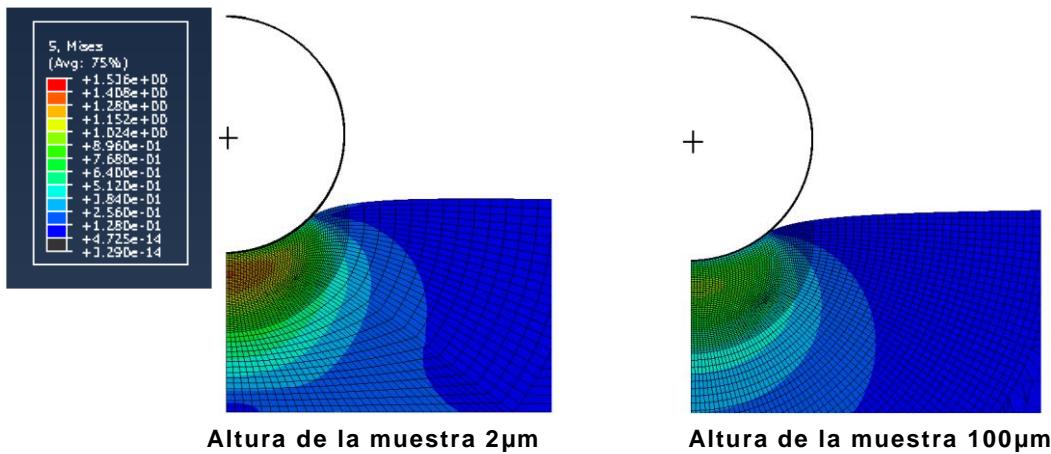


Figura 27: Comparación S.Mises [kPa] entre dos muestras de diferente altura.

Si nos fijamos en la fuerza que se ejerce en la muestra para $\delta=0.5\mu\text{m}$ se obtiene la siguiente curva (Figura 28).

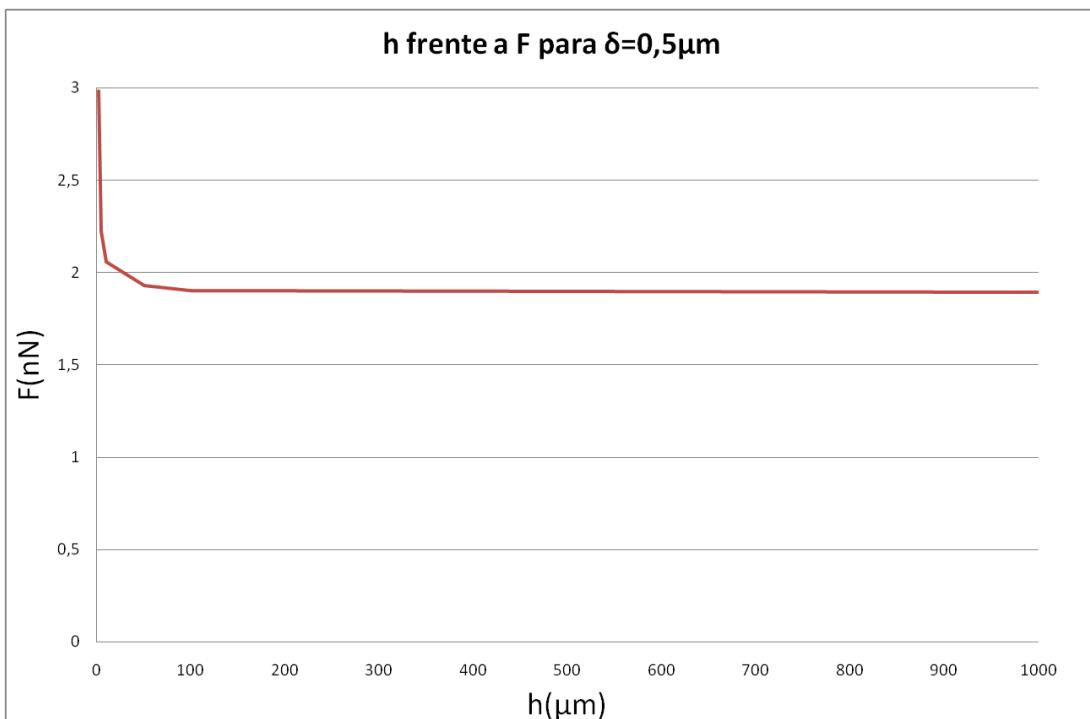


Figura 28: Variación de la fuerza con respecto a la altura de la muestra para $\delta=0.5\mu\text{m}$.

Se observa que a partir de una altura $h=100\mu\text{m}$ la fuerza estimada no varía, por lo que sería adecuado utilizar muestras a partir de una altura de $100\mu\text{m}$.

En los estudios previos analizados, no se analizaba el dimensionamiento del radio idóneo de la muestra utilizada, ya que en ellos se realizaba un sobredimensionamiento para establecer la muestra como semi-infinita. Sin embargo, de cara a realizar un experimento, es conveniente conocer el tamaño de la muestra a extraer.

Si en vez de variar la altura de la muestra del modelo de comportamiento que se quiere simular, se varía el radio, se obtienen los resultados de la Figura 29 y Figura 30.

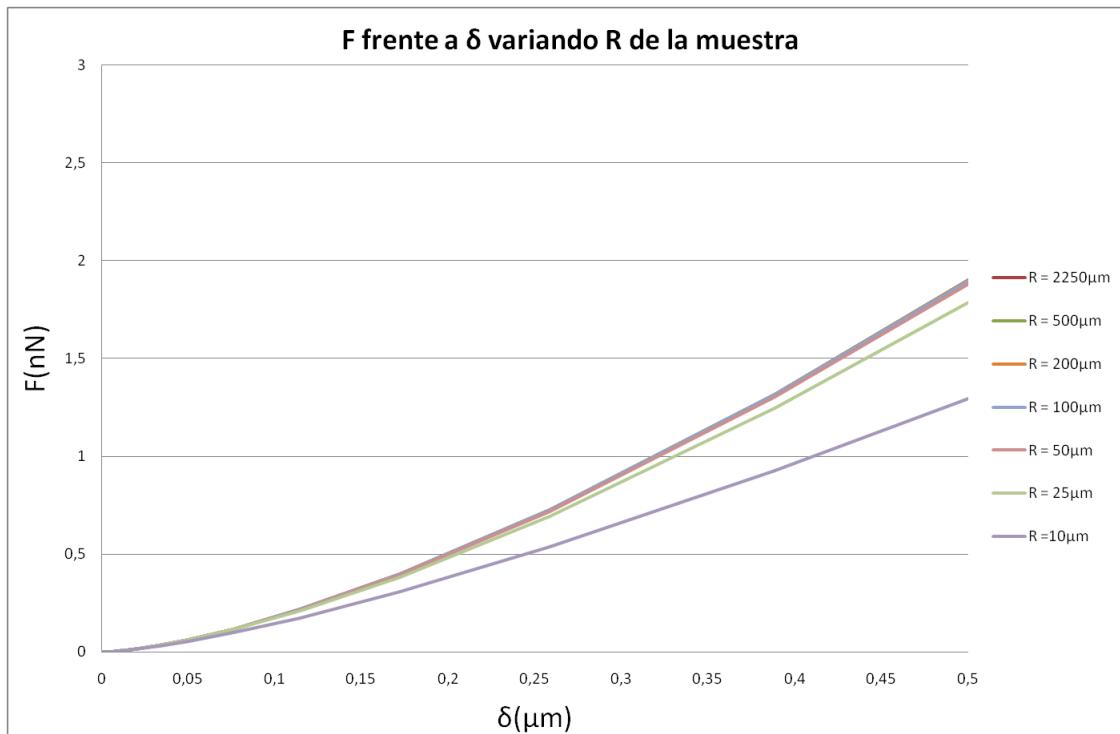


Figura 29: Comparación entre la fuerza de reacción en el indentador y la profundidad de indentación para distintos radios de la muestra a analizar.

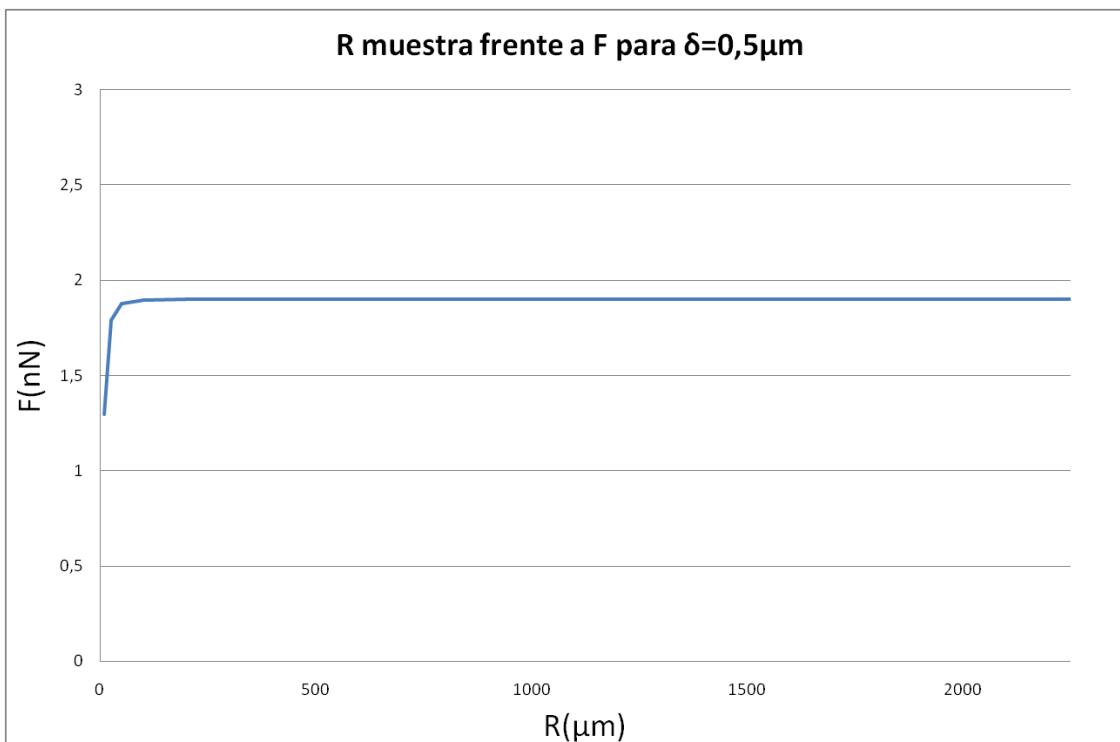


Figura 30: Variación de la fuerza con respecto al radio de la muestra para $\delta=0.5\mu\text{m}$.

Se observa que a partir de una radio $R=100\mu\text{m}$ la fuerza estimada no varía, por lo que sería adecuado utilizar muestras a partir de un radio de $100\mu\text{m}$.

6.2 Densidad de energía del modelo neo-Hookeano

La función de densidad de energía de deformación de un material es una función escalar que relaciona la energía almacenada del material con la deformación. Para un material isótropo puede expresarse en términos de los alargamientos principales, o en función de los invariantes de deformación.

$$U = \hat{U}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \tilde{U}(I_1, I_2, I_3)$$

Para definir la función de densidad de energía de deformación de un material hiperelástico isótropo, existen distintos modelos. Los modelos más utilizados son los de Arruda-Boyce, Marlow, Mooney-Rivlin y neo-Hookeano, y se expresan en función de distintos parámetros.

Para el modelo neo-Hookeano la forma de definir la densidad de energía es la siguiente:

$$U = C_{10}(\bar{I}_1 - 3) + \frac{1}{D_1}(J^{el} - 1)^2$$

Donde U es la energía de deformación por unidad de volumen, C_{10} y D_1 son parámetros del material dependientes de la temperatura y \bar{I}_1 es el primer invariante de deformación (controla el grado de distorsión corporal) definido como $\bar{I}_1 = \bar{\lambda}_1^2 + \bar{\lambda}_2^2 + \bar{\lambda}_3^2$, J^{el} es la relación de volumen elástico. El módulo de rigidez (μ) y el módulo de compresibilidad (κ) quedan definidos como $\mu = 2C_{10}$ y $\kappa = 2/D_1$.

6.3 Densidad de energía del modelo Holzapfel

Para un material anisótropo la función de densidad de energía de deformación $\hat{U}(C)$ depende de tensores que caracterizan la microestructura interna del material.

Para materiales anisótropos los modelos más utilizados son los de Fung y Holzapfel.

En el caso del modelo Holzapfel, la forma de definir la densidad de energía en función de la orientación de las fibras es la siguiente:

$$U = C_{10}(\bar{I}_1 - 3) + \frac{1}{D} \left(\frac{(J^{el})^2 - 1}{2} - \ln J^{el} \right) + \frac{k_1}{2k_2} \sum_{\alpha=1}^N \{ \exp[k_2 \langle \bar{E}_{\alpha} \rangle] - 1 \}$$

siendo

$$\bar{E}_{\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \kappa(\bar{I}_1 - 3) + (1 - 3\kappa)(\bar{I}_{4(\alpha\alpha)} - 1)$$

Los dos primeros términos de la función densidad de energía hacen referencia a las contribuciones volumétricas y de distorsión de la matriz del material, y el último término representa la contribución de las familias de fibras.

U es la energía de deformación por unidad de volumen; C_{10} , D , k_1 , k_2 , y κ son parámetros del material dependientes de la temperatura, N es el número de familias de fibras, \bar{I}_1 es la primera invariante de deformación, J^{el} es la relación de volumen elástico y $\bar{I}_{4(\alpha\alpha)}$ son pseudo invariantes de \bar{C} y A_{α} . \bar{E}_{α} caracteriza la deformación de la familia de fibras con la dirección preferente A_{α} .

El modelo asume que las fibras, dentro de cada familia, se dispersan con simetría rotacional sobre la dirección preferente de la fibra. El parámetro κ describe el nivel de dispersión de las fibras. Si $\rho(\theta)$ es la función de densidad de orientación que caracteriza la distribución, el parámetro κ queda definido como:

$$\kappa = \frac{1}{4} \int_0^{\pi} \rho(\theta) \sin^3(\theta) d\theta$$

Si $\kappa = 0$ las fibras están perfectamente alineadas y en el caso de $\kappa = 1/3$ supone que las fibras están orientadas de forma aleatoria.

6.4 Modelo axisimétrico en Abaqus CAE

Los modelos axisimétricos se utilizan para el estudio de geometrías de revolución. Estos modelos permiten reducir el estudio de geometrías 3D a través de la sección que da lugar al sólido. Por ejemplo, para representar un cilindro mediante un modelo axisimétrico, se debería dibujar la sección de dicho cilindro en el plano XY, siendo el eje X el eje radial, y el eje Y el eje de simetría del cilindro (eje de color azul en la *Figura 31*).

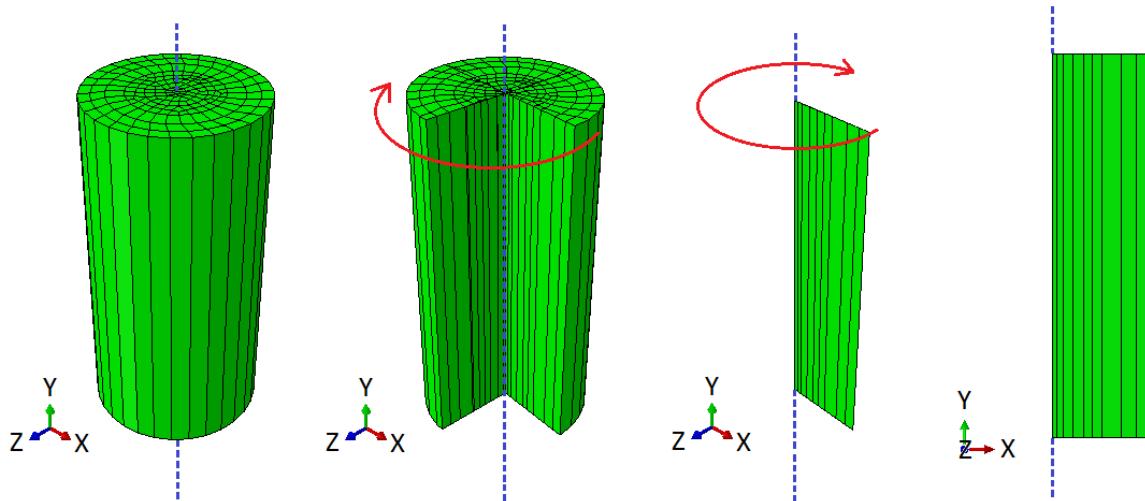


Figura 31: Transición modelo cilindro 3D a modelo cilíndrico axisimétrico.

Este tipo de modelo se utiliza cuando existe geometría de revolución respecto a un eje, ya que se reduce el número de coordenadas espaciales, y por tanto el coste de cálculo. Sin embargo, este tipo de modelo sólo es preciso en el caso de los materiales isótropos, ya que éstos tienen las mismas propiedades en todas las direcciones. En cambio, en el caso de los materiales anisótropos, como pudiera ser un material fibrado (piel o arteria), este modelo no podría aplicarse debido a que la distribución de las fibras no se realiza en torno al eje de simetría, si no que se distribuyen de forma tridimensional (*Figura 32*).

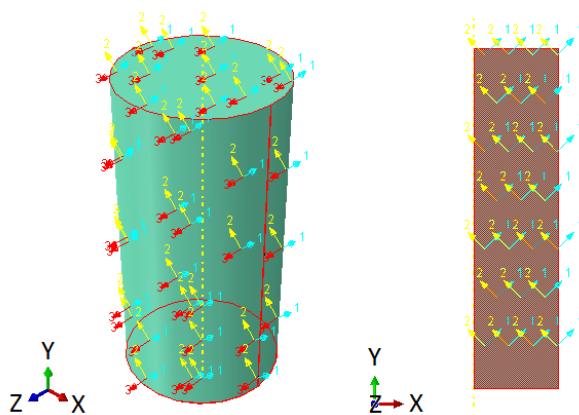


Figura 32: Dos familias de fibras orientadas 45º respecto al eje 3 (Z) en modelo cilindro 3D y modelo axisimétrico.

6.5 Mallado en Abaqus CAE

A la hora de realizar una simulación en Abaqus, hay que tener en cuenta el tipo de malla utilizada, ya que de ello puede depender en gran medida los resultados obtenidos. Por esta razón se realizó un estudio centrado en la variación de la forma de los elementos, así como la técnica utilizada.

El número de nodos de un elemento pueden ser 4 (primer orden de interpolación) u 8 (segundo orden de interpolación), estos determinan cómo los grados de libertad nodales serán interpolados sobre el dominio del elemento (*Figura 33*).

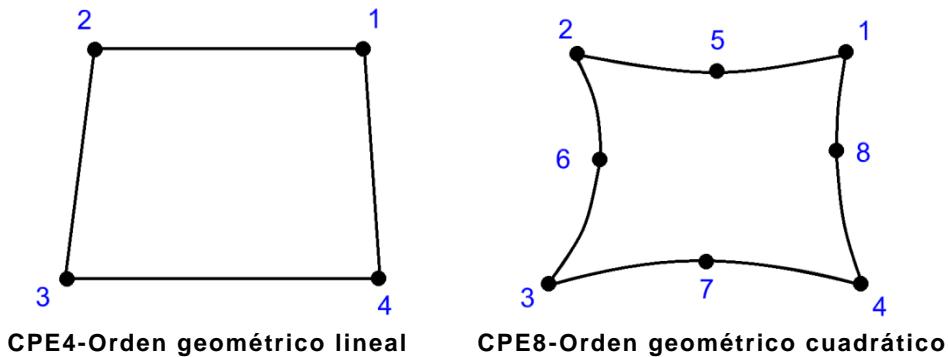
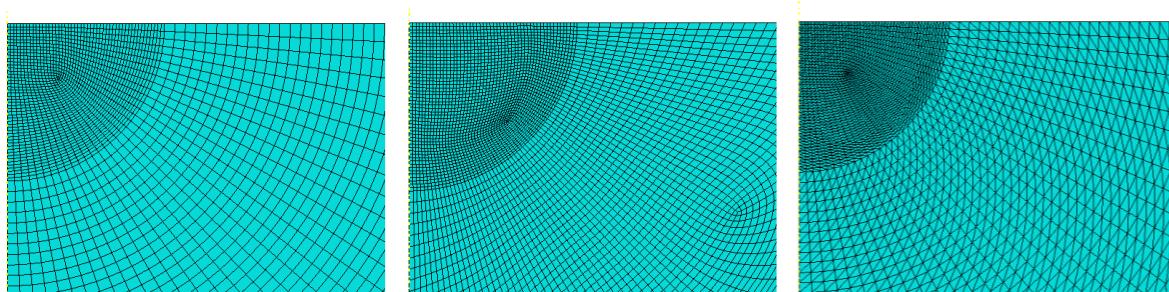


Figura 33: Comparación elementos según número de nodos.

Si nos fijamos en la forma de los elementos, se dispone entre otros de los siguientes (*Figura 34*):



Cuadrángulos (Quad) Cuadrángulos dominados (Quad-dominated) Triángulos (Tri)

Figura 34: Comparación según la forma de los elementos.

Los cuadrángulos se diferencian de los cuadrángulos dominados en que, estos últimos, pueden introducir algunos elementos triangulares en las transiciones

Por otro lado, la técnica puede ser libre o estructurada. En el caso libre, los elementos se disponen de forma aleatoria, sin embargo, cuando la técnica utilizada es estructurada, los elementos quedan dispuestos de forma ordenada mediante un patrón pre-establecido (*Figura 35*).

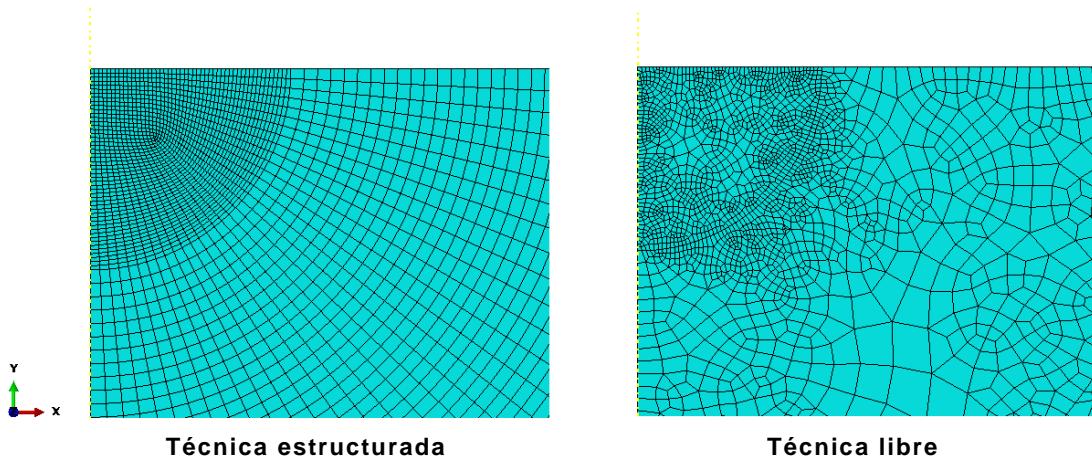


Figura 35: Comparación mallados según tipo de técnica utilizada.

Además, hay que tener en cuenta que los análisis se pueden realizar con integración reducida o integración completa. Tal y como se muestra en la Figura 36, la reducida tiene menos puntos de integración que la completa, y por lo tanto, los cálculos son menos precisos.

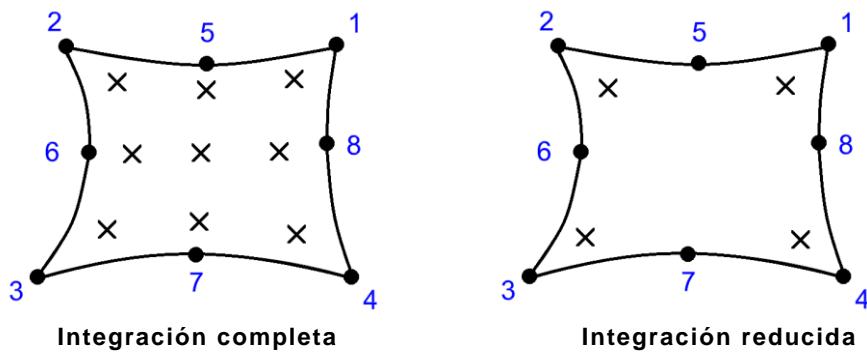


Figura 36: Comparación elementos según tipo de integración.

Tras realizar el análisis, se eligió trabajar con elementos de 4 nodos (orden geométrico lineal), ya que en este modelo los resultados obtenidos son prácticamente iguales utilizando el primer o segundo orden de interpolación. Sin embargo, para el primer caso, el número de cálculos necesarios que tiene que hacer el programa es mucho menor.

En lo referente a la forma del elemento, se han utilizado cuadrángulos estructurados, ya que en el caso de los triángulos los resultados obtenidos eran muy distantes a la realidad, debido a que aparecían unas muescas y se generaban tensiones en determinados puntos, en los que no deberían aparecer. A esta conclusión se llegó tras realizar una simulación en Abaqus para un modelo de comportamiento elástico lineal ($E = 3KPa$ y $\nu = 0.49999$) y para un modelo neo-Hookeano ($C10 = 0.5$ y $D1 = 0$), a los que se aplicó un indentador de radio $2.25\mu m$ hasta una profundidad de $0.5\mu m$. Si nos fijamos en la distribución de tensiones (Figura 37 y Figura 38), se puede observar la aparición de las muescas en el caso de elementos triangulares, y también es apreciable que, la técnica de elementos estructurada distribuye los elementos a lo largo de la muestra de forma más homogénea que la técnica libre.

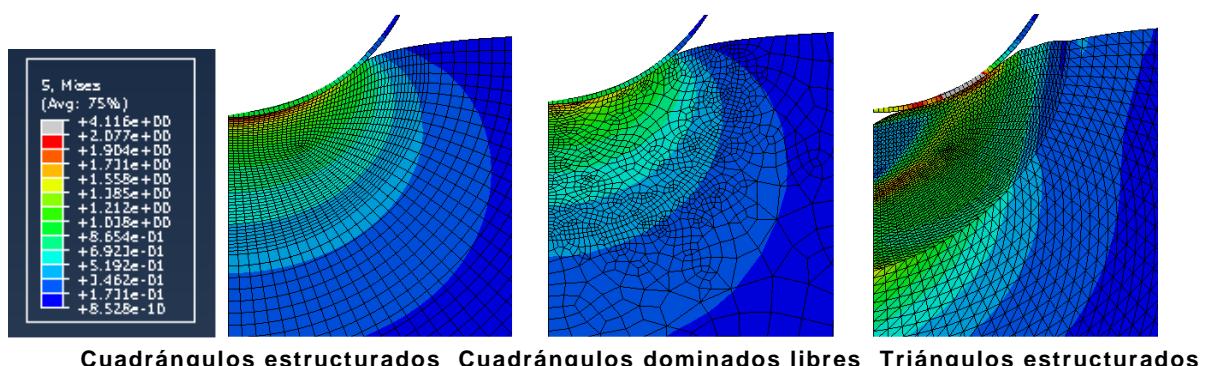


Figura 37: Distribución de tensiones [kPa] modelo de comportamiento elástico.

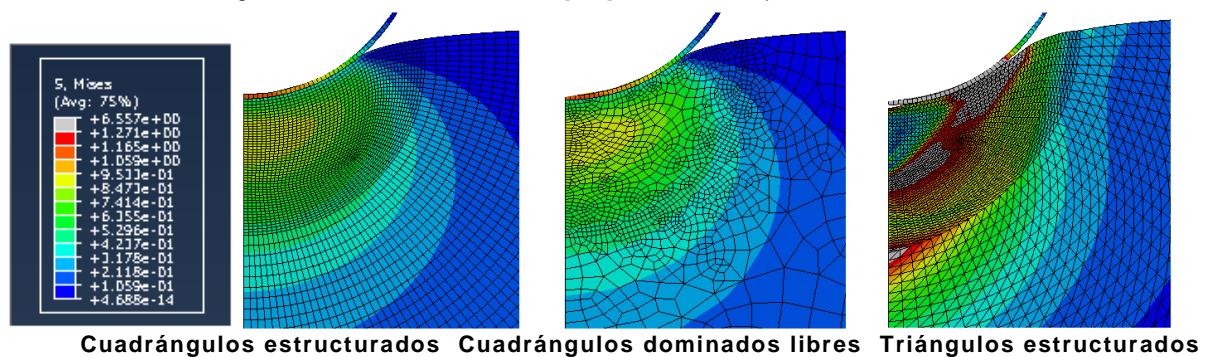


Figura 38: Distribución de tensiones [kPa] modelo de comportamiento neo-Hookeano.

Centrándonos en los resultados obtenidos según el tipo de elemento utilizado, se observa que, en el caso de los elementos triangulares la curva sigue una distribución distinta al resto de casos. Esto es debido a que las tensiones acumuladas en determinados puntos de la muestra, hacen que la fuerza resultante aumente hasta el extremo de sobreponer el resultado teórico de Hertz. Comparando entre el mallado libre y el estructurado, se observa que la técnica estructurada da resultados más precisos, ya que la distribución de tensiones es más homogénea (Figura 39 y Figura 40).

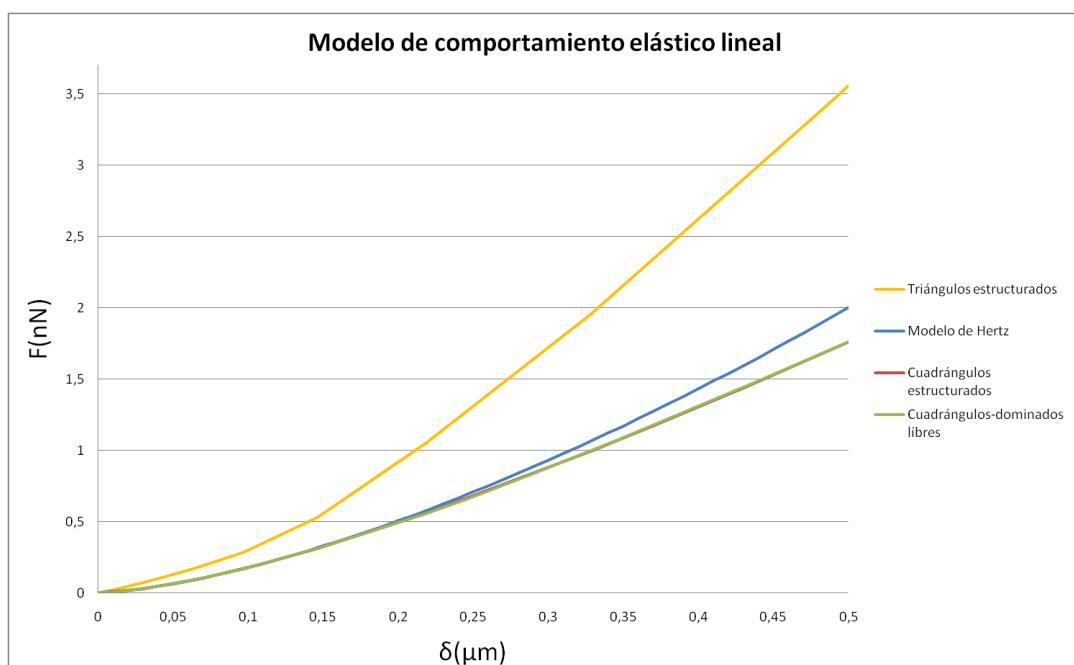


Figura 39: Comparación entre F y δ para distintos tipos de elemento de un modelo de comportamiento elástico lineal.

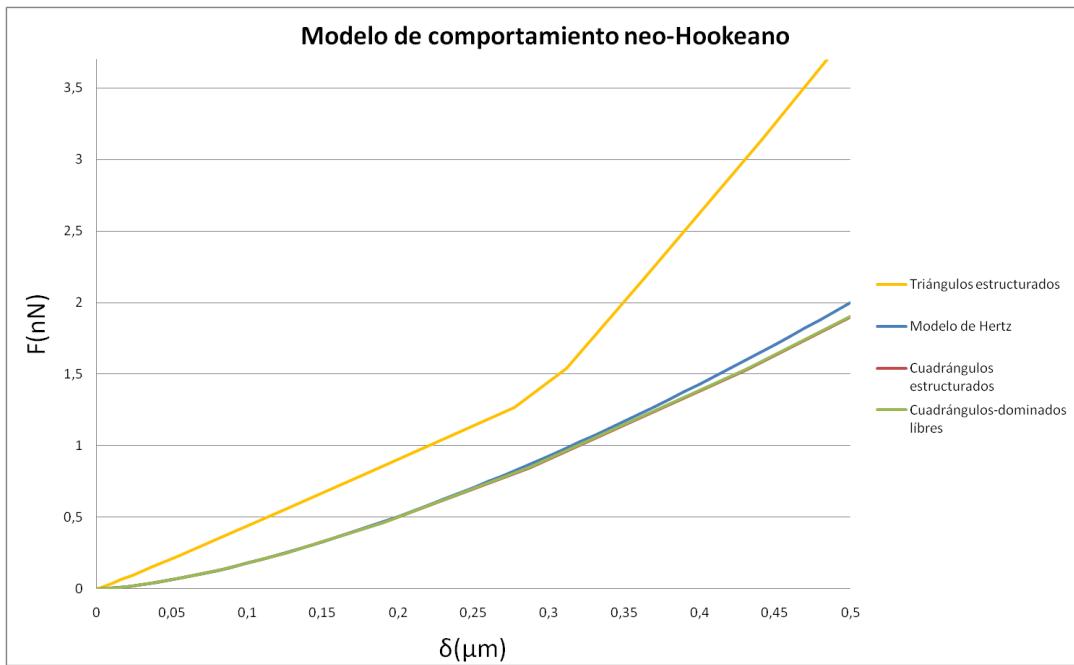


Figura 40: Comparación entre F y δ para distintos tipos de elemento de un modelo de comportamiento hiperelástico.

Por lo tanto, teniendo en cuenta todo lo anterior, se determinó que el tipo de elemento idóneo para el mallado eran los cuadrángulos mediante la técnica estructurada, y que el elemento idóneo para esta simulación era el CAX4 (C=continuo, AX=axisimétrico, 4=Nodos), el cual se corresponde a la Figura 41.

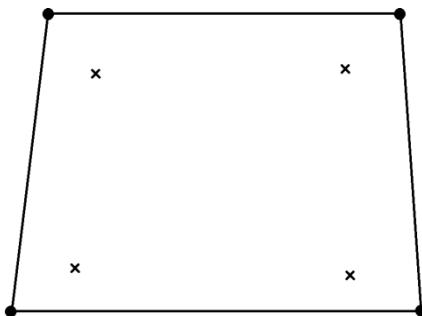


Figura 41: Elemento utilizado en el mallado de la muestra.

6.6 Código de la simulación del ensayo 2D en Abaqus para una muestra de un material elástico

A continuación, se incluye el código desarrollado para parametrizar el modelo en función de los parámetros definidos inicialmente en la cabecera del programa. Si se variase cualquiera de los parámetros de la cabecera, al introducir el código en el programa Abaqus/CAE 6.12, quedaría el modelo modificado en función de los parámetros introducidos.

```
#####
#Definir propiedades:
#Unidades: Todo en micrómetros y nanoNewtons. E en (nN/µm2) = (kPa).
#Indentador
Ri = 2.25
Ei= 200000000
Vi= 0.3
Delta=0.5
#Muestra
Rm = 100
Hm = 100
Em = 3
Vm= 0.49999
SeparacionIM= 0.0000009
#####
from abaqus import *
from abaqusConstants import *
backwardCompatibility.setValues(includeDeprecated=True, reportDeprecated=False)
myModel = mdb.Model(name='ModeloAbaqus')

# Damos la geometría al Indentador definiéndolo mediante un arco y una línea
import part
mySketch1 = myModel.ConstrainedSketch(name='Indentador', sheetSize=225/1000.)
mySketch1.ArcByCenterEnds(center=(0,SeparacionIM+(Ri)),point1=(0,SeparacionIM),poi
nt2=(0,SeparacionIM+(2*Ri)))
mySketch1.Line(point1=(0,SeparacionIM),point2=(0,2*Ri+SeparacionIM))

# Definimos el eje de revolución
mySketch1.ConstructionLine(point1=(0,-1),point2=(0,1))

# Definimos axisimétrico y lo generamos
Indentador = myModel.Part(dimensionality=AXISYMMETRIC, name='Indentador',
type=DEFORMABLE_BODY)
myModel.parts['Indentador'].BaseShell(sketch=mySketch1)

# Damos la geometría a la Muestra definiéndola mediante un rectángulo
mySketch2 = myModel.ConstrainedSketch(name='Muestra', sheetSize=225/100.)
```

```
mySketch2.rectangle(point1=(Rm,0), point2=(0,-Hm))
```

Definimos el eje de revolución

```
mySketch2.ConstructionLine(point1=(0,-1),point2=(0,1))
```

Definimos axisimétrico y la generamos

```
Muestra = myModel.Part(dimensionality=AXISYMMETRIC, name='Muestra', type=DEFORMABLE_BODY)
myModel.parts['Muestra'].BaseShell(sketch=mySketch2)
```

Creamos el material del Indentador

```
import material
myMaterialIndentador = myModel.Material(name='M-Indentador')
```

Propiedades del material del indentador

```
elasticProperties = (Ei, Vi)
myMaterialIndentador.Elastic(table=(elasticProperties, ) )
```

Creamos el material de la Muestra

```
myMaterialMuestra = myModel.Material(name='M-Muestra')
```

Propiedades del material de la muestra

```
elasticProperties = (Em, Vm)
myMaterialMuestra.Elastic(table=(elasticProperties, ) )
```

Creamos las secciones

```
import section
mySection1 = myModel.HomogeneousSolidSection(name='SeccionIndentador',
material='M-Indentador', thickness=None )
mySection2 = myModel.HomogeneousSolidSection(name='SeccionMuestra',
material='M-Muestra', thickness=None)
```

Asignamos las secciones

```
CentroIndentador=(0,Ri,0)
region1 = Indentador.faces.findAt(CentroIndentador)
i = region1.index
Set1 = Indentador.Set(name='Set1', faces=Indentador.faces[i:i+1])
Indentador.SectionAssignment(region=Set1, sectionName='SeccionIndentador')
CentroMuestra=(0,-Hm,0)
region2 = Muestra.faces.findAt(CentroMuestra)
i = region2.index
Set2 = Muestra.Set(name='Set2', faces=Muestra.faces[i:i+1])
Muestra.SectionAssignment(region=Set2, sectionName='SeccionMuestra')
```

Creamos el ensamblaje

```
import assembly
```

```
myAssembly1 = myModel.rootAssembly
myInstance1      =      myAssembly1.Instance(name='I-Indentador',      part=Indentador,
dependent=ON)
myAssembly2 = myModel.rootAssembly
myInstance2 = myAssembly2.Instance(name='I-Muestra', part=Muestra, dependent=ON)
```

Creamos particiones para mejorar y facilitar el mallado

```
CentroMuestra=((Rm,-Hm/2,0))
cara = Muestra.faces.findAt(CentroMuestra)
mySketch = myModel.ConstrainedSketch(name="Dibujo", sheetSize=1.0)
mySketch.Line(point1=(3.5*Ri ,0), point2=(3.5*Ri ,-Hm))
mySketch.ArcByCenterEnds(center=(0,0),point1=(0,2.5*Ri),point2=(2.5*Ri,0))
mySketch.ArcByCenterEnds(center=(0,0),point1=(0,1*Ri),point2=(1*Ri,0))
mdb.models['ModeloAbaqus'].parts['Muestra'].PartitionFaceBySketch(faces=cara,
sketch=mySketch)
```

Generamos el mallado

```
import mesh
elementType1set = mesh.ElemType(elemCode=CAX4, elemLibrary=STANDARD)
Indentador.seedPart( size=0.03)
Indentador.generateMesh()
elementType2set = mesh.ElemType(elemCode=CAX4, elemLibrary=STANDARD)
elementType2=(elementType2set,)
Muestra.seedPart( size=8)
Muestra.generateMesh()
region3 = Muestra.edges.findAt((Ri,-Hm,0,))
Abajo=(region3,)
Muestra.seedEdgeByNumber(edges=Abajo , number=1)
region4 = Muestra.edges.findAt((1.4*Ri,0,0,))
Arriba=(region4,)
Muestra.seedEdgeByNumber(edges=Arriba , number=30)
region5 = Muestra.edges.findAt((0,-1.4*Ri,0,))
Izquierdo=(region5,)
Muestra.seedEdgeByNumber(edges=Izquierdo , number=30)
region6 = Muestra.edges.findAt((2.5*Ri*(2**0.5)/2 ,-2.5*Ri*(2**0.5)/2,0,))
Radio=(region6,)
Muestra.seedEdgeByNumber(edges=Radio , number=60)
region7 = Muestra.edges.findAt((0.4*Ri,0,0,))
Arriba=(region7,)
Muestra.seedEdgeByNumber(edges=Arriba , number=50)
region8 = Muestra.edges.findAt((0,-0.4*Ri,0,))
Izquierdo=(region8,)
Muestra.seedEdgeByNumber(edges=Izquierdo , number=50)
region9 = Muestra.edges.findAt((1*Ri*(2**0.5)/2 ,-1*Ri*(2**0.5)/2,0,))
Radio=(region9,)
Muestra.seedEdgeByNumber(edges=Radio , number=70)
```

```

region16 = Muestra.faces.findAt((Rm/2 ,-Hm/2,0,))
region17 = Muestra.faces.findAt((Ri/3 ,-Ri/3,0,))
region18 = Muestra.faces.findAt((3*Ri/3 ,-3*Ri/3,0,))
region19 = Muestra.faces.findAt((Ri/2 ,-Hm/2,0,))
m=(region16,region17,region18,region19)
n=(region19,)
Muestra.setMeshControls(regions=m, elemShape= QUAD ,technique=STRUCTURED)
Muestra.setMeshControls(regions=n, elemShape= QUAD ,technique=FREE)
Muestra.setElementType(regions=m, elemTypes=elemType2)
Muestra.setElementType(regions=n, elemTypes=elemType2)
Muestra.generateMesh()

```

Creamos Step

```

myModel.StaticStep(name='BC', previous='Initial', timePeriod=50, initialInc=0.1,
description='BoundaryConditions',nlgeom=OFF, minInc=0.00000000001)

```

Condiciones de Contorno:

Simetría de la Muestra

```

set3A = myInstance2.edges.findAt((0,-Hm/2,0,))
set3B = myInstance2.edges.findAt((0,-0.9*Ri,0,))
set3C = myInstance2.edges.findAt((0,-1.1*Ri,0,))
region10 = (set3A,set3B,set3C)
myModel.XsymmBC(name='SimetriaMuestra',createStepName='BC', region = region10 )

```

#Fijación en la parte inferior de la Muestra

```

set4A = myInstance2.edges.findAt((Ri,-Hm,0,))
set4B = myInstance2.edges.findAt((0.5*Rm,-Hm,0,))
region11 = (set4A,set4B,)
myModel.EncastreBC(name='EncastreInferiorMuestra',createStepName='BC', region =
region11 )

```

Desplazamiento del Indentador

```

set5 = myInstance1.edges.findAt((Ri,Ri,0,))
region12 = (set5,)
myModel.DisplacementBC(name='Desplazamiento',createStepName='BC', region =
region12, u1=UNSET, u2=-Delta, u3=UNSET ,distributionType=UNIFORM)

```

Simetría del Indentador

```

set6 = myInstance1.edges.findAt((0,SeparacionIM+Ri/2,0,))
region13 = (set6,)
myModel.XsymmBC(name='SimetrialIndentador',createStepName='BC', region =
region13)

```

Definimos la interacción entre el Indentador y la muestra.

```
import interaction
```

```

myModel.ContactProperty('IntProp1')
myModel.interactionProperties['IntProp1'].TangentialBehavior(formulation=FRictionless)
i = mdb.models['ModeloAbaqus'].rootAssembly
e1 = i.instances['I-Indentador'].edges
region14 = i.Surface(name='SuperficieIndentador', side1Edges=e1.findAt(((Ri, Ri, 0), ), ))
m = mdb.models['ModeloAbaqus'].rootAssembly
e2 = m.instances['I-Muestra'].edges
region15 = m.Surface(name='SuperficieMuestra', side1Edges=e2.findAt(((0.9*Ri, 0, 0),
),((1.1*Ri, 0, 0), ),((3*Ri, 0, 0), ),((5*Ri, 0, 0), )))
myModel.SurfaceToSurfaceContactStd(name='Interacción' , createStepName='Initial',
master= region14 , slave = region15, sliding=FINITE, interactionProperty = 'IntProp1')

```

Submit

```

import job
jobName = 'Modelo'
myJob = mdb.Job(name=jobName, model='ModeloAbaqus', description='_')
myJob.submit()
myJob.waitForCompletion()

```

6.6.1 Modificación para una muestra de material neo-Hookeano

```
#####
#Definir propiedades:
#Muestra (Neo Hooke)
Rm = 100
Hm = 100
C10= 0.5
D1= 0
SeparacionIM= 0.0000009
#####
```

Propiedades del material de la muestra

```

hyperelasticProperties = (C10, D1)
myMaterialMuestra.Hyperelastic(testData=OFF,      table=(hyperelasticProperties,), type=NEO_HOOKE )

```

Generamos el mallado

```
elemType2set = mesh.ElemType(elemCode=CAX4H, elemLibrary=STANDARD)
```

Creamos Step

```
myModel.StaticStep(name='BC', previous='Initial', timePeriod=50, initialInc=0.1,
description='BoundaryConditions', nlgeom=ON, minInc=0.00000000001)
```

