

PROCEDIMIENTO PARA LA CALIBRACIÓN AUTOMÁTICA DE LOS PARÁMETROS DE FRACTURA DE UN HORMIGÓN REFORZADO CON FIBRAS

F. Suárez^{1*}, J.F. Aceituno¹, J. Donaire¹

¹ Departamento de Ingeniería Mecánica y Minera, Universidad de Jaén, EPS de Linares
Campus Científico Tecnológico de Linares, Cinturón Sur, s/n 23700 Linares (Jaén), España.

*Persona de contacto: fsuarez@ujaen.es

RESUMEN

En los últimos años se han propuesto modelos numéricos para reproducir el comportamiento mecánico del hormigón con fibras empleando un diagrama de ablandamiento trilineal, definido por seis parámetros incluyendo valores de tensiones (f_t, f_k, f_r) y de apertura de fisura (w_k, w_r, w_f). La calibración de estos parámetros generalmente resulta en un proceso de prueba y error que implica un número elevado de simulaciones hasta identificar los valores que se ajustan al comportamiento observado experimentalmente. En este trabajo se presenta un procedimiento de calibración para estos parámetros empleando un modelo de fisura distribuida desarrollado en el software de elementos finitos OOFEM y el paquete de optimización de la librería SciPy de Python, ambos de acceso libre. Se emplea el algoritmo de Nelder-Mead para ajustar los resultados numéricos al diagrama experimental y analiza aspectos clave como el número de puntos de referencia utilizados en el proceso de calibración y los factores de ponderación aplicados a éstos. Para evaluar el ajuste numérico se define un factor de desviación que se reduce cuando el ajuste numérico se aproxima al diagrama experimental en los puntos de referencia definidos. Este procedimiento permite calibrar los seis parámetros de forma automática, reduciendo significativamente el tiempo de calibración y con una alta precisión.

PALABRAS CLAVE: Fractura, OOFEM, SciPy, HRC, calibración automática.

ABSTRACT

In recent years, some studies have proposed numerical models to reproduce the mechanical behaviour of fiber-reinforced concrete using a trilinear softening diagram defined by six parameters, including stress values (f_t, f_k, f_r) and crack opening values (w_k, w_r, w_f). The calibration of these parameters usually consists of a trial-and-error process involving a large number of simulations to identify the values that match the experimental results. This work presents a calibration procedure for these parameters using a smeared crack model developed in the finite element software OOFEM and the optimization package from Python's SciPy library, both freely available. The Nelder-Mead algorithm is used to adjust the numerical results to the experimental diagram and key aspects such as the number of reference points used in the calibration process and the weighting factors applied to them are analysed. A deviation factor is defined to evaluate the numerical adjustment, this factor decreases as the numerical results approach the experimental diagram at the defined reference points. This procedure enables the automatic calibration of the six parameters, with a significant reduction of the required time and providing high accuracy.

KEYWORDS: Fracture, OOFEM, SciPy, FRC, automatic calibration.

1. INTRODUCCIÓN

El hormigón reforzado con fibras (HRF) es un material cuya aplicación no es nueva [1], pero cuyo uso ha aumentado en los últimos años, en parte debido a su inclusión en normativas estructurales de referencia [2-3]. Este interés ha motivado numerosos estudios experimentales centrados en analizar cómo distintos factores de fabricación afectan sus propiedades en estado fresco y endurecido. Además, y de forma paralela, se han desarrollado diversas estrategias para la modelización numérica de la fractura en HRF [5-8],

destacando el empleo de un diagrama de ablandamiento trilineal.

El diagrama trilineal se define mediante seis parámetros ($f_t, f_k, f_r, w_k, w_r, w_f$) que relacionan la apertura de fisura con la tensión y dependen de propiedades físicas del HRF, como la resistencia del hormigón, la longitud de las fibras o su proporción en la mezcla [9]. La definición de estos parámetros requiere un proceso de calibración en el que se comparan curvas numéricas y experimentales, que emplea un análisis inverso basado en ensayos experimentales con probetas entalladas y

simulaciones numéricas no lineales. Dado el número de parámetros involucrados, este proceso implica un ajuste iterativo que, como valor aproximado, puede suponer la creación de unos 25 modelos.

Por otro lado, el diagrama trilineal ha sido utilizado previamente en modelos de fractura embebida [9] y, más recientemente, ha sido implementado en un modelo de fisuración difusa en el código de elementos finitos OOFEM [10].

En este trabajo se propone un procedimiento de calibración automática de los parámetros del diagrama trilineal empleando puntos de referencia de la curva experimental y el algoritmo de optimización Nelder-Mead, disponible en SciPy [11]. El artículo se estructura de la siguiente manera: en la segunda sección se describe brevemente el modelo de fisuración difusa utilizado y el diagrama trilineal. La tercera sección detalla el procedimiento de calibración, incluyendo la definición del factor de desviación empleado para comparar las curvas numéricas y experimentales, así como el algoritmo Nelder-Mead utilizado en el proceso de optimización. En la cuarta sección, el algoritmo se aplica a un ensayo experimental de flexión en tres puntos, analizando dos aspectos clave: i) la influencia del número de puntos de referencia en la calibración y ii) el impacto de los factores de ponderación aplicados a estos puntos. Finalmente, se resumen las principales conclusiones.

2. OBJETIVO

El objetivo de este trabajo es desarrollar un procedimiento de calibración automático que permita caracterizar correctamente los parámetros que describen el comportamiento de un hormigón reforzado con fibras, definido con un diagrama de ablandamiento trilineal. A continuación se describe de forma resumida el modelo de fisura difusa empleado y se detallan los seis parámetros que han de calibrarse para caracterizar el material. El lector puede consultar una descripción más detallada del modelo en [8].

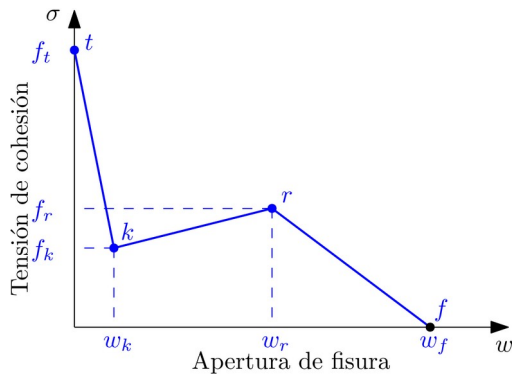


Figura 1. Diagrama de ablandamiento trilineal.

2.1. Modelo de fisuración con diagrama de ablandamiento trilineal

En este modelo, el daño se introduce numéricamente en el material mediante el parámetro de daño ω , que varía entre 0 (sin daño) y 1 (completamente dañado), y reduce la resistencia del material a través del tensor de rigidez D de la siguiente manera:

$$D = (1 - \omega) D_e \quad (1)$$

donde D_e representa el tensor elástico.

El daño se relaciona con la deformación del material a través de la deformación equivalente que, en este caso, se obtiene con la siguiente expresión, basada en el criterio de Rankine:

$$\varepsilon_{eq} = \frac{1}{E} \sqrt{\sum_{I=1}^3 \langle \bar{\sigma}_I \rangle^2} \quad (2)$$

donde E representa el módulo elástico del hormigón, $\bar{\sigma}_I$ las tensiones principales ($I = 1, 2, 3$), siendo $\langle \bar{\sigma}_I \rangle$ sus valores positivos.

El valor del parámetro de daño ω se obtiene para cada una de las ramas del diagrama trilineal con las siguientes expresiones:

- Entre los puntos t y k :

$$\omega = \frac{E}{E + h \left(\frac{f_k - f_t}{w_k} \right)} - \frac{1}{\varepsilon_{eq}} \frac{E \varepsilon_0}{E + h \left(\frac{f_k - f_t}{w_k} \right)} \quad (3)$$

Tramo $k-r$: $\varepsilon_k \leq \varepsilon_{eq} < \varepsilon_r$

$$\omega = \frac{E}{E + h \left(\frac{f_r - f_k}{w_r - w_k} \right)} + \frac{1}{\varepsilon_{eq}} \cdot \frac{w_k \left(\frac{f_r - f_k}{w_r - w_k} \right) - f_k}{E + h \left(\frac{f_r - f_k}{w_r - w_k} \right)} \quad (4)$$

Tramo $r-f$: $\varepsilon_r \leq \varepsilon_{eq} \leq \varepsilon_f$

$$\omega = \frac{E}{E + h \left(\frac{-f_r}{w_f - w_r} \right)} + \frac{1}{\varepsilon_{eq}} \cdot \frac{w_r \left(\frac{-f_r}{w_f - w_r} \right) - f_r}{E + h \left(\frac{-f_r}{w_f - w_r} \right)} \quad (5)$$

donde E representa el módulo de elasticidad del hormigón, ε_0 la deformación en la que se alcanza la resistencia a tracción f_t ($\varepsilon_0 = f_t/E$) y h el ancho de fisura, determinado proyectando el elemento finito en la dirección de la máxima deformación principal en el inicio del daño, según lo propuesto por Oliver [5], que garantiza que el proceso de fractura se adapte al tamaño del elemento y que la energía disipada sea la correcta. Dado que E es un valor conocido y que h depende de la geometría del elemento finito y se calcula en cada elemento durante la simulación numérica, es necesario calibrar seis parámetros para describir el comportamiento a fractura del FRC: $\varepsilon_0, f_k, f_r, w_k, w_r, w_f$.

3. PROCEDIMIENTO DE CALIBRACIÓN

3.1. Datos de entrada

El objetivo del procedimiento de calibración es determinar un conjunto de parámetros del material ($\varepsilon_0, f_k, f_r, w_k, w_r, w_f$) que permitan reproducir el comportamiento experimental de una probeta de hormigón reforzado con fibras (FRC) mediante un modelo numérico. Para ello, el proceso de calibración requiere tres elementos fundamentales:

- Un resultado experimental a ajustar, como un diagrama carga-desplazamiento.
- Un modelo de elementos finitos inicial que represente el ensayo experimental, incluyendo la geometría y las condiciones de contorno, pero sin definir las propiedades del material, ya que su determinación es el objetivo de la calibración.
- Valores iniciales de los parámetros a calibrar para iniciar el proceso.

3.2. Factor de desviación

Una vez definido el modelo inicial, se obtiene un resultado numérico que se compara con el diagrama experimental. Para cuantificar esta comparación, se define un valor escalar denominado λ , que permite evaluar la diferencia entre ambos diagramas y sirve como referencia en las iteraciones sucesivas para su minimización. Este valor, denominado en adelante factor de desviación, permite comparar los valores de carga numéricos y experimentales en puntos específicos y se define de la siguiente manera:

$$\lambda = \frac{\sum \|y_{i,exp} - y_{i,num}\|}{\sum y_{i,exp}} \cdot weight_i \quad (6)$$

donde $y_{i,exp}$ representa la carga experimental en el desplazamiento de referencia i , $y_{i,num}$ es la carga numérica correspondiente en el desplazamiento de referencia i y $weight_i$ permite obtener un valor ponderado en el que algunos puntos de referencia pueden tener un mayor peso que otros en la calibración.

3.3. Algoritmo de calibración

Para ajustar los seis parámetros que definen el comportamiento del material, se utiliza el método de Nelder-Mead; se escoge este método porque no requiere información adicional sobre la función a minimizar. El método de Nelder-Mead hace uso de un *simplex* y evalúa la función en cada vértice, pudiendo resumir su funcionamiento en los siguientes pasos:

- **Inicialización y ordenación:** se evalúa la función en cada vértice del *simplex* y se ordenan de mejor a peor.
- **Reflexión:** se obtiene un punto de reflexión calculando el centroide de todos los vértices

(excluyendo el peor) y reflejándolo a través del vértice peor. Si el punto de reflexión devuelve un valor mejor que el segundo peor vértice pero no mejor que el mejor, el siguiente *simplex* se obtiene reemplazando el peor vértice por el punto de reflexión.

- **Expansión:** si el punto de reflexión devuelve un valor mejor que el mejor vértice, se obtiene un punto de expansión más allá del punto de reflexión. Si el punto de expansión devuelve un valor mejor que el punto de reflexión, reemplaza el peor vértice en el nuevo *simplex*.
- **Contracción:** si el punto de reflexión devuelve un valor peor que el segundo peor vértice pero mejor que el peor, se obtiene un punto de contracción.
- **Retracción:** si todas las operaciones anteriores no conducen a un *simplex* mejorado, se define un nuevo *simplex* moviendo todos los vértices hacia el mejor vértice.

La Figura 2 muestra un esquema de estas operaciones para un *simplex* en un espacio bidimensional, lo que permite una representación sencilla.

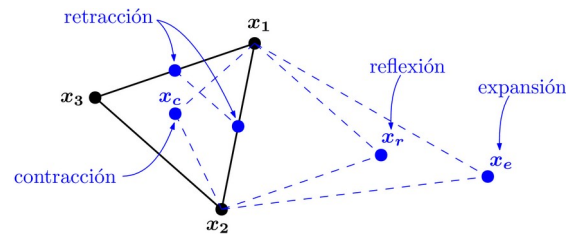


Figura 2. Esquema de funcionamiento del algoritmo Nelder-Mead.

Por lo tanto, el método de Nelder-Mead necesita una función a minimizar y un conjunto de parámetros a ajustar. En este caso, el objetivo es minimizar el factor de desviación definido por la ecuación (6), para lo que se define una función que calcula el factor de desviación para un conjunto específico de parámetros. La Figura 3 describe el funcionamiento de esta función, que recibe un modelo base de elementos finitos (FEM), un conjunto de parámetros a evaluar y un diagrama experimental para la comparación.

compute_dev_factor	
Input	<ul style="list-style-type: none"> • Modelo base FEM • Valores iniciales: $(\varepsilon_0, f_k, f_r, f_t, w_k, w_r)_0$ • Curva experimental
Output	<ul style="list-style-type: none"> • Factor de desviación: $\lambda = \frac{\sum \ y_{i,exp} - y_{i,num}\ }{\sum y_{i,exp}} \cdot weight_i$

Figura 3. Esquema de la función a minimizar.

El modelo FEM se modifica con el conjunto de parámetros del material y se calcula, produciendo un

diagrama numérico que se compara con el experimental, devolviendo un valor escalar que corresponde al factor de desviación definido anteriormente.

3.4. Automatización con OOFEM y SciPy

Un esquema del procedimiento de calibración propuesto se muestra en la Figura 4; los elementos en azul representan los datos que se proporcionan inicialmente como valores dados.

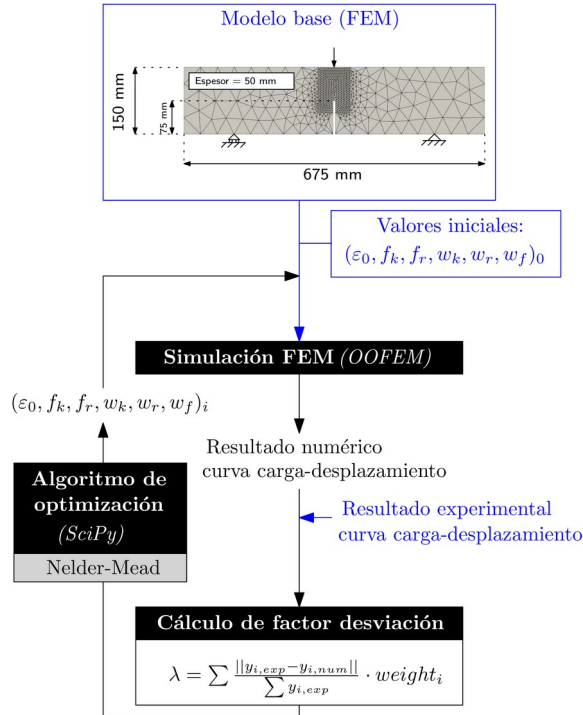


Figura 4. Esquema del algoritmo de calibración.

Se proporciona un modelo base de elementos finitos (FEM), que describe la geometría y las condiciones de contorno, junto con una estimación inicial de los parámetros del material a ajustar $(\varepsilon_0, f_k, f_r, w_k, w_r, w_f)_0$. El modelo FEM se modifica inicialmente para que el comportamiento del material sea descrito por la estimación inicial de los parámetros y se calcula, proporcionando un diagrama carga-desplazamiento. Este diagrama numérico se compara con el experimental y se obtiene un valor del factor de desviación. Tras este primer cálculo, comienza el proceso de iteración utilizando el algoritmo de Nelder-Mead descrito previamente, que modifica progresivamente cada uno de los seis parámetros del material para minimizar el valor del factor de desviación; $(\varepsilon_0, f_k, f_r, w_k, w_r, w_f)_i$ representa el conjunto de parámetros utilizados en la iteración i . En este trabajo no se ha definido un criterio de convergencia y el proceso se realiza durante 200 iteraciones para observar la consistencia del procedimiento. Los valores de los factores de reflexión, expansión y contracción utilizados en el algoritmo de Nelder-Mead son los adoptados por defecto en la implementación de SciPy: $\alpha = 1$, $\gamma = 2$ y $\rho = 0.5$.

4. RESULTADOS

En esta sección se analizan los resultados del procedimiento de calibración descrito, empleando como referencia experimental el de un ensayo a flexión en tres puntos con una probeta de HRF fabricada con 10 kg/m^3 de macrofibras de poliolefina de 48 mm de largo con las propiedades que se muestran en la Tabla 1. La geometría de la probeta se muestra en la Figura 4.

Tabla 1. Propiedades de las fibras de poliolefina.

Densidad (g/cm ³)	Diámetro equiv. (mm)	Resist. a tracción (Mpa)	Módulo elástico (GPa)
0.91	0.92	> 500	> 9

En este estudio, se analizarán seis casos para comprobar la influencia de la selección de los puntos de calibración y su efecto en el resultado:

- **Caso 1:** Con cuatro puntos de referencia, relacionados con cuatro aspectos clave del diagrama carga-desplazamiento: carga máxima, caída inicial de carga, carga máxima de recuperación y rama de caída final de carga, todos con el mismo peso en la calibración.
- **Caso 2:** Se emplean 100 puntos de referencia, distribuidos uniformemente a lo largo del eje de desplazamiento, todos con el mismo peso en la calibración.
- **Caso 3:** Se utilizan todos los puntos de referencia del Caso 1 y del Caso 2, con el mismo peso en la calibración.
- **Caso 4:** Se utilizan los cuatro puntos del Caso 1 con un peso de 1.0 y los 100 puntos de referencia distribuidos uniformemente del Caso 2 con un peso de 0.5.
- **Caso 5:** Se utilizan los cuatro puntos clave del Caso 1 con un peso de 1.0 y los 100 puntos de referencia distribuidos uniformemente del Caso 2 con un peso de 0.25.
- **Caso 6:** Se utilizan los cuatro puntos clave del Caso 1 con un peso de 1.0 y los 100 puntos de referencia distribuidos uniformemente del Caso 2 con un peso de 0.1.

Los casos 1 a 3 permiten analizar la influencia de los puntos de control seleccionados y los casos 3 a 6 la influencia de la ponderación de estos puntos

4.1. Influencia de los puntos de control empleados

Para los casos 1 a 3, el procedimiento de calibración proporciona los diagramas carga desplazamiento mostrados en la Fig. 5a (la Fig. 5b muestra un detalle del comienzo del diagrama). Los tres enfoques proporcionan un buen ajuste general con el diagrama experimental, representado con una línea gris punteada. Si se analiza la parte inicial del diagrama carga-desplazamiento, se observan diferencias interesantes. El pico inicial es claramente distinto en cada caso.

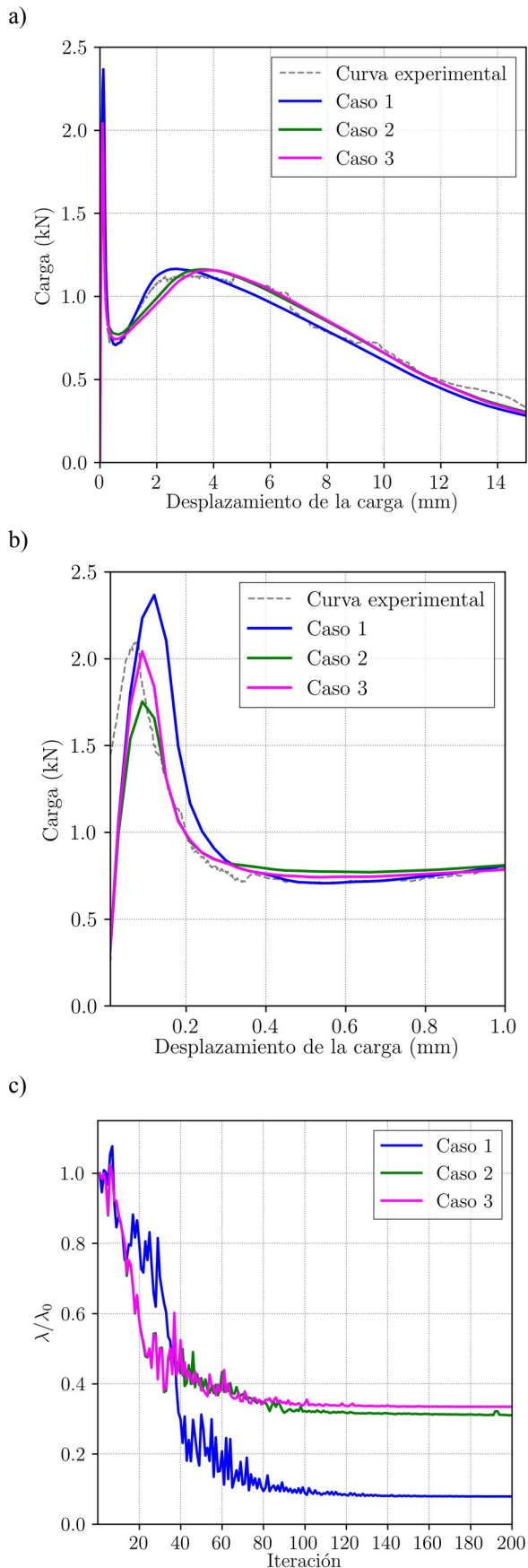


Figura 5. Resultado usando distintos puntos de referencia (Casos 1 a 3): curva carga-desplazamiento (con detalle) y evolución del valor de λ .

El Caso 1, que sólo usa cuatro puntos de referencia en el proceso de calibración, sobreestima claramente este pico de carga, mientras que el Caso 2 lo subestima y el Caso 3 proporciona la aproximación más precisa. En cuanto a la disminución de carga después del pico inicial, los tres enfoques proporcionan una aproximación bastante buena, aunque el Caso 2 proporciona un valor de carga ligeramente mayor. En cualquier caso, el Caso 3 parece proporcionar la mejor aproximación, ya que los otros dos enfoques tienen cierta falta de precisión alrededor del pico de carga. Si se analiza la precisión de la calibración en términos del factor de desviación, la Fig. 5c muestra la evolución del factor de desviación λ a lo largo del proceso de calibración, normalizado con el valor λ_0 , que corresponde al valor de λ en la primera iteración. En los tres casos, se obtiene una buena aproximación después de 100 iteraciones.

4.2. Influencia de la ponderación de los puntos de control

Los Casos 4, 5 y 6 utilizan un factor de ponderación de 1 para los cuatro puntos clave del Caso 1 y factores de ponderación de 0.5, 0.25 y 0.1, respectivamente, para los otros 100 puntos de referencia distribuidos de manera uniforme, empleados en el Caso 2.

La Fig. 6a muestra los diagramas carga desplazamiento mostrados y la Fig. 6b un detalle del comienzo de dichas curvas, comparándolas con el diagrama experimental, representado con una línea gris punteada, mientras que la Figura 6c muestra la evolución del factor de desviación λ a lo largo del proceso de calibración, normalizado con el valor λ_0 . En todos los casos, el proceso de calibración produce un buen ajuste general, aunque se pueden observar diferencias relevantes alrededor del pico inicial. Los Casos 3 y 4 proporcionan resultados muy similares, con el pico de carga cerca del valor experimental. Sin embargo, los Casos 5 y 6 muestran valores de pico menos precisos. Esto puede explicarse fácilmente, ya que reducir la relevancia de los puntos distribuidos uniformemente en el proceso de calibración a través del cálculo del factor de desviación λ lleva finalmente a un esquema de calibración similar al del Caso 1, donde sólo se consideraron cuatro puntos clave.

5. CONCLUSIONES

- El procedimiento de calibración propuesto ayuda a encontrar un conjunto de parámetros materiales que ajustan correctamente el modelo numérico a un diagrama experimental dado.
- La selección de los puntos tiene gran influencia en el resultado del ajuste numérico. Si faltan puntos clave, el resultado numérico no puede reproducir correctamente algunas partes del diagrama.

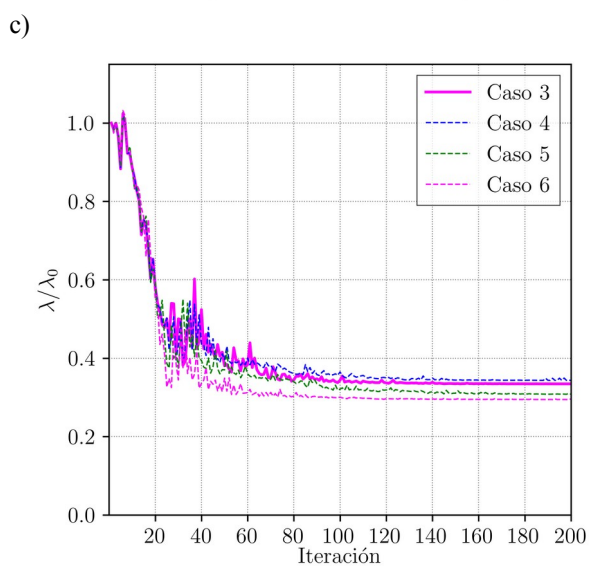
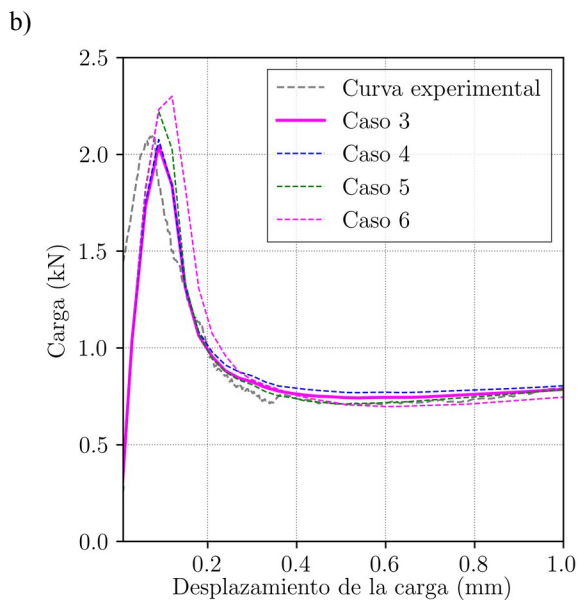
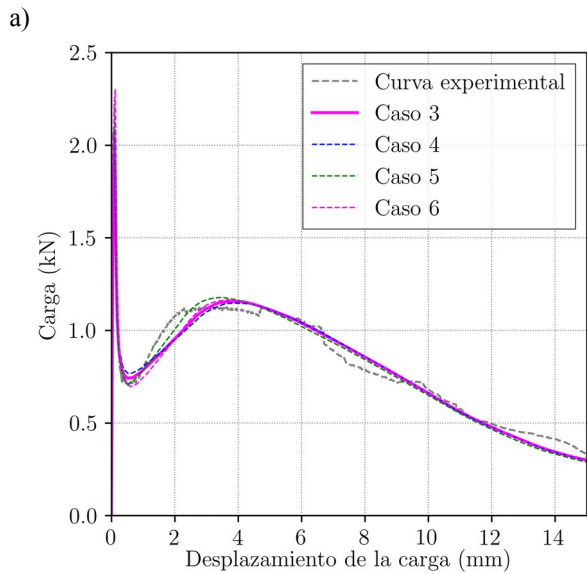


Figura 6. Resultado usando distintos puntos de referencia (Casos 1 a 3): curva carga-desplazamiento (con detalle) y evolución del valor de λ .

- El uso de diferentes factores de ponderación en algunos puntos de referencia para hacerlos más influyentes en el proceso de calibración es efectivo, aunque no ha demostrado ser muy relevante para obtener un buen ajuste.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo es parte de la ayuda PID2023-149321OA-C33 (NUMFIB), financiada por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades de España, por la Agencia Estatal de Investigación (10.13039/501100011033) y por el FSE+.

REFERENCIAS

- [1] Zollo RF. *Fiber-reinforced concrete: an overview after 30 years of development*. Cement and Concrete Composites. 1997;19(2):107-22.
- [2] Código estructural: Anejos 1-18. Ministerio de Transportes, Movilidad y Agenda Urbana, Madrid, España; 2021.
- [3] fib Model Code 2010. Fédération Internationale du Béton fib/International Federation for Structural Concrete: Paris, France. Ernst & Sohn, Wiley; 2013.
- [5] Oliver J, Linero DL, Huespe AE, Manzoli O. *Two-dimensional modeling of material failure in reinforced concrete by means of a continuum strong discontinuity approach*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2008;197(5):332-48.
- [6] Havlásek P, Kabele P. *A detailed description of the computer implementation of SHCC material model in OOFEM*. CTU in Prague. 2017.
- [7] Carvalho MR, Barros JAO, Zhang Y, da Costa DD. *A computational model for simulation of steel fibre reinforced concrete with explicit fibres and cracks*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2020;363:112879.
- [8] Suárez F. *A smeared crack formulation for simulating fracture of fibre-reinforced concrete by means of a trilinear softening diagram*. Engineering Fracture Mechanics. 2023;288:109356.
- [9] Alberti M, Enfedaque A, Gálvez J, Reyes E. *Numerical modelling of the fracture of polyolefin fibre reinforced concrete by using a cohesive fracture approach*. Composites Part B: Engineering. 2017;111:200-10.
- [10] Patzák B. *OOFEM—an object-oriented simulation tool for advanced modeling of materials and structures*. Acta Polytechnica. 2012;52(6).
- [11] Nelder JA, Mead R. *A simplex method for function minimization*. The computer journal. 1965;7(4):308-13.