



FACULTAD DE INGENIERÍA  
MAGÍSTER EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA  
CON MENCIÓN EN INGENIERÍA MECÁNICA

CARACTERIZACIÓN DE PROPIEDADES MECÁNICAS DE UN  
MATERIAL COMPUESTO DE HARINA DE MADERA-PET  
MEDIANTE HOMOGENEIZACIÓN COMPUTACIONAL Y  
PRUEBAS EXPERIMENTALES

**Pedro Alejandro Pesante Castro**

**Directores**

Dr. Gonzalo Pincheira Orellana

Dra. Karin Saavedra Redlich

Curicó - Chile

Noviembre de 2020

## CONSTANCIA

La Dirección del Sistema de Bibliotecas a través de su encargado Biblioteca Campus Curicó certifica que el autor del siguiente trabajo de titulación ha firmado su autorización para la reproducción en forma total o parcial e ilimitada del mismo.



Curicó, 2020

*Dedicado a toda mi familia, a mi hijo y pareja, quienes siempre me brindaron su apoyo incondicional.*

**Pedro**

# Agradecimientos

Agradecimientos a la Profesora Sra. Karin Saavedra y al Profesor Sr. Gonzalo Pincheira por su valiosa colaboración en la realización del presente trabajo.

Agradecimientos al ex alumno y colega Osvaldo Solís por los aportes brindados en el desarrollo de este documento.

Agradecimientos al personal docente y no docente del programa de magíster, en especial al perteneciente a la Escuela de Ingeniería Civil Mecánica de la Universidad de Talca.

Agradecimiento al proyecto FIC-R: Valorización de desechos reciclables a través de la creación de nuevos materiales para la fabricación de productos comercializables, por el financiamiento entregado.

Finalmente agradezco el beneficio obtenido en la reducción del arancel durante el período de este programa.

# Contenido

<b>Resumen</b>	<b>VI</b>
<b>Abstract</b>	<b>VII</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Planteamiento del problema . . . . .	2
1.2. Antecedentes bibliográficos . . . . .	2
1.3. Hipótesis . . . . .	3
1.4. Objetivos . . . . .	3
1.4.1. Objetivo general . . . . .	3
1.4.2. Objetivos específicos . . . . .	4
1.5. Organización del documento . . . . .	4
<b>2. Descripción de la publicación</b>	<b>5</b>
2.1. Alcances del proyecto . . . . .	6
2.2. Metodología y herramientas utilizadas . . . . .	6
2.3. Contribución de la publicación . . . . .	6
2.4. Homogeneización numérica . . . . .	7
2.5. Geometría, tamaño y malla del VER . . . . .	8
2.6. Probetas de ensayo . . . . .	9
2.6.1. Partículas de madera . . . . .	9
2.6.2. Tereftalato de polietileno (PET) . . . . .	10
2.6.3. Compuesto de plástico y madera . . . . .	10
<b>3. Discusión de los resultados</b>	<b>11</b>
3.1. Distribución de tamaño de partículas . . . . .	12
3.2. Orientación de partículas . . . . .	12
3.3. Resultados experimentales . . . . .	14
3.4. Resultados numéricos-experimentales . . . . .	15
3.5. Limitaciones . . . . .	18
3.6. Oportunidades futuras . . . . .	18
<b>4. Conclusiones</b>	<b>19</b>
<b>Anexo 1</b>	<b>24</b>

# Índice de figuras

2.1. Principio del esquema de homogeneización. . . . .	7
2.2. Representación de la orientación de una sola fibra a través del vector unitario $(p_1, p_2, p_3)$ en el sistema de coordenadas cartesianas o por $(1, \theta, \phi)$ en un sistema de coordenadas esféricas. . . . .	9
2.3. Geometría de probetas, flujo de inyección y zonas para medir la orientación de la partícula. . . . .	10
3.1. Distribución del tamaño de la harina de madera (de acuerdo al ancho de partícula). Las líneas rojas indican el ancho medio de las partículas que pertenecen a las composiciones A, B y C (0,377; 0,585 y 0,261 [mm], respectivamente). . . . .	13
3.2. Procesamiento de imágenes (plano $x - y$ ) en parte de la zona $J5$ para obtener el tensor de orientación de las fibras de una muestra A05. (Para la interpretación de las líneas de color, se remite al lector a la versión web de este documento.) . . . . .	13
3.3. Comparación numérica-experimental del Módulo de Young en la dirección $x$ para composiciones A05 y A10. Al igual que en una distribución espacial aleatoria (random 3D - O3), los resultados se consideran contenidos entre los límites de Voigt y Reuss en las direcciones axial y transversal, respectivamente. . . . .	17
3.4. Influencia del tamaño y de la orientación en el espacio de las partículas en el módulo de elasticidad en la dirección $x$ para los compuestos A10, B10 y C10. . . . .	17

# Índice de tablas

2.1. Composición de las probetas. . . . .	10
3.1. Tamaños de malla utilizados para tamizar (norma estándar ASTM E-11 [1]) y distribución del tamaño de la harina de madera en estudio (última columna). . . . .	12
3.2. Tamaños y AR de harina de madera. . . . .	12
3.3. Tensores de orientación de fibra para diferentes muestras y sus desviaciones estándar. Obtenido a partir de formulación A05. . . . .	14
3.4. Propiedades mecánicas y sus desviaciones estándar (ensayo de flexión de 3 puntos). . . . .	14
3.5. Dimensiones seleccionadas para cada VER de acuerdo a la orientación de partículas y al tipo de formulación. . . . .	15
3.6. Módulo de elasticidad para diferentes formulaciones con orientación de partículas aleatorias (la homogeneización periódica se calcula con el programa DIGIMAT). . . . .	16
3.7. Tensor de orientación usado para el método de homogeneización periodica en Fig. 3.3. . . . .	16

# CARACTERIZACIÓN DE PROPIEDADES MECÁNICAS DE UN MATERIAL COMPUESTO DE HARINA DE MADERA-PET MEDIANTE HOMOGENEIZACIÓN COMPUTACIONAL Y PRUEBAS EXPERIMENTALES

Pedro Alejandro Pesante Castro

## Resumen

Un compuesto de madera y plástico (WPC) se refiere a una matriz de polímero reforzada con partículas de madera. La madera es atractiva porque tiene una alta relación resistencia-peso, se integra fácilmente en las líneas de producción de plástico existentes y es un recurso renovable. Estos compuestos pueden ser más amigables con el medio ambiente si la matriz y los rellenos provienen de residuos de reciclaje, como el tereftalato de polietileno (PET) y la harina de madera – partículas finas de madera de las industrias de la madera. Debido a que la homogeneización computacional puede reducir los costos de procesamiento y experimentación, este trabajo propone estudiar las propiedades elásticas efectivas (EEP) de un compuesto elaborado a partir de PET y harina de madera de pino Radiata de Chile, utilizando simulaciones de elementos finitos de un volumen elemental representativo (RVE) con condiciones de borde periódicas. Las simulaciones se validan mediante ensayos de flexión estática de 3 puntos, con probetas obtenidas por extrusión e inyección. Aquí se examina el efecto de diferentes fracciones de peso, orientación en el espacio y tamaños de harina de madera. Las predicciones numéricas se confirman empíricamente en el sentido de que los compuestos con mayor contenido de harina de madera y mayor tamaño tienen un módulo de elasticidad más alto. Sin embargo, estos resultados son muy sensibles a la orientación de las partículas. Los enfoques de homogeneización de campo medio de Voigt y Reuss también se dan como límites superior e inferior. Las pruebas experimentales evidencian que las resistencias a la flexión del WPC disminuyen con respecto a las muestras de PET al 100 %, pero estas propiedades se pueden mejorar considerando distribuciones de tamaño de partícula en lugar de un tamaño fijo de harina de madera.

**Palabras clave** – Compuestos madera-plástico, homogeneización periódica, propiedades mecánicas, validación experimental.



# CHARACTERIZATION OF MECHANICAL PROPERTIES OF A WOOD FLOUR-PET COMPOSITE MATERIAL THROUGH COMPUTATIONAL HOMOGENIZATION AND EXPERIMENTAL TESTING

Pedro Alejandro Pesante Castro

## Abstract

A wood-plastic composite (WPC) refers to a polymer matrix reinforced with wood particles. Timber is attractive because it has a high strength to weight ratio, is easily integrated into existing plastic production lines and is a renewable resource. These composites can be further environment-friendly if the matrix and fillers are from recycling waste, such as polyethylene terephthalate (PET) and wood flour – fine particles of wood from woodworking industries. Because computational homogenisation can reduce processing and experimentation costs, this work proposes to study the effective elastic properties (EEP) of a composite made from PET and Chilean Radiate pine’s wood flour, using finite element simulations of a representative volume element (RVE) with periodic boundary conditions. Simulations are validated through a static 3-point bending test, with specimens obtained by extruding and injection. The effect of different weight fractions, orientation space and sizes of wood flour are here examined. Numerical predictions are empirically confirmed in the sense that composites with more wood flour content and bigger size, have higher elastic modulus. However, these results are very sensitive to the orientation of particles. Voigt and Reuss mean-field homogenisation approaches are also given as upper and lower limits. Experimental tests evidence that flexural strengths of WPC decrease respect to 100% PET specimens, but these properties can be enhanced considering particle-size distributions instead of a fixed size of wood flour.

**Keywords** – Wood-plastic composite, periodic homogenization, mechanical properties, experimental validation.

# Capítulo 1

## Introducción

## 1.1. Planteamiento del problema

Esta investigación tiene como problemática el constante aumento de plástico que se consume en el planeta. A partir de esto, surge la gestión de estos residuos como uno de los principales problemas a los que se enfrenta la sociedad moderna. Porque son la principal causa de problemas ambientales y sociales.

El tereftalato de polietileno (PET), que es 100 % reciclable, es uno de los termoplásticos más solicitados en el mundo y uno de los desechos plásticos más comunes. Solo en Chile, según estimaciones de la Asociación de Industriales del Plástico (Asipla), cada año se usan en el país más de 55 mil toneladas de PET virgen para la fabricación de botellas de bebidas, jugo, agua y otros líquidos. Tras su consumo, menos del 15 % de ese total llega a plantas de reciclaje para ser transformado en PET reciclado y ser usado en nuevos envases y otros productos. Este constante aumento hace del PET un material atractivo para la fabricación de compuestos de plástico y madera. Especialmente, si la matriz y los refuerzos son materiales reciclados. A esto se suma que en Chile y otros países miembros de la OECD han adoptado políticas, tal como la Ley 20.920 de Responsabilidad Extendida del Productor y Fomento al Reciclaje (REP) [2].

Por otra parte, las partículas de madera— específicamente la harina de madera— son un material de refuerzo atractivo para los compuestos de plástico y madera, debido a sus propiedades físicas y mecánicas. En Chile, el volumen de residuos sólidos de la industria de la madera, respecto del total consumido, en 2005 corresponde al 32,2 %, de los cuales un 16,3 % pertenecen al aserrín generado por aserraderos [3], mientras que en 2015 un 29,8 % y 15,5 % respectivamente [4]. Donde destaca, durante la pasada década, la participación del pino Radiata, la que superó el 95 % y dominó la producción de madera aserrada. Estas cifras, permiten considerar los residuos de aserrín de pino Radiata, como una opción viable para el procesamiento de otros materiales.

Finalmente, se observa la ausencia de información en relación a la caracterización mecánica de un material compuesto de PET y harina de madera de pino Radiata, considerando diferentes fracciones de peso, tamaño y relación de aspecto de las partículas de madera. Esta mezcla, además de contribuir a una economía circular de residuos, puede ser beneficiosa en múltiples aplicaciones debido a su gran resistencia a la humedad, gran estabilidad dimensional y gran resistencia a insectos y microorganismos.

## 1.2. Antecedentes bibliográficos

Conforme aumentan las necesidades del ser humano en disponer de soluciones tecnológicas cada vez más exigentes, también surge la necesidad de disponer de nuevos materiales que ofrezcan cada vez mejores prestaciones. Los materiales compuestos son capaces de combinar las propiedades que tienen los materiales cerámicos, los plásticos y los metales a la vez. Generalmente, el objetivo que se persigue con estos materiales compuestos es obtener un nuevo material cuyas propiedades sean mejores que las propiedades que poseen sus constituyentes actuando por separado.

Con enfoque en los materiales de plástico y madera, algunas investigaciones encontraron que incluso más importante que el tamaño de las partículas era la relación de aspecto (AR), o la relación de longitud a diámetro, de las partículas [5]. En general, las propiedades de tracción, compresión y flexión, así como la resistencia al impacto, pueden mejorarse al aumentar el tamaño o AR de las fibras de madera [5–8]. Cuando hay partículas con un AR más grande o se utilizan aditivos como agentes de acoplamiento, existe la posibilidad de una transferencia de carga más eficaz entre la matriz y las partículas que conducen a mejores propiedades mecánicas [8–12]. Si el material compuesto se fabrica por extrusión, la velocidad del doble tornillo puede afectar el tamaño de las partículas de madera o la absorción de humedad [13, 14], mientras que los pretratamientos químicos pueden aumentar la AR de las partículas durante el proceso [15]. Aunque se ha realizado un trabajo considerable para comprender las propiedades mecánicas del

WPC, la composición óptima del material sigue siendo un tema de investigación actual. Un enfoque se basa en investigar combinaciones experimentales con el fin de encontrar concentraciones óptimas [16,17], otra posibilidad –reduciendo el tiempo y costo– son los enfoques analíticos o numéricos para predecir las propiedades mecánicas finales. Esta última es la tendencia adoptada en este trabajo.

Los modelos que predicen las propiedades elásticas efectivas (PEE) se basan en modelos micromecánicos o continuos. El primero, tiene por objetivo determinar el comportamiento a gran escala (macroscópico) de un medio heterogéneo, basándose en las propiedades obtenidas a nivel microscópico; lo que, en resumen, se traduce a una descripción detallada pero costosa de un medio heterogéneo. Mientras que un modelo continuo trabaja sobre materiales homogéneos ideales y tiene como fin describir la respuesta del material frente a condiciones externas utilizando relaciones constitutivas apropiadas, las cuales, en general, se basan en experimentos macroscópicos fenomenológicos sin tener en cuenta consideraciones microestructurales. Sin embargo, todos los materiales son heterogéneos, aunque a cierta escala aparenten lo contrario. Por lo tanto, la descripción de materiales mediante la mecánica del continuo homogéneo es siempre una aproximación.

Las técnicas de homogeneización permiten tratar materiales heterogéneos mediante modelos continuos estimando propiedades efectivas a partir del conocimiento de las leyes constitutivas, la geometría y la orientación en el espacio de los constituyentes (es decir, a partir de un modelo micromecánico dado). Estos modelos analíticos se conocen como esquemas de homogeneización de campo medio y se basan en la solución de Eshelby [18], la formulación de Mori-Tanaka [19], las formulaciones autoconsistentes [20], la ecuación de Hashin-Shtrikman [21], entre otras. En general, proporcionan una precisión razonable a un costo computacional modesto [22,23], pero son principalmente aplicables para refuerzos que pueden aproximarse como elipsoides. Alternativamente, en los últimos años también se han desarrollado métodos de homogeneización computacional [24]. En estos enfoques, las simulaciones de elementos finitos (FE) se utilizan para resolver problemas con condiciones de borde (CdB) en un volumen elemental representativo (VER) – el volumen más pequeño sobre el que se puede realizar una medición que arroja un valor representativo del todo. La rigidez macroscópica del material puede obtenerse utilizando ecuaciones de promedio matemático estándar o de la matriz de rigidez del VER mediante un proceso de condensación estática. Se pueden derivar varios tipos de CdB a partir de la relación de promediado micro-macro adoptada, pero las condiciones de contorno periódicas han demostrado ser muy versátiles [25,26]. Luego, las cantidades macroscópicas se pueden transferir a la microescala a través de un problema de CdB que conduce a un VER deformado.

### 1.3. Hipótesis

La hipótesis consiste en intentar predecir numéricamente el módulo de elasticidad de distintas formulaciones fabricadas a partir de harina de pino Radiata y tereftalato de polietileno (PET), variando la fracción de madera (en base al peso), al tamaño, relación de aspecto y a la orientación de las partículas, y luego, validar estos resultados a través de ensayos experimentales. Se espera que al aumentar la fracción de partículas de madera, el módulo elástico aumente.

### 1.4. Objetivos

#### 1.4.1. Objetivo general

Fabricar, caracterizar y predecir las propiedades mecánicas de un nuevo material compuesto a partir de desechos reciclables.

### 1.4.2. Objetivos específicos

- Desarrollar un material compuesto a base de plástico PET y harina de pino Radiata.
- Caracterizar las propiedades mecánicas del nuevo material compuesto a través de ensayos mecánicos.
- Estudiar la influencia de los parámetros del nuevo material en sus propiedades finales (volumen de fibra, relación de aspecto, tamaño y orientación de partícula).
- Predecir y validar las propiedades mecánicas del nuevo material a través de simulaciones computacionales con un software comercial.

## 1.5. Organización del documento

El documento tiene la siguiente estructura: Cap. 2 describe los alcances y resume la metodología de homogeneización numérica y la estrategia experimental, mientras que en el Cap. 3 se realiza la comparación numérica y experimental. Las conclusiones se abordan en la Sec. 4. Finalmente, se anexa el respectivo artículo científico.

## Capítulo 2

# Descripción de la publicación

## 2.1. Alcances del proyecto

El presente trabajo de investigación tiene los siguientes alcances:

- Abarca únicamente a las materias primas señaladas: harina de pino radiata y tereftalato de polietileno.
- Material compuesto fabricado en las dependencias del Laboratorio de desarrollo de prototipos y productos de la Escuela de Ingeniería Civil Mecánica de la Universidad de Talca.
- Caracterizar y validar resultados numéricos de un material compuesto a base de ensayos mecánicos de flexión.
- Predecir las propiedades mecánicas del material a través de simulaciones computacionales con el software comercial DIGIMAT.
- Las propiedades en estudio son: módulo de elasticidad en flexión, resistencia a la flexión y elongación a la rotura.

## 2.2. Metodología y herramientas utilizadas

La metodología consiste en desarrollar dos áreas de investigación, la primera etapa es experimental y consiste en la caracterización de las propiedades mecánicas del material compuesto. Para llevar a cabo esta etapa, se requiere tener los materiales y equipos necesarios para la fabricación y ensayo de las muestras. Se comienza con la extrusión de filamentos, donde varían tanto el volumen de partículas de madera (como fibra) y de plástico PET (como matriz) en el compuesto, como también varía el tamaño de las partículas. Posterior a este proceso, continua el pelletizado e inyección del nuevo material, de forma que se consiguen probetas normadas para ensayo del tipo flexión de tres puntos. Finalmente, se obtiene el módulo de elasticidad en flexión al someter las probetas a ensayo.

La segunda etapa es de carácter teórico y consiste en validar simulaciones computacionales del análisis microestructural de los materiales, usando como base los resultados experimentales. Para aquello, se requiere de un software computacional comercial que trabaja con elementos finitos y teoría de homogeneización. De tal forma que se debe aportar con la información de cada material como parámetros de entrada. Estos son: densidades, módulos de elasticidad, módulos de corte, coeficientes de Poisson, como también de la dimensión y orientación en el espacio de las partículas de refuerzo.

Como especificaciones técnicas, la primera etapa considera: equipos de inyección y extrusión de polímeros, además de un equipo de ensayo universal. En cambio, la segunda etapa considera una computadora con gran capacidad de procesamiento y el software comercial DIGIMAT.

Parte de esta metodología se detalla en las secciones 2.4, 2.5 y 2.6.

## 2.3. Contribución de la publicación

El trabajo de investigación tiene como principal contribución validar los resultados obtenidos con la técnica de homogeneización, a partir de una elección de los parámetros de los materiales de fabricación, a través de ensayos experimentales. Lo que en la práctica, puede ser replicado a distintas formulaciones, con distintos materiales y tamaños de partícula. Finalmente, se presenta la opción de homogeneización numérica, como una alternativa válida en la predicción de propiedades mecánicas en materiales compuestos, lo que se traduce en un ahorro considerable en tiempos y costos de fabricación-experimentación.

## 2.4. Homogeneización numérica

Las simulaciones con elementos finitos (FE) se pueden utilizar para resolver problemas de distinta índole. La geometría o elemento es sometida a cargas y restricciones, conocidas como condiciones de borde (CdB). Esta geometría se subdivide en partes más pequeñas y que se conocen como elementos, que representan el dominio continuo del problema. Esta división permite resolver problemas complejos al subdividirlo en problemas más simples, permitiendo a la computadora hacer las tareas con eficiencia.

Una importante herramienta que ayuda a reducir los tiempos de procesamiento en materia de análisis de nuevos materiales compuestos es el VER, este es el volumen más pequeño sobre el que se puede realizar una medición que produce un valor representativo del todo. La rigidez macroscópica del material se puede obtener utilizando ecuaciones matemáticas promedio o desde la matriz de rigidez del VER, a través de un proceso de condensación estática. Se pueden derivar varios tipos de CdB a partir de la relación de promediación micro-macro adoptada, pero las CdB periódicas han demostrado ser más versátiles [25,26]. Luego, las cantidades macroscópicas se pueden transferir a la microescala a través de un problema de CdB que conduce a un VER deformado.

El concepto de homogeneización, desde el punto de vista más simple, es que un medio heterogéneo se comporta macroscópicamente de la misma forma que sus constituyentes, pero con diferentes valores de las constantes de los materiales. En los análisis micromecánicos los campos de tensiones y deformaciones en un material heterogéneo se dividen en las contribuciones correspondientes a diferentes escalas.

Asumiendo que el comportamiento del material a nivel micro es conocido y lineal elástico, y que además se puede describir su comportamiento mediante el tensor constitutivo elástico  $C_{ijkl}(x)$  consideramos un volumen  $V$  a nivel microscópico, que debe ser representativo de la totalidad del material. Este volumen  $V$  debe contener una cantidad suficiente de heterogeneidades y su tamaño  $d$  debe ser mucho más grande que el  $l$  característico de la microescala. A su vez,  $V$  debe ser lo suficientemente pequeño para ser asimilado a un punto en el nivel macroscópico. Una longitud característica  $L$  en este nivel puede determinarse según la geometría, la variación espacial en las cargas, o mediante los campos de tensión y deformación. Ambas condiciones anteriores pueden resumirse en la siguiente desigualdad:  $l \ll d \ll L$ , como se esquematiza en la Fig 2.1.

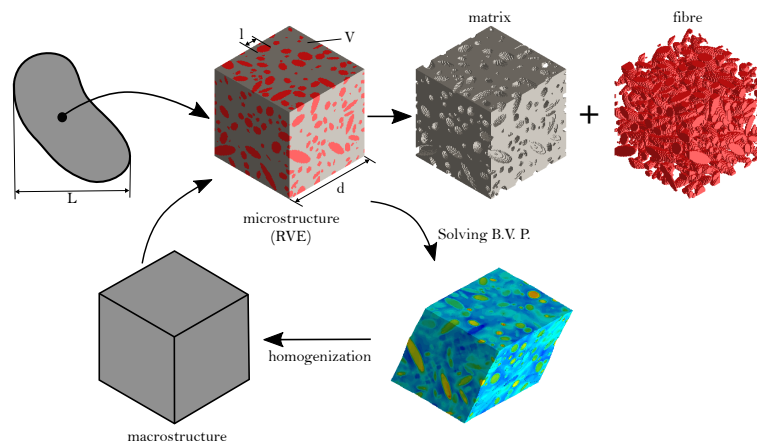


Figura 2.1: Principio del esquema de homogeneización.

Los modelos más simples se deben a Voigt y Reuss. El modelo de Voigt supone que el campo de deformación es uniforme dentro del VER. En consecuencia, se encuentra que la rigidez macro es el volumen promedio de las micro rigideces. En cambio en el modelo de Reuss, se supone que el campo de esfuerzo es uniforme en el VER. Por lo tanto, se encuentra que la macro flexibilidad (el inverso de la rigidez) es



el promedio en volumen de la micro flexibilidad. Las PEE encontradas son directamente identificadas como los límites superior (Voigt) e inferior (Reuss). Ambos modelos son demasiado simplistas. De hecho, asumir que las deformaciones o esfuerzos son uniformes dentro de un compuesto no es realista. Además, si cada fase es isotrópica, ambos modelos predicen un compuesto isotrópico, independientemente de la forma y orientación de las inclusiones, que es físicamente falso [27].

Con esta información entregada, lo que se busca es generar distintos VERs, lo más reales posibles, utilizando el programa computacional DIGMAT-FE. En el, es posible imponer CdB periódicas en todas las caras del VER, a través de un gran conjunto de ecuaciones que relacionan los grados de libertad de los nodos que están en una cara con los de los nodos correspondientes que están en el lado opuesto. Las CdB periódicas generalmente conducen a las mejores predicciones en comparación con las condiciones de Dirichlet, Neumann o de borde mixto. También muestra una velocidad de convergencia más rápida a medida que aumenta el tamaño del VER, pero a expensas de un mayor tiempo de CPU y requisitos de memoria debido al gran conjunto de restricciones que deben imponerse [27].

## 2.5. Geometría, tamaño y malla del VER

Una gran cantidad de refuerzos que se encuentran en materiales compuestos se pueden modelar como elipsoides (esferoides), incluidas partículas de relleno, escamas, fibras cortas y largas [28]. Debido a esto y para acercarnos a la geometría de las partículas de madera, asumimos una forma elipsoidal con propiedades transversalmente isotrópicas, donde la dirección longitudinal del material coincide con la dirección principal del elipsoide.

Desde un punto de vista geométrico, los parámetros son el tamaño de partícula (es decir, longitud y relación de aspecto) y la distribución del tamaño. Se estudian dos tipos de orientaciones en el espacio: partículas distribuidas aleatoriamente en 3D y partículas ligeramente orientadas para tener en cuenta los efectos de flujo debido al proceso de fabricación.

Una distribución 3D de elipsoides se puede describir mediante un tensor de segundo orden  $A$  y su valor propio asociado, como se propone en [29]:

$$[A] = \begin{bmatrix} a_{xx} & a_{xy} & a_{xz} \\ a_{yx} & a_{yy} & a_{yz} \\ a_{zx} & a_{zy} & a_{zz} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}; [e_1 \quad e_2 \quad e_3] \quad (2.1)$$

donde los vectores propios  $e_i$  indican las direcciones principales de la alineación de la partícula, mientras que los valores propios  $\lambda_i$  dan las proporciones estadísticas (0 a 1) de partículas alineadas con respecto a esas direcciones. Las nueve componentes del tensor de orientación se reducen a cinco componentes independientes debido a la simetría ( $a_{ij} = a_{ji}$ ) y la condición de normalización ( $a_{xx} + a_{yy} + a_{zz} = 1$ ).

Una partícula se puede representar en el espacio a través de coordenadas (ver Fig. 2.2), las cartesianas se pueden recuperar de las esféricas usando  $p_1 = \sin(\theta) \cos(\phi)$ ,  $p_2 = \sin(\theta) \sin(\phi)$  y  $p_3 = \cos(\theta)$ . Finalmente, el tensor de orientación se puede definir como un producto diádico de los vectores unitarios, tal como muestra la ecuación 2.2:

$$[A] = \begin{bmatrix} a_{xx} & a_{xy} & a_{xz} \\ a_{yx} & a_{yy} & a_{yz} \\ a_{zx} & a_{zy} & a_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_1^2 & p_1 p_2 & p_1 p_3 \\ p_1 p_2 & p_2^2 & p_2 p_3 \\ p_1 p_3 & p_2 p_3 & p_3^2 \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

Una orientación predominante determina un componente del tensor de orientación cercano a 1. En cambio, si la probabilidad es débil, el componente tensor correspondiente tiene un valor cercano a 0. Para una distribución aleatoria, las componentes son  $a_{xx} = 1/3$ ,  $a_{yy} = 1/3$  y  $a_{zz} = 1/3$ .

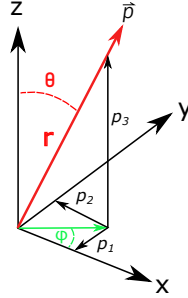


Figura 2.2: Representación de la orientación de una sola fibra a través del vector unitario  $(p_1, p_2, p_3)$  en el sistema de coordenadas cartesianas o por  $(1, \theta, \phi)$  en un sistema de coordenadas esféricas.

Otro parámetro es el grado de orientación  $O_D$  que es un valor escalar que describe la fuerza de la orientación principal de un tensor. Se calcula mediante el valor propio más grande representado por  $\lambda_1$ . De esta forma, el grado de orientación se puede obtener de la siguiente manera:

$$O_D = \frac{3}{2} \left( \lambda_1 - \frac{1}{3} \right) \quad (2.3)$$

Previo a realizar la homogeneización numérica, se estudia el tamaño del VER, hasta encontrar el tamaño mínimo para el que convergen las PEE. Estos volúmenes se obtienen utilizando la generación periódica automática del software comercial DIGMAT-FE. Se propone un VER cúbico para el caso de distribución aleatoria, mientras que los VER rectangulares se eligen para distribuciones orientadas, para más detalles revisar Tab. 3.5. Esta elección se realiza con el fin de aumentar la velocidad de generación del volumen y reducir el tiempo en el cálculo de resultados.

Una vez establecidas las dimensiones del VER, continua la definición de la malla. El modelado de voxelización es aconsejable para admitir simulaciones basadas en FE para modelos complejos. Para esto, se realiza un nuevo estudio teniendo en cuenta los recursos computacionales disponibles y de acuerdo a la convergencia en los resultados. De tal forma que la resolución mínima de malla del VER se selecciona a  $100 \times 100 \times 100$  vóxeles (para las direcciones  $x$ ,  $y$  y  $z$ ) y se utiliza en toda la homogeneización numérica de esta investigación.

## 2.6. Probetas de ensayo

En esta sección, se presentan las formulaciones de los materiales compuestos, considerando las propiedades elásticas de los microconstituyentes, las fracciones de peso, las consideraciones geométricas, orientaciones en el espacio y también los procesos de fabricación.

### 2.6.1. Partículas de madera

El material de refuerzo es harina de madera de pino Radiata, finamente particulada y con un contenido de humedad del 1% basado en el peso (después de secar en un horno a  $100$  [°C] durante 24 horas). Las propiedades elásticas tomadas en cuenta provienen de la literatura disponible [30], pero se simplifica la madera como material transversalmente isotrópico, debido a la suposición elipsoidal hecha en la Sec. 2.5, así, las propiedades son: módulos de elasticidad longitudinales y transversales  $E_{xx} = 11,059$  [GPa],  $E_{yy} = 1,201$  [GPa]; Coeficientes de Poisson  $\nu_{xy} = 0,4$  [-],  $\nu_{xz} = 0,3$  [-]; módulo de corte transversal  $G_{xy} = 1,339$  [GPa]; y densidad  $419,9$  [kg/m<sup>3</sup>].

### 2.6.2. Tereftalato de polietileno (PET)

La matriz de polímero utilizada es tereftalato de polietileno virgen (PET), con una viscosidad de 0,82 [dl/g], temperatura de fusión entre 240-260 [°C], módulo de Young  $E = 2,345$  [GPa] y el coeficiente de Poisson  $\nu = 0,41$  [-].

### 2.6.3. Compuesto de plástico y madera

Se estudian dos proporciones de pesos de harina de madera y PET utilizando las partículas con la distribución de tamaño A, mientras que las partículas con un tamaño fijo (casos B y C) se utilizan para preparar compuestos con un contenido de madera de 10% basado en el peso total. La tabla 2.1 presenta las cuatro composiciones a estudiar.

Tabla 2.1: Composición de las probetas.

probetas	PET (% en peso)	harina de madera (% en peso)
A05	95	5
A10	90	10
B10	90	10
C10	90	10

Una extrusora de laboratorio, modelo TS 16-30 (Gülнар Makina, Turquía), equipada con un doble tornillo de diámetro 16 [mm] y un alimentador volumétrico de un solo tornillo se utilizó para fabricar los compuestos de WPC. El PET y las partículas de madera se premezclaron manualmente antes de la extrusión. Finalmente, la salida es un filamento de WPC continuo con un diámetro de 3,0 [mm]. El perfil de temperatura, por orden de entrada a salida del material, es de 90, 245, 242, 239, 235 y 230 [°C]. Mientras que la velocidad de rotación se fija en 20 [rpm] para todas las composiciones. Las diferentes muestras se moldearon en una máquina de inyección manual modelo 490-170 Clarke 25 a una temperatura de 237 [°C]. La geometría de la muestra está en concordancia con las pruebas de flexión de 3 puntos definidas en la norma ASTM D790 [31], donde  $L = 80$  [mm],  $H = 3,5$  [mm] y  $W = 10$  [mm], como muestra la Fig. 2.3.

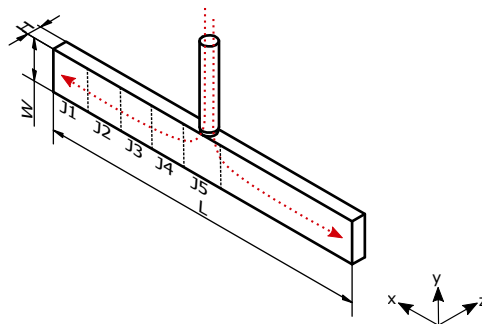


Figura 2.3: Geometría de probetas, flujo de inyección y zonas para medir la orientación de la partícula.

## Capítulo 3

# Discusión de los resultados

### 3.1. Distribución de tamaño de partículas

El tamaño de la harina de madera se caracteriza primero en un proceso de tamizado, de acuerdo con la especificación ASTM E-11 [1], para lo cual las notaciones de malla y los tamaños de tamiz correspondientes se muestran en la Tab. 3.1. La distribución del tamaño de partícula resultante y utilizadas en este trabajo se presentan en la Fig. 3.1, donde la media del tamaño (ancho) de partícula en la distribución de probabilidad es 0,377 [mm].

Tabla 3.1: Tamaños de malla utilizados para tamizar (norma estándar ASTM E-11 [1]) y distribución del tamaño de la harina de madera en estudio (última columna).

tamiz	rango tamaño malla		orificios del tamiz [mm]		tamaño promedio de partícula [mm]	porcentaje (%)
	mínimo	máximo	mínimo	máximo		
-	fondo	100	0	0,15	0,075	18
85m	100	70	0,150	0,212	0,181	13,5
60m	70	50	0,212	0,300	0,256	16
45m	50	40	0,300	0,425	0,363	17
35m	40	30	0,425	0,600	0,513	15
25m	30	20	0,600	0,850	0,725	19
15m	20	10	0,850	2,000	1,425	1,5

Los WPC se fabricaron usando: i) la línea completa de tamices (caso A); y ii) partículas retenidas por los tamices 25m y 60m, respectivamente. Para caracterizar mejor el tamaño y la relación de aspecto (AR), se midió la harina de madera de los tamices de 25m (caso B) y 60m (caso C) con un microscopio óptico modelo Leica EZ4E. Del mismo modo, se midió una muestra aleatoria de la línea completa de tamices para estimar un AR promedio. La Tab. 3.2 resume los parámetros obtenidos para las tres formulaciones utilizadas. Es importante notar que el tamaño y AR son previos al proceso de fabricación, pero la geometría de las partículas después del procesamiento puede diferir de la inicial debido a la energía inducida dentro del proceso de extrusión e inyección [32].

Tabla 3.2: Tamaños y AR de harina de madera.

muestra	ancho [mm]	porcentaje [%]	AR
A	0,075	18	3,500
	0,181	13,5	
	0,256	16	
	0,363	17	
	0,513	15	
	0,725	19	
	1,425	1,5	
B	0,585	100	3,385
C	0,261	100	2,802

### 3.2. Orientación de partículas

La distribución en el espacio de las partículas de madera dentro de la matriz polimérica se analiza utilizando las nociones de la Sec. 2.5. Para obtener el tensor de orientación promedio, se analizan un total de 118 partículas a través de imágenes de la superficie de las probetas (plano  $x - y$  visto en la Fig. 2.3). Para una mayor simplicidad, se supone que las partículas no tienen una inclinación en la dirección  $z$ .

### Capítulo 3

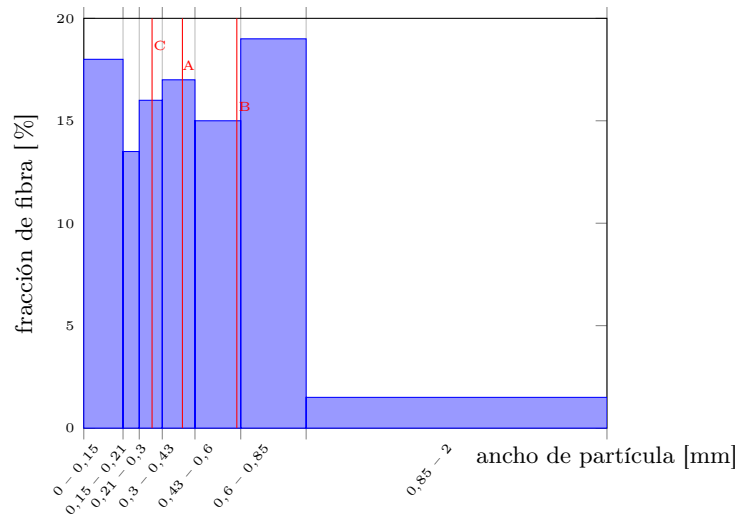


Figura 3.1: Distribución del tamaño de la harina de madera (de acuerdo al ancho de partícula). Las líneas rojas indican el ancho medio de las partículas que pertenecen a las composiciones A, B y C (0,377; 0,585 y 0,261 [mm], respectivamente).

El procesamiento de las imágenes en el plano se realiza a partir de la longitud y el ángulo formado en cada partícula, como se ejemplifica en la Fig. 3.2. Luego, se obtienen los componentes tensoriales  $a_{xx}$ ,  $a_{yy}$  y  $a_{xy}$  usando las ecuaciones de coordenadas cartesianas (para obtener  $p_1$ ,  $p_2$  y  $p_3$ ) y aplicándolas en la ecuación 2.2. A partir de los resultados para cinco zonas diferentes, detalladas en la Tabla 3.3, se observa que las partículas se orientan preferentemente en la dirección  $x$ , es decir, en la dirección del flujo.

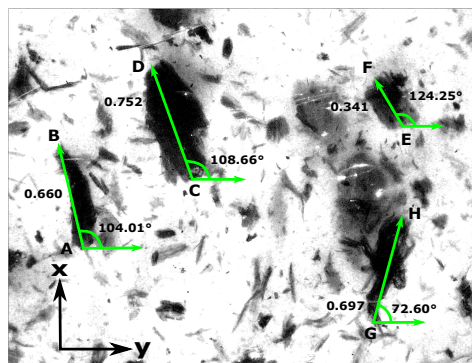


Figura 3.2: Procesamiento de imágenes (plano  $x - y$ ) en parte de la zona J5 para obtener el tensor de orientación de las fibras de una muestra A05. (Para la interpretación de las líneas de color, se remite al lector a la versión web de este documento.)

Tabla 3.3: Tensores de orientación de fibra para diferentes muestras y sus desviaciones estándar. Obtenido a partir de formulación A05.

Muestra	$a_{xx}$	$a_{yy}$	$a_{xy}$
J1	0,600	0,400	0.279
J2	0,712	0,288	0.309
J3	0,519	0,481	0.306
J4	0,538	0,462	0.334
J5	0,617	0,383	0.283
Promedio	0,597	0,403	0.302
D.E.	0,076	0,076	0.022

### 3.3. Resultados experimentales

Para obtener las propiedades mecánicas de las distintas formulaciones, se realizan ensayos de resistencia a la flexión de acuerdo con la norma ASTM D790 [31], a través de pruebas de flexión de 3 puntos utilizando una máquina de ensayos universal modelo Zwick Roell, que cuenta con una celda de carga de 5 [kN] y un software de prueba testXpert. La distancia entre soportes fue 16 veces (56 [mm]) la profundidad de la muestra (un promedio de  $H = 3,5$  [mm]) y la velocidad de carga fue de 1 [mm/min]. Se llevaron a cabo al menos cinco muestras para cada compuesto definido en Tab. 2.1.

La Tab. 3.4 resume el módulo de flexión – es decir, el módulo de elasticidad en la dirección  $x$  – y la resistencia a la flexión de las cuatro formulaciones y también de una muestra fabricada de 100 % PET.

Tabla 3.4: Propiedades mecánicas y sus desviaciones estándar (ensayo de flexión de 3 puntos).

Probetas	Módulo de flexión [GPa]	Resistencia a la flexión [MPa]
PET	$2,345 \pm 0,073$	$66,95 \pm 16,78$
A05	$2,542 \pm 0,088$	$19,66 \pm 0,49$
A10	$2,968 \pm 0,073$	$29,00 \pm 3,70$
B10	$3,147 \pm 0,158$	$24,37 \pm 10,53$
C10	$2,952 \pm 0,300$	$23,74 \pm 5,43$

A partir de estos resultados, se puede observar que al agregar 5 % en peso (10 % en peso, respectivamente) de partículas de madera a la matriz de PET, el módulo de flexión aumenta 8,0 % (26,1 % como promedio, respectivamente). Luego se verifica que el módulo de flexión no solo aumenta con el contenido de harina de madera, sino también con el tamaño de las partículas de madera. De hecho, al comparar un WPC con 10 % en peso de refuerzo, las muestras B10 tienen partículas 124,14 % más grandes que las de C10, luego su módulo elástico es 6,6 % más grande que las muestras C10. Mientras que, si las partículas no se tamizan (caso A10), el módulo de elasticidad es similar al de las muestras C10. Esta tendencia es conocida por distintos autores [5–8], que señalan un aumento de ciertas propiedades mecánicas en tracción, flexión y en compresión a medida que aumenta el valor de la relación de aspecto.

Por otro lado, la adición de partículas de madera disminuye la resistencia a la flexión respecto a una muestra fabricada solo de PET, pero esta propiedad mejora (considerando las formulaciones con refuerzos) a medida que aumenta la cantidad de refuerzo. De esta forma, observamos que para un 5 % en peso (10 % en peso, respectivamente) de refuerzo, la resistencia se reduce en 70,63 % (56,68 % como promedio, respectivamente). Sin embargo, considerar la harina de madera con una distribución de tamaños (caso A10) permite mejorar la resistencia a la flexión (19,0 % y 22,16 % más alta que B10 y C10, respectivamente). Es importante notar que las desviaciones estándar de las resistencias a la flexión aumentan para los tamaños tamizados (casos B10 y C10).

La notoria disminución de la resistencia a la flexión, podría ser contrarrestada al incorporar en la formulación a un agente compatibilizante. Este puede actuar como un promotor de adhesión entre un polímero y un material de naturaleza diferente, como es el caso de la madera. Una mejor adhesión entre los componentes da como resultado mejores propiedades mecánicas.

En resumen, el módulo de flexión aumenta al aumentar el contenido de harina de madera, ya que las partículas de madera poseen una rigidez mayor que la del plástico PET. Además, la incorporación de estas fibras en la matriz reduce la movilidad del material, lo que da como resultado una mayor rigidez del compuesto.

### 3.4. Resultados numéricos-experimentales

La comparación que se obtiene, se basa en el módulo elástico en la dirección  $x$ , es decir, en la dirección del flujo en el proceso de inyección (ver Fig. 2.3). Los valores experimentales son de Tabla 3.4 y las simulaciones se llevan a cabo utilizando el método de homogeneización periódica en el programa DIGIMAT, donde los distintos VER se calibran cuidadosamente de acuerdo con la Sec. 2.5 y donde se obtienen las dimensiones presentadas en la Tab. 3.5.

Tabla 3.5: Dimensiones seleccionadas para cada VER de acuerdo a la orientación de partículas y al tipo de formulación.

formulación	orientación de partícula	tamaño del VER [mm]		
		$x$	$y$	$z$
A(05-10)	O1	2,0	2,0	1,0
B10		9,244	7,987	3,930
C10		3,158	3,345	1,710
A(05-10)	O2	2,0	2,0	1,0
B10		8,391	8,963	3,958
C10		3,434	3,023	1,698
A(05-10)	O3 (aleatorio)	2,0	2,0	2,0
B10		8,0	8,0	8,0
C10		2,0	2,0	2,0

Para estudiar la influencia de los tamaños de partículas y sus orientaciones, primero se analizan las simulaciones que tienen en cuenta una distribución aleatoria de partículas completamente en 3D. El módulo de elasticidad en las direcciones  $x$  e  $y$  se calcula para diferentes tamaños de partículas (ver Tab. 3.2), diferentes contenidos de madera (5 % y 10 % en base a peso de madera) y usando tres métodos de homogeneización (Voigt, Reuss y periódico), como se muestra en la Tab. 3.6. Como se encontró anteriormente en [33], los módulos elásticos homogeneizados periódicos son casi los mismos en ambas direcciones – es decir, se obtiene un material compuesto cuasi-isotrópico – y están contenidos en los límites de Voigt y Reuss en las direcciones axial y transversal, respectivamente. Tanto para el contenido de madera, los módulos de Young obtenidos de la homogeneización periódica son muy cercanos a los tres tamaños de partículas (A, B y C). Finalmente, el módulo elástico aumenta como promedio 2,08 % (4,36 %) si un 5 % en peso de madera (10 % en peso de madera, respectivamente) se agrega al PET. Estos resultados son significativamente más bajos que los experimentales, especialmente para el mayor contenido de madera. De hecho, el módulo elástico obtenido en las simulaciones numéricas es 5,31 %, 16,78 %, 23,09 % y 16,01 % más bajo que los medidos experimentalmente para las composiciones A05, A10, B10 y C10, respectivamente. Esta discrepancia puede explicarse porque las partículas pueden adoptar una orientación espacial particu-



Capítulo 3

lar de acuerdo con el proceso de fabricación de las muestras, como se verifica empíricamente en la Sec. 3.2.

Tabla 3.6: Módulo de elasticidad para diferentes formulaciones con orientación de partículas aleatorias (la homogeneización periódica se calcula con el programa DIGIMAT).

% en peso de madera	método de homogeneización	módulo de elasticidad	módulo de elasticidad
		$x$ -dirección	$y$ -dirección
5	Voigt	2,782	2,356
	Reuss	2,441	2,238
	periódica (partículas A)	2,402	2,412
	periódica (partículas B)	2,392	2,425
	periódica (partículas C)	2,381	2,406
10	Voigt	3,218	2,347
	Reuss	2,546	2,141
	periódica (partículas A)	2,501	2,439
	periódica (partículas B)	2,411	2,430
	periódica (partículas C)	2,496	2,463

Si se da una orientación específica a las partículas de madera indicando el tensor de orientación en el procesamiento de homogeneización periódica en el programa DIGIMAT, el módulo elástico numérico se ve afectado. De esta forma, la Fig. 3.3 compara el módulo elástico en la dirección  $x$  para los compuestos A05 y A10, teniendo en cuenta las pruebas experimentales, los límites de Voigt y Reuss y las predicciones numéricas con tres orientaciones: una completamente aleatoria y las dos configuraciones definidas por los tensores detallados en la Tab. 3.7, donde es importante notar que la orientación O1 está de acuerdo con el tensor encontrado por el procesamiento de imágenes en Tab. 3.3 para una muestra A05. Debido a que las partículas no son esféricas, se observa que cuanto más se alinean preferentemente en la dirección del flujo de inyección, más aumenta el módulo de Young. De esta forma, considerando el tensor de orientación O1 (O2), el módulo elástico numérico es 13,27% (20,39%, respectivamente) más alto que el de la disposición aleatoria. Finalmente, la predicción con orientación O1 (es decir, la del procesamiento de imágenes) está de acuerdo con el módulo de Young experimental para el compuesto A05. Sin embargo, en el caso del 10% de contenido de madera, la orientación O1 no coincide lo suficiente con las pruebas empíricas, pero una simulación con un grado más alto de alineación de partículas (es decir, la orientación O2) está de acuerdo con la experimentación. Este resultado podría explicarse bajo la hipótesis de que el proceso de inyección induce a las partículas a orientarse en la dirección del flujo de una manera más severa si se agrega contenido de madera en mayor cantidad.

Tabla 3.7: Tensor de orientación usado para el método de homogeneización periódica en Fig. 3.3.

	$a_{xx}$	$a_{yy}$	$a_{zz}$	$a_{xy}$	$a_{xz}$	$a_{yz}$	grado de orientación
O1	0,6	0,4	0	0,3	0	0	0,7243
O2	0,7	0,3	0	0,3	0	0	0,7908
O3	1/3	1/3	1/3	0	0	0	0

La Fig. 3.4 muestra el módulo de elasticidad para las formulaciones con 10% en peso de madera y tres tamaños de partículas diferentes (A, B y C), donde el método de homogeneización periódica se compara con los resultados experimentales. En primer lugar, para cada caso (experimental, de homogeneización periódica con orientación O1 y homogeneización periódica con orientación O2) se verifica que el módulo de Young en la dirección  $x$  para B10 es mayor que para los compuestos A10, y este último es levemente mayor que para compuestos C10. En segundo lugar, las predicciones numéricas que consideran la orientación O1 arrojan resultados muy por debajo de los valores empíricos (excepto para C10), mientras que la orientación

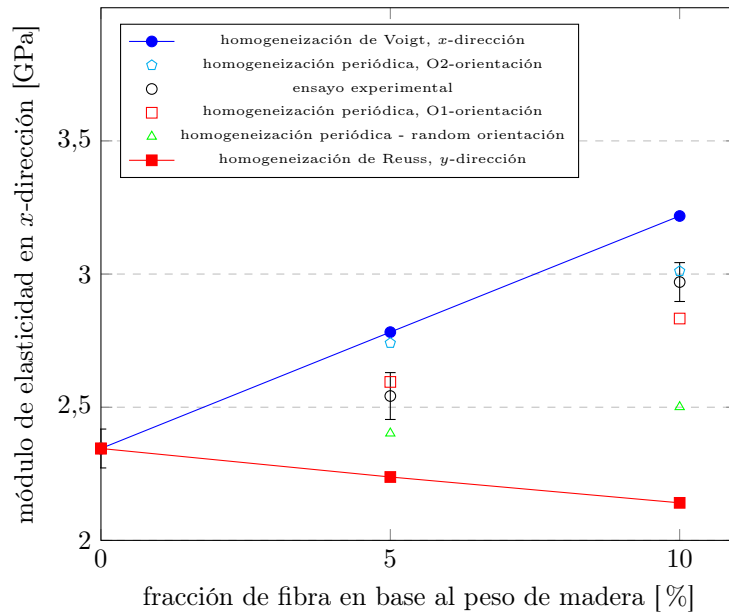


Figura 3.3: Comparación numérica-experimental del Módulo de Young en la dirección  $x$  para composiciones A05 y A10. Al igual que en una distribución espacial aleatoria (random 3D – O3), los resultados se consideran contenidos entre los límites de Voigt y Reuss en las direcciones axial y transversal, respectivamente.

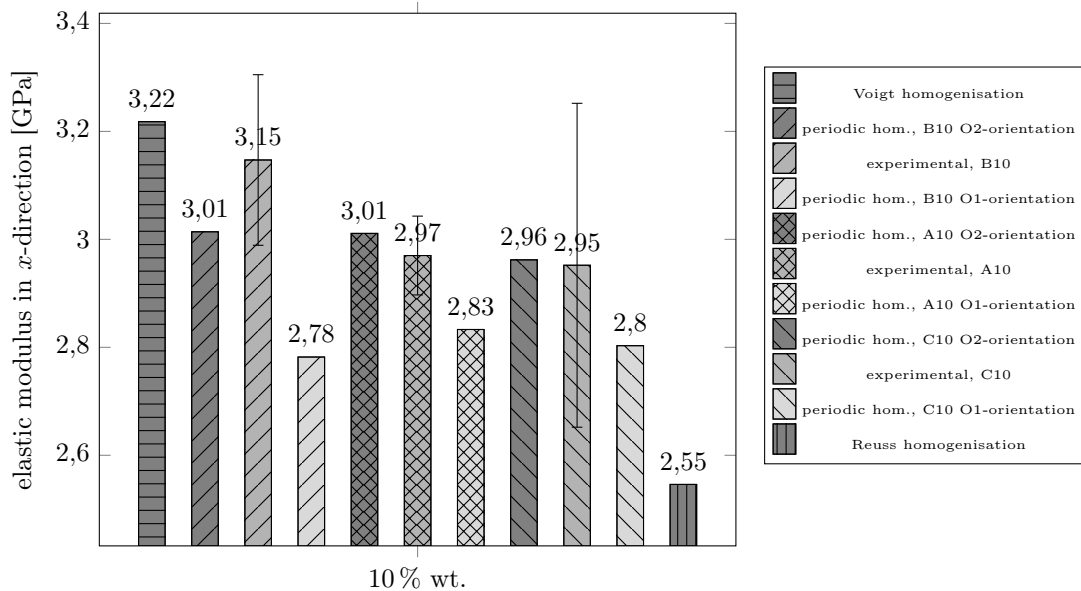


Figura 3.4: Influencia del tamaño y de la orientación en el espacio de las partículas en el módulo de elasticidad en la dirección  $x$  para los compuestos A10, B10 y C10.

O2 coincide con los tres resultados experimentales. Sin embargo, B10 tiene la mayor diferencia entre los valores medios numéricos y experimentales, entonces se puede suponer que los compuestos B10 tienen partículas con un grado de orientación con respecto al eje  $x$  superior a 79% (ver Tabla 3.7), de acuerdo

con la Ec. 2.3. Además, la simulación con distribución de partículas aleatorias (caso con orientación O3) tiene el módulo de elasticidad más débil. Finalmente, de acuerdo a la comparativa presentada en la Fig. 3.4, se puede concluir que para un contenido fijo de madera, el módulo de elasticidad en la dirección del flujo aumenta cuando aumenta el tamaño promedio de partícula.

### 3.5. Limitaciones

Las principales limitaciones de esta investigación son:

- La falta de estudios previos de investigación sobre el tema, los que en su mayoría utilizan agentes de acoplamiento, o compatibilizantes, que mejoran la adhesión de la interfaz refuerzo-matriz. Además, no involucran al PET como matriz.
- La falta de datos disponibles. Se limita a la comparativa del módulo elástico en flexión debido a no contar con los equipos técnicos para conseguir otras propiedades, tales como: módulo de corte, coeficiente de Poisson y densidad.
- Acceso a los equipos de procesamiento y análisis óptico adecuados para controlar otros factores, tales como: velocidad de inyección y orientación de partículas en concentraciones de madera superior al 5% en peso. Lo que se traduciría en resultados más certeros.
- Para las simulaciones computacionales se utiliza un software comercial y no uno gratuito o de código abierto. Lo que en la práctica limita el uso de esta metodología.

### 3.6. Oportunidades futuras

Los resultados obtenidos, podrían ser más certeros si se utilizan técnicas avanzadas de procesamiento de imagen para identificar el tensor de orientación de partículas, especialmente si se analiza el volumen completo. Otro campo potencial de investigación, y que se complementa con lo recién mencionado, es la predicción de la distribución de la orientación de las fibras en procesos de inyección, a través de simulaciones computacionales, por ejemplo: en el programa Moldflow es posible simular el flujo de un polímero en un molde por medio de la técnica de moldeo por inyección.

Se plantea también un estudio de materiales compatibilizantes que puedan aumentar la adhesión fibra-matriz y así obtener nuevas y mejores propiedades mecánicas.

Las áreas adicionales de incertidumbre, y que deberían estudiarse, para partículas de madera industrial incluyen el efecto de la longitud real de las partículas después del procesamiento y las posesiones de residuos minerales o extractos.

Finalmente, se requiere más investigación para descubrir las relaciones estructura-propiedad de estos compuestos, para identificar y superar otras debilidades y limitaciones, desarrollando potencialmente mercados completamente nuevos.

## Capítulo 4

# Conclusiones

## Capítulo 4

En este trabajo, basado en la caracterización mecánica de los compuestos de PET y harina de madera, se utilizan los ensayos de flexión como validación de los resultados obtenidos por el método de homogeneización periódica. Se investiga la influencia del tamaño del VER, el tensor de orientación de las partículas de madera, el tamaño de partícula y la relación de aspecto en las propiedades macroscópicas estimadas.

Los principales resultados de este trabajo son:

- Experimentalmente, se ha verificado que el módulo de elasticidad no solo aumenta con el contenido de harina de madera (8,0% y 26,1% por 5% y 10% en peso de madera, respectivamente) de las partículas de madera, sino también con partículas más grandes.
- Experimentalmente, se observa que la harina de madera disminuye la resistencia a la flexión con respecto a la muestra de PET al 100%, pero esta propiedad mejora a medida que aumenta la cantidad de refuerzo. También, se verifica que si no se tamizan las partículas el módulo de elasticidad es similar a otras distribuciones, pero la resistencia a la flexión mejora en un 20% (para compuestos con 10% en peso de madera).
- Numéricamente, considerando la orientación aleatoria de partículas, el módulo elástico aumenta como promedio un 10,24% y un 19,20% si existe un 5% y un 10% en peso de madera, respectivamente. Sin embargo, esos resultados son significativamente más bajos que los experimentales. Esta discrepancia se explica porque el proceso de inyección induce a las partículas a orientarse en la dirección del flujo, especialmente si se agrega contenido de madera en mayor cantidad o se utilizan partículas más grandes.
- Se ha demostrado que la técnica de homogeneización puede predecir el módulo de elasticidad de los compuestos de PET y madera. Los resultados experimentales y numéricos se encuentran dentro de los límites superior (Voigt) e inferior (Reuss). Sin embargo, puede ser muy sensible a la orientación espacial de las fibras, producto del proceso de fabricación de las muestras, y es necesario medirlo cuidadosamente como parámetro de entrada para las simulaciones. El procesamiento de imágenes mediante tomografía computarizada podría ser una herramienta potencial.

# Bibliografía

- [1] A. International, ASTM E11-15, Standard Specification for Woven Wire Test Sieve Cloth and Test Sieves, West Conshohocken, PA (2015).
- [2] OECD, Extended Producer Responsibility: Updated Guidance for Efficient Waste Management, OECD Publishing, 2016.
- [3] Comisión Nacional de Energía (CNE), Disponibilidad de residuos madereros, 2007.
- [4] J. G. Caselli, D. S. Aguirre, Industria Forestal Primaria en Chile: Período 2006 -2015, 2016.
- [5] N. M. Stark, R. E. Rowlands, Effects of wood fiber characteristics on mechanical properties of wood/polypropylene composites, *Wood and Fiber Science* 35 (2) (2003) 167–174.
- [6] H. Chen, T. Chen, C. Hsu, Effects of wood particle size and mixing ratios of hdpe on the properties of the composites, *Holz als Roh- und Werkstoff* 64 (3) (2006) 172–177.
- [7] T. Mbarek, L. Robert, F. Hugot, J.-J. Orteu, Mechanical behavior of wood-plastic composites investigated by 3D digital image correlation, *Journal of Composite Materials* 45 (26) (2011) 2751–2764.
- [8] M. Schwarzkopf, L. Muszynski, Strain distribution and load transfer in the polymer-wood particle bond in wood plastic composites, *Holzforschung* 69 (1) (2015) 53 – 60.
- [9] A. Schirp, J. Stender, Properties of extruded wood-plastic composites based on refiner wood fibres (tmp fibres) and hemp fibres, *European Journal of Wood and Wood Products* 68 (2) (2010) 219–231. doi:10.1007/s00107-009-0372-7. URL <https://doi.org/10.1007/s00107-009-0372-7>
- [10] J. Lisperguer, X. Bustos, Y. Saravia, C. Escobar, H. Venegas, Efecto de las características de harina de madera en las propiedades físico-mecánicas y térmicas de polipropileno reciclado, *Maderas, Ciencia y Tecnología* 15 (3) (2013) 321–336.
- [11] K.-S. Rahman, M. Islam, M. Rahman, M. Hannan, R. Dungani, H. A. Khalil, Flat-pressed wood plastic composites from sawdust and recycled polyethylene terephthalate (pet): physical and mechanical properties, *SpringerPlus* 2 (2013) 629.
- [12] C. Pao, C. Yeng, Properties and characterization of wood plastic composites made from agro-waste materials and post-used expanded polyester foam, *Journal of Thermoplastic Composite Materials* 32 (7) (2019) 951–966.
- [13] S.-K. Yeh, R. Gupta, Improved wood-plastic composites through better processing, *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 39 (11) (2008) 1694 – 1699.
- [14] M. Hietala, J. Niinimäki, K. Oksman, The use of twin-screw extrusion in processing of wood: The effect of processing parameters and pretreatment, *Bioresources* 6 (09 2011). doi:10.15376/biores.6.4.4615-4625.

- [15] M. Hietala, E. Samuelsson, J. Niinimäki, K. Oksman, The effect of pre-softened wood chips on wood fibre aspect ratio and mechanical properties of wood-polymer composites, *Composites Part A-applied Science and Manufacturing - COMPOS PART A-APPL SCI MANUF* 42 (2011) 2110–2116. doi:[10.1016/j.compositesa.2011.09.021](https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2011.09.021).
- [16] C.-S. Javier, A.-R. Sergio, Z.-G. Roberto, D.-D. Jorge, Optimization of the tensile and flexural strength of a wood-pet composite, *Ingeniería, Investigación y Tecnología* 16 (1) (2015) 105 – 112. doi:[https://doi.org/10.1016/S1405-7743\(15\)72111-6](https://doi.org/10.1016/S1405-7743(15)72111-6).
- [17] S.-Y. Leu, T.-H. Yang, S.-F. Lo, T.-H. Yang, Optimized material composition to improve the physical and mechanical properties of extruded wood plastic composites (WPCs), *Construction and Building Materials* 29 (2012) 120 – 127. doi:<https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2011.09.013>.
- [18] J. D. Eshelby, The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems, *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 241 (1226) (1957) 376–396. arXiv:<http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/241/1226/376.full.pdf>, doi:[10.1098/rspa.1957.0133](https://doi.org/10.1098/rspa.1957.0133).  
URL <http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/241/1226/376>
- [19] T. Mori, K. Tanaka, Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions, *Acta Metallurgica* 21 (5) (1973) 571 – 574. doi:[https://doi.org/10.1016/0001-6160\(73\)90064-3](https://doi.org/10.1016/0001-6160(73)90064-3).  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0001616073900643>
- [20] R. Hill, A self-consistent mechanics of composite materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 13 (4) (1965) 213 – 222. doi:[https://doi.org/10.1016/0022-5096\(65\)90010-4](https://doi.org/10.1016/0022-5096(65)90010-4).  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022509665900104>
- [21] Z. Hashin, S. Shtrikman, A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11 (2) (1963) 127 – 140. doi:[https://doi.org/10.1016/0022-5096\(63\)90060-7](https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90060-7).  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022509663900607>
- [22] O. Pierard, C. Friebel, I. Doghri, Mean-field homogenization of multi-phase thermo-elastic composites: a general framework and its validation, *Composites Science and Technology* 64 (10) (2004) 1587 – 1603.
- [23] S. Kammoun, I. Doghri, L. Adam, G. Robert, L. Delannay, First pseudo-grain failure model for inelastic composites with misaligned short fibers, *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 42 (12) (2011) 1892 – 1902.
- [24] M. Geers, V. Kouznetsova, W. Brekelmans, Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 234 (7) (2010) 2175 – 2182, fourth International Conference on Advanced COmputational Methods in ENgineering (ACOMEN 2008). doi:<https://doi.org/10.1016/j.cam.2009.08.077>.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377042709005536>
- [25] R. Pucha, J. Worthy, Representative volume element-based design and analysis tools for composite materials with nanofillers, *Journal of Composite Materials* 48 (17) (2014) 2117–2129.
- [26] C. Soyarslan, M. Pradas, S. Bargmann, Effective elastic properties of 3D stochastic bicontinuous composites, *Mechanics of Materials* 137 (2019) 103098.
- [27] M. S. Company, DIGIMAT User’s Manual (2018).
- [28] G. Lielens, Micro-macro modeling of structured materials, Ph.D. thesis, Université Catholique de Louvain, Belgium (1999).

## Capítulo 4

- [29] W. Frącz, G. Janowski, Analysis of fiber orientation in the wood-polymer composites (WPC) on selected examples, *Advances in Science and Technology Research Journal* 11 (2017) 122–129. doi: 10.12913/22998624/71150.
- [30] C. Fuentealba, Determinación de las constantes elásticas en *Pinus Radiata* D. Don por ultrasonido: módulos de elasticidad, módulos de rigidez y razón de Poisson, *Maderas, Ciencia y Tecnología* 3 (1-2) (2001) 90–90.
- [31] A. S. of Testing, M. (ASTM), 2000b. Flexural properties of unreinforced and reinforced plastics and electrical insulating materials. ASTM D790, Annual Book of ASTM Standards. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA.
- [32] L. Teuber, H. Militz, A. Krause, Characterisation of the wood component of WPC via dynamic image analysis, In: Jutta Geldermann and Matthias Schumann (Hg.) *First International Conference on Resource Efficiency in Interorganizational Networks - ResEff 2013*. Universitätsverlag Göttingen / Universitätsdrucke, Göttingen (2013) 46–54.
- [33] P. Pesante, K. Saavedra, G. Pincheira, J. Hinojosa, C. Retamal, Computational homogenisation of a recycled composite material based on PET and wood particles, In *Proceedings of the 6th European Conference on Computational Mechanics: Solids, Structures and Coupled Problems, ECCM 2018 and 7th European Conference on Computational Fluid Dynamics, ECFD 2018* (2020) 2326–2336.



# Anexo 1

# Characterization of mechanical properties of a wood flour-PET composite material through computational homogenisation and experimental testing

P. Pesante<sup>1</sup>, K. Saavedra<sup>2,\*</sup>, G. Pincheira<sup>2</sup>

<sup>1</sup>MSc. in Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Universidad de Talca, Campus Curicó, Chile

<sup>2</sup>Department of Industrial Technologies, Faculty of Engineering, Universidad de Talca, Campus Curicó, Chile

Corresponding author: ksaavedra@utalca.cl

---

## Abstract

A wood-plastic composite (WPC) refers to a polymer matrix reinforced with wood particles. Timber is attractive because it has a high strength to weight ratio, is easily integrated into existing plastic production lines and is a renewable resource. These composites can be further environment-friendly if the matrix and fillers are from recycling waste, such as polyethylene terephthalate (PET) and wood flour – fine particles of wood from woodworking industries. Because computational homogenisation can reduce processing and experimentation costs, this work proposes to study the effective elastic properties (EEP) of a composite made from PET and Chilean Radiate pine's wood flour, using finite element simulations of a representative volume element (RVE) with periodic boundary conditions. Simulations are validated through a static 3-point bending test, with specimens obtained by extruding and injection. The effect of different weight fractions, orientation space and sizes of wood flour are here examined. Numerical predictions are empirically confirmed in the sense that composites with more wood flour content and bigger size, have higher elastic modulus. However, these results are very sensitive to the orientation of particles. Voigt and Reuss mean-field homogenisation approaches are also given as upper and lower limits. Experimental tests evidence that flexural strengths of WPC decrease respect to 100 %PET specimens, but these properties can be enhanced considering particle-size distributions instead of a fixed size of wood flour.

*Keywords:* Wood-plastic composite, periodic homogenisation, mechanical properties, experimental validation.

---

## 1. Introduction

Wood-plastic composite (WPC) is a material that contains a polymer matrix – mainly thermoplastic – in which particles, fibres or flakes of wood are embedded. Wood is not only used in plastics to decrease the price compared to a solid plastic, but it has a high strength to weight ratio and a low density, it is easily integrated into existing plastic production lines and it is a renewable resource. These composites are formed into profiles or complicated shapes mostly by extrusion or injection moulding or using a flat press process [1, 2]. An up-to-date review of performance and environmental impacts of wood-plastic composites can be found in [3]. Among the most common thermoplastic polymer used in WPCs are the high-density polyethylene (HDPE), polypropylene (PP) and polyvinyl chloride (PVC) [4], whereas the polyethylene terephthalate (PET) has recently begun to be used due to its high volumes of production and resulting waste [5, 6, 7].

In fact, these composites can be further environment-friendly if the matrix and fillers are materials from recycling waste or they are biorenewable. For this reason, they are usually referred as “green materials” [8, 9, 10] and they can find several industrial applications (e.g. decorative accessories, deck boards, windows, doors, and other components with low structural performance). Besides, it is certain there is a worldwide increasing interest in developing waste management strategies. For example, extended producer responsibility policies have been widely adopted in most OECD countries [11].

Properties of WPC not only depend on the properties of their components (i.e. volume fraction, particle size and orientation) but also on manufacturing parameters and pre-treatments. Some investigations found that even more important than particle size was the aspect ratio (AR) – or length-to-diameter ratio – of particles [12]. In general, tensile, compressive and flexural properties as well as the impact strength can be improved when increasing size or AR of wood fibres [12, 13, 14, 15]. When there are particles with a larger AR or using additives like coupling agents, there is the potential for more effective load transfer between the matrix and the particles leading to better mechanical properties [16, 17, 2, 15, 18]. If the composite is manufactured by extrusion, the screw speed in twin screw can affect wood particle size or moisture absorption [19, 20], while chemical pre-treatments can increase the particle AR during the process [21]. Even though considerable work has been done towards understanding the mechanical properties of WPC, optimal material composition is still a current research topic. One approach is based on investigating experimental combinations in order to find optimal concentrations [7, 22], another possibility – reducing time and cost – are the analytic or numerical approaches for predicting the final mechanical properties. The latter is the trend adopted in this work.

Models predicting the Effective Elastic Properties (EEP) are based on micromechanical or continuum models: the first one allows a detailed but expensive description of a heterogeneous medium, whereas a continuum model is a homogenous equivalent representation. Homogenisation techniques allow heterogeneous materials to be treated by continuum models by estimating effective properties from the knowledge of the constitutive laws, geometry and orientation space of the constituents (i.e. from a given micromechanical model). These analytical models are known as mean field homogenisation schemes and they are based on

the solution of Eshelby [23] – the Mori-Tanaka formulation [24], the self-consistent formulations [25], the Hashin-Shtrikman equation [26] among others. In general, they provide reasonable accuracy at modest computational cost [27, 28], but they are mainly applicable for reinforcements which can be approximated as ellipsoids. Alternatively, computational homogenisation methods have also been developed in recent years [29]. In these approaches, finite element (FE) simulations are used to solve boundary value problems (BVP) on a representative volume element (RVE) - the smallest volume over which a measurement can be made that yields a representative value of the whole. The basic principle of the method and the scale transitions are highlighted in Fig. 1. The macroscopic stiffness of the material can be obtained using standard mathematical averaging equations or from the RVE stiffness matrix through a static condensation process. Various types of boundary conditions can be derived from the micro-macro averaging relation adopted, but periodic boundary conditions have proven to be most versatile [30, 31]. Then, the macroscopic quantities can be transferred to the microscale through a BVP problem leading to a deformed RVE.

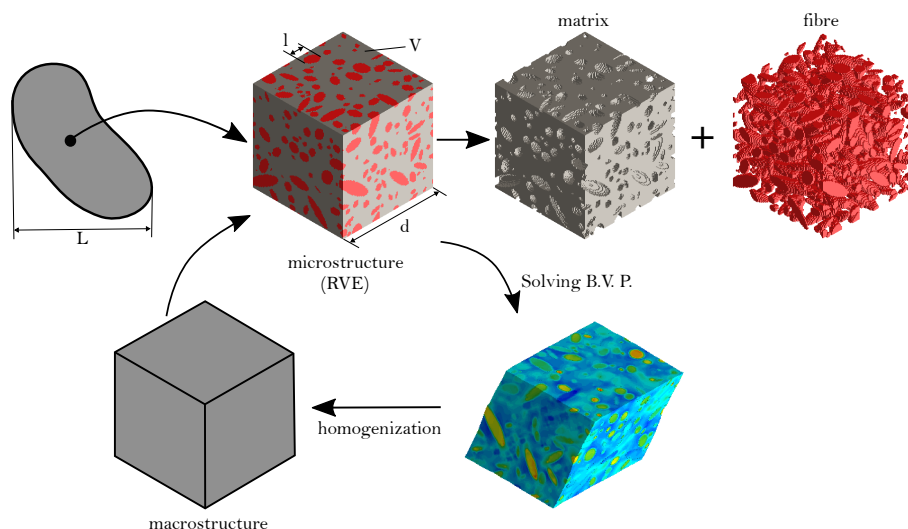


Figure 1: Principle of a homogenisation schema.

This work aims at studying the mechanical properties of a WPC made from recycled PET and Chilean radiata pines' flour, considering different weight fractions, sizes and aspect ratios of wood particles. The numerical prediction uses the DIGIMAT-FE software to generate the RVE and to solve the discretised finite element problem with periodic boundary conditions. WPC specimens are manufactured using a 16-mm twin-screw extruder and injection moulding, then characterised by static 3-point bending tests. The paper has the following outline: Sec. 2 summaries the numerical homogenisation methodology, while the experimental strategy is introduced in Sec. 3. The numerical and experimental comparison is addressed in Sec. 4. Finally, conclusions are drawn in Sec. 5.

## 2. Numerical homogenisation

As previously described by the authors in [32], the simplest point of view for homogenisation is that a heterogeneous medium behaves macroscopically in the same way as its constituents. In micromechanical analysis, the stress and deformation fields of heterogeneous materials are divided into contributions from different scales. It is assumed that these scales are sufficiently different, i.e. with high and low wavelength effects such that: i) fluctuations of fields in the microscale have influence at the macroscopic behaviour only through its volumetric average; ii) the gradients of the stress and deformation fields at the macroscale are not significant at the micro level, where these fields appear to be constant. These assumptions allow to define scale transitions through a BVP with prescribed displacements of some characteristic points at the boundary of the RVE, using a volume average of deformations or stresses and of the virtual work [29] (Hill-Mandel principle of macrohomogeneity [33, 34]).

Before obtaining EEPs of a heterogeneous material, the size of the RVE should be studied in order to find the appropriate dimensions whose EEP is objective. This RVE must contain enough heterogeneity and its size  $d$  must be much larger than the characteristic length  $l$  of the microscale. Then, the RVE must be small enough to be assimilated to a point at the macroscopic level. A characteristic length  $L$  at this level can be determined according to the geometry, the spatial variation in loads or through the strain or stress fields. In fact, scale separation is verified when  $l \ll d \ll L$ , as schematised in Fig. 1.

The simplest mean-field homogenisation methods are the Voigt [35] and Reuss [36] models. Voigt assumes that the strain field is uniform in the RVE; consequently, the macro stiffness is found to be the volume average of the micro stiffness. In the Reuss model, the stress field is assumed to be uniform in the RVE; the macro compliance is then found to be the volume average of all micro compliance. The EEPs calculated are straightforwardly identified as the upper (Voigt) or the lower (Reuss) bound, respectively. These methods are easily implemented but they do not take into account the shape or the orientation of inclusions.

In this work, the efforts are on understanding the mechanisms that dominate the macroscopic properties of the material, but that really arise from its microscopic composition. We propose to generate RVEs as real as possible using the DIGIMAT-FE software. Then, the finite element model is solved by a finite element analysis in the same software. Periodic boundary conditions are imposed on all faces of the RVE through a large set of equations that relate the degrees of freedom of nodes on opposite sides. Figure 2 shows the six macroscopic strains applied to a RVE. Periodic boundary conditions generally lead to the best predictions when compared to Dirichlet, Neumann or mixed edge conditions. It also shows a faster convergence speed as the size of the RVE increases, but at the expense of greater CPU time and memory requirements due to the large set of constraints that must be imposed [37].

### 2.1. Particles' geometry and size/FE-mesh of the RVE

In order to approach wood particles' geometry, an ellipsoidal shape with transversely isotropic material properties is assumed – see Fig. 3(a) – where the longitudinal material

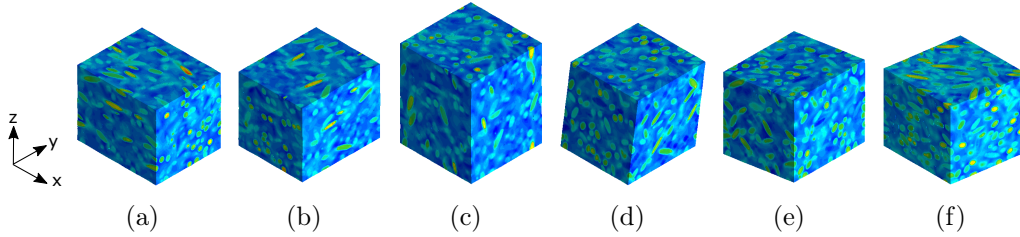


Figure 2: Deformed meshes of a RVE under periodic boundary conditions. Strains modes along planes: (a)  $x - x$ , (b)  $y - y$ , (c)  $z - z$ , (d)  $y - z$ , (e)  $x - z$  and (f)  $x - y$ .

direction coincides with the principal direction of the ellipsoid. From a geometric point of view, the parameters are shape (i.e. length and AR) and orientation of a particle. For the latter, two possibilities are studied: i) 3D randomly distributed particles and ii) particles slightly oriented to take into account flow effects due to the fabrication process (i.e. a degree of orientation non-null).

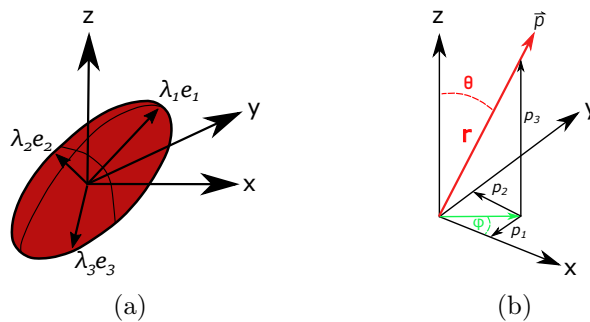


Figure 3: (a) Particle orientation. (b) Particle representation by a unit vector  $(p_1, p_2, p_3)$  in an orthogonal coordinate system or  $(1, \theta, \phi)$  in a spherical coordinate system [38].

A 3D ellipsoid can be described by a second order tensor  $A$  – so-called orientation tensor – and its associated eigenvalue problem, as follows [39, 38, 40]:

$$[A] = \begin{bmatrix} a_{xx} & a_{xy} & a_{xz} \\ a_{yx} & a_{yy} & a_{yz} \\ a_{zx} & a_{zy} & a_{zz} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}; [e_1 \ e_2 \ e_3] \quad (1)$$

where the eigenvectors  $e_i$  indicate the principal directions of the particle's alignment, while the eigenvalues  $\lambda_i$  give the statistical proportions (0 to 1) of particles aligned with respect to those directions (a graphical representation is shown in Fig. 3(a)). A predominating orientation determines a respective eigenvalue close to 1, if the probability is weak it has a value close to 0. For a random distribution  $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 1/3$ .

The nine components of the orientation tensor are reduced to five independent components due to symmetry ( $a_{ij} = a_{ji}$ ) and the normalisation condition ( $a_{xx} + a_{yy} + a_{zz} = 1$ ). A particle can be represented in space as schematised in Fig. 3(b), where Cartesian coordinates can be retrieved from the spherical ones using  $p_1 = \sin(\theta) \cos(\phi)$ ,  $p_2 = \sin(\theta) \sin(\phi)$

and  $p_3 = \cos(\theta)$ . Finally, the orientation tensor can be defined as a dyadic product of the unit vectors as follows:

$$[A] = \begin{bmatrix} a_{xx} & a_{xy} & a_{xz} \\ a_{yx} & a_{yy} & a_{yz} \\ a_{zx} & a_{zy} & a_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_1^2 & p_1p_2 & p_1p_3 \\ p_1p_2 & p_2^2 & p_2p_3 \\ p_1p_3 & p_2p_3 & p_3^2 \end{bmatrix} \quad (2)$$

Note: the Cartesian coordinate system  $\{x, y, z\}$  is here chosen to be coincident with the injection's flow of the specimens (see Sec. 3.3).

Another parameter is the degree of orientation  $O_D$  which is a scalar value describing the strength of the main orientation of a tensor. It is calculated by the largest eigenvalue represented by  $\lambda_1$ . Then, the degree of orientation can be obtained as follows:

$$O_D = \frac{3}{2} \left( \lambda_1 - \frac{1}{3} \right) \quad (3)$$

Before carrying out numerical homogenisation, the size of the RVE is firstly studied in order to find the minimal size for which EEPs converge, some examples are shown in Fig. 4. These RVEs are obtained using the automatic generation of periodic RVE from the commercial DIGIMAT-FE software. Table 1 surveys the chosen dimensions for each composite formulation defined in Sec. 3 (see Fig. 7(a) and Tab. 3), after studying different sizes which are summarised in Tabs. A.8, A.9, A.10, A.11. It is important to note that cubic RVEs are preferred for random particles, whereas rectangular ones are chosen for oriented distributions (see Tab. 7).

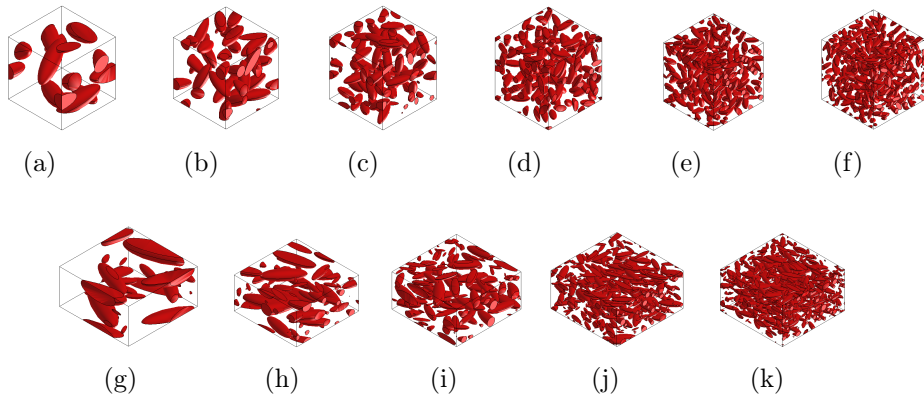


Figure 4: RVE with 10% of particles content (based on weight), but different side lengths: (a) 1.0 [mm]; (b) 1.5 [mm]; (c) 2.0 [mm]; (d) 2.5 [mm]; (e) 3.0 [mm]; (f) 3.5 [mm]; (g) 1.0x1.0x0.5 [mm]; (h) 1.5x1.5x0.75 [mm]; (i) 2.0x2.0x1.0 [mm]; (j) 3.0x3.0x1.5 [mm]; (k) 3.5x3.5x2.0 [mm].

Voxelization modelling is advisable to support FE based simulations for complicated models. Taking into account the available computational resources and a previous convergence study of the homogenised elastic modulus (see Tab. A.12), the minimum RVE mesh

resolution is selected to 100x100x100 voxels (for  $x$ ,  $y$  and  $z$  directions) and it is used in all numerical homogenisation in this paper, as the one in Fig. 5.

Table 1: Chosen dimensions for each RVE<sup>a</sup>.

composition	particle orientation	RVE size [mm]		
		$x$	$y$	$z$
A(05-10)	O1	2.0	2.0	1.0
B10		9.244	7.987	3.930
C10		3.158	3.345	1.710
A(05-10)	O2	2.0	2.0	1.0
B10		8.391	8.963	3.958
C10		3.434	3.023	1.698
A(05-10)	O3 (random)	2.0	2.0	2.0
B10		8.0	8.0	8.0
C10		2.0	2.0	2.0

<sup>a</sup> A, B and C correspond to the complete line of sieves, particles retained from the 25m and 60m, respectively (see Sec. 3.1). While O1, O2 and O3 correspond to the different orientation tensors used (see Tab. 7).

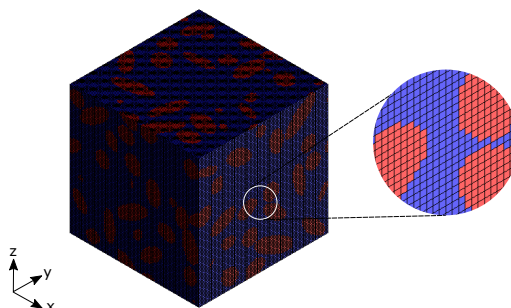


Figure 5: RVE's voxelization modelling for C10 composite.

### 3. Specimens

Specimens are here detailed taking into account elastic properties, weight fractions, particles geometry, space distributions and the manufacturing processes as well.

#### 3.1. Wood particles

Reinforce is wood flour which is a waste product of post-industrial operations such as sawing or milling. Wood flour here considered is made of Radiata pine, finely pulverised and with a 1% based on weight moisture content (after being dried in an oven at 100 [°C] for 24 h). Elastic properties taken into account are from the available literature [41], but simplifying wood as a transversely isotropic material because

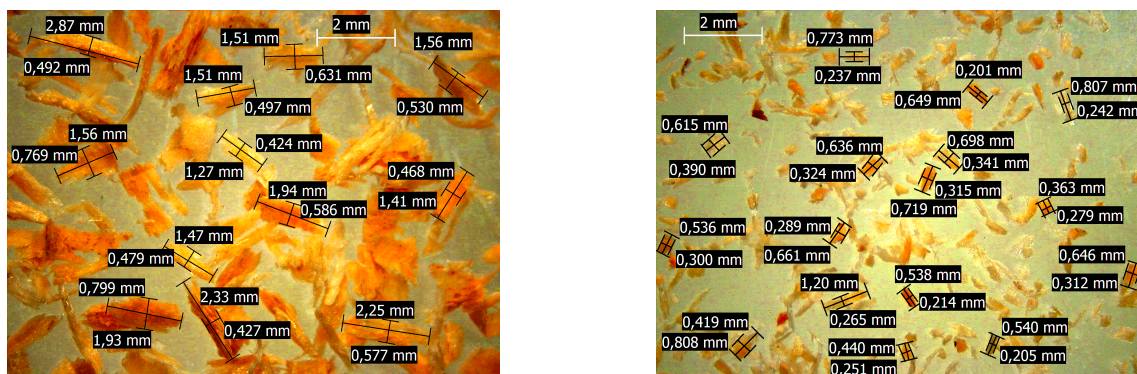


the ellipsoidal assumption made in Sec. 2.1, as follows: longitudinal and transverse Young's modulus  $E_{xx} = 11.059$  [GPa],  $E_{yy} = 1.201$  [GPa]; Poisson's coefficients  $\nu_{xy} = 0.4$  [-],  $\nu_{xz} = 0.3$  [-]; transverse shear modulus  $G_{xy} = 1.339$  [GPa]; and density  $419.9$  [kg/m<sup>3</sup>].

The size of the wood flour is first characterised through a sieving process, according to the ASTM E-11 specification [42], for which the mesh notations and corresponding screen sizes are shown in Tab. 2. More precisely, a 45m sieve enables particles pass through a 40-mesh (0.425 [mm]), but not a 50-mesh (0.3 [mm]), then it holds particles with an average size of 0.363 [mm]. The resulting particle-size distribution after sieving the wood flour samples is in Tab. 2 (last column) and illustrated in Fig. 7(b), where the mean size (i.e. width) of the probability distribution is 0.377 [mm].

Table 2: Mesh sizes used to sieve [42] and wood flour size distribution under study (last column).

sieve	mesh size range		screen hole size [mm]		average particle size [mm]	percentage (%)
	minimum	maximum	minimum	maximum		
-	bottom	100	0	0.15	0.075	18
85m	100	70	0.150	0.212	0.181	13.5
60m	70	50	0.212	0.300	0.256	16
45m	50	40	0.300	0.425	0.363	17
35m	40	30	0.425	0.600	0.513	15
25m	30	20	0.600	0.850	0.725	19
15m	20	10	0.850	2.000	1.425	1.5



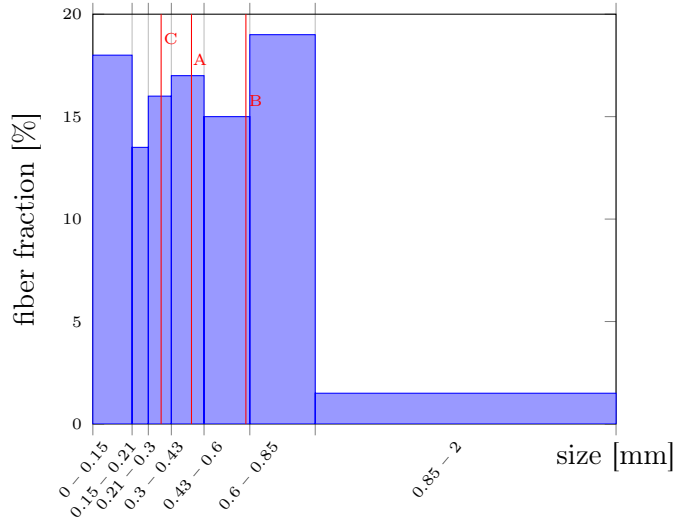
(a) 25m sieve (sample B)

(b) 60m sieve (sample C)

Figure 6: Optical measurement of particle's geometry.

WPC were produced using i) the complete line of sieves (sample A), i.e. particles without sieving; and ii) particles retained by the 25m and 60m sieves, respectively. In order to better characterise the size and AR, wood flour from the 25m (sample B) and 60m (sample C) sieves were measured with an optical microscope Leica EZ4E (see Fig. 6). In the same way, an aleatory sample from the complete line of sieves was measured in order to estimate an average AR. Fig. 7(a) summarises these parameters for the three wood flour samples employed to manufacture composites. However, it is important to notice that the length and AR being prior to the compounding process, thus the particle geometry after processing could differ from the initial one due to the induced energy within the extrusion and injection process [43].

sample	average width [mm]	[%]	AR
A	0.075	18	3.500
	0.181	13.5	
	0.256	16	
	0.363	17	
	0.513	15	
	0.725	19	
	1.425	1.5	
B	0.585	100	3.385
C	0.261	100	2.802



(a)

(b)

Figure 7: (a) Mean width and AR of three wood flour compositions. (b) Wood flour size (e.i. width) distribution according to Tab. 2. Red lines indicate the mean width of particles belonging to A, B and C compositions.

### 3.2. Thermoplastic resin

The polymer matrix is a virgin polyethylene terephthalate (PET), with the following properties from literature [44]: viscosity 0.82 [dl/g], melting temperatures between 240-260 [°C], Young's module  $E = 2.345$  [GPa] and Poisson's coefficient  $\nu = 0.41$  [-].

### 3.3. Wood plastic composite

According to Tab. 3, two ratios of weights (5% and 10%) of wood flour and PET are studied for the size distribution A, although particles with a fixed size (B and C) are used to prepare composites with a wood content of 10% based on the total composite weight.

Table 3: Composition of WPC specimens.

specimen	PET (%wt)	wood flour (%wt)
A05	95	5
A10	90	10
B10	90	10
C10	90	10

A laboratory extruder, TS 16-30 model (Gülınar Makina, Turkey), equipped with a twin-screw diameter of 16 [mm] and a single screw volumetric feeder was employed to manufacture the WPC. The extruder has three main zones, as schematised in Fig. 8: (i) feeding, where material is preheated during transport; (ii) compressing, where material is compacted while decreases the screw depth; and (iii) dosing, where pressure is applied on materials shoving it towards the header. The volumetric feeder is used to nourish – as constant as possible – the mixture into the first zone. PET and wood were manually premixed prior to extrusions. Finally, the output is a continuous WPC filament with a diameter of 3.0 [mm]. The temperature profile is shown in Fig. 8, while the rotational speed was fixed to 20 [rpm].

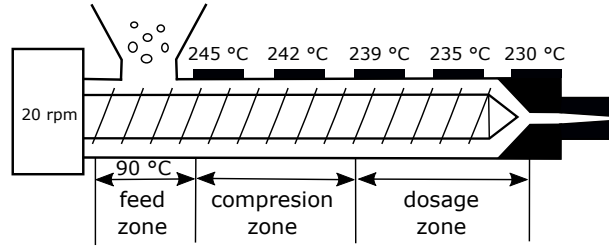


Figure 8: Schematic diagram of the extruder machine.

Specimens were moulded in a 490-170 Clarke 25 injection moulding machine at 237 [°C], according to Fig. 9 where the dotted arrows represent the injection flow. The geometry is in concordance with the 3 points bending tests defined in the ASTM D790 standard [45], with the following dimensions:  $L = 80$  [mm],  $H = 3.5$  [mm] and  $W = 10$  [mm] (See Fig. 9).

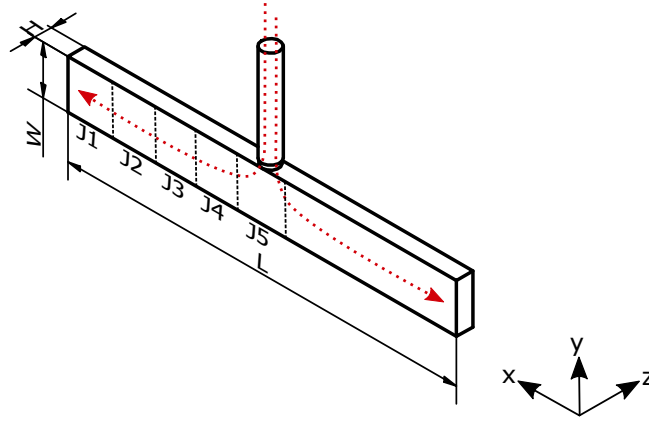


Figure 9: Specimens geometry, injection flow and zones for measuring the particle's orientation.

### 3.4. Particles orientation

The distribution of the wood particles within the plastic matrix is here analysed. For the sake of simplicity, it is assumed that particles do not have an inclination in the  $z$ -direction, therefore only particles on the surface ( $x-y$  plane) are examined using an optical microscope Leica EZ4E. The surface is divided into five areas (see Fig. 9) for a better image resolution and software GeoGebra is employed for post-processing, as shown in Fig. 10. This procedure has been only achieved for specimens A05, because a low contrast on images was seen for samples with a wood content of 10%. Finally, components of the orientation tensor are calculated by means of Eq. (2), as detailed in Tab. 4. It is observed that particles are preferentially oriented with the  $x$ -direction, i.e. into the flow direction.

## 4. Results and discussion

In this section an experimental and numerical comparison is addressed for the WPC manufactured in this work. Experiments are carried out according to the ASTM D790 standard [45], while simulations of elastic properties are performed in the DIGIMAT software.

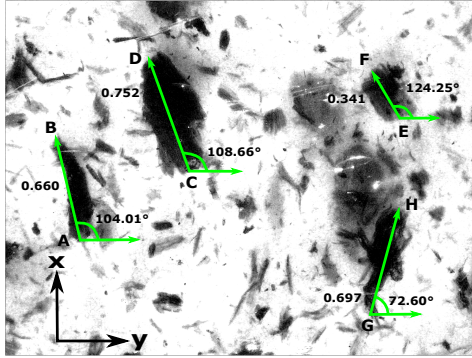


Figure 10: Image processing (plane  $x - y$ ) in part of zone  $J5$  for obtaining the fibre orientation tensor of an A05 specimen. (For interpretation of the color lines, the reader is referred to the web version of this article.)

Table 4: Fibre orientation tensor for different zones and its standard deviation (A05 sample).

sample	$a_{xx}$	$a_{yy}$	$a_{xy}$
J1	0,600	0,400	0.279
J2	0,712	0,288	0.309
J3	0,519	0,481	0.306
J4	0,538	0,462	0.334
J5	0,617	0,383	0.283
mean	0,597	0,403	0.302
S.D.	0,076	0,076	0.022

#### 4.1. Experimental tests

Flexural strength measurements were obtained through 3-point bending tests in a testing machine – model Zwick Roell from Germany – provided with a 5 [kN] load cell and the testXpert software. The support span was 16 times (i.e. 56 [mm]) the specimen depth ( $H = 3.5$  [mm], see Fig. 9) and the load speed was 1 [mm/min]. For each WPC in Tab. 3, five specimens were tested. Tab. 5 summarises the flexural modulus – i.e. the elastic module in  $x$ -direction – and the flexural strength for each composite and for a specimen made of 100% PET as well.

Table 5: Mechanical properties and their standard deviations (3-point bending tests).

WPC	flexural modulus [GPa]	flexural strength [MPa]
PET	$2.345 \pm 0.073$	$66.95 \pm 16.78$
A05	$2.542 \pm 0.088$	$19.66 \pm 0.49$
A10	$2.968 \pm 0.073$	$29.00 \pm 3.70$
B10	$3.147 \pm 0.158$	$24.37 \pm 10.53$
C10	$2.952 \pm 0.300$	$23.74 \pm 5.43$

The Young’s modulus of PET is in concordance with available information [44]. When adding 5%wt. (10%wt., respectively) of wood particles to the PET matrix, the flexural modulus increases 8.0% (26.1% as

average, respectively) respect to PET. It is then verified that the flexural modulus not only increases with the wood flour content, but also with the size of the wood particles. In fact, B10 samples have particles 124.14% bigger than those of C10, then its elastic module is 6.6% bigger than C10 specimens. If particles are not sieved (case A10), the elastic modulus is similar to the one of the C10 samples.

On the other hand, the addition of wood flour decreases the flexural strength respect to a 100% PET specimen, but this are improved as the quantity of reinforcement is increased. Actually, if 5%wt. (10%wt., respectively) of reinforcement is considered, the strength is reduced by 70.63% (56.68% as average, respectively), respect to PET. However, if wood flour with a larger distribution of sizes (case A10, see Fig. 7(b)) is considered, the flexural strength (19.0% and 22.16% higher than B10 and C10, respectively) are improved. It is important to note that the standard deviations of flexural strengths increase for the sieved sizes (B10 and C10).

#### 4.2. Numerical-experimental comparison

The comparison here achieved is based on the elastic module in  $x$ -direction (see Fig. 9). Experimental values are from Tab. 5 and simulations are carried out using a periodic homogenisation method in the DIGIMAT software, where RVEs are been carefully calibrated according to Sec. 2.1. The size of particles and its orientations are varied in simulations. Finally, the theoretical values from the Voigt and Reuss assumptions are also given as reference.

In order to study the influence of the particle sizes and their orientations, simulations taking into account a fully 3D random distribution of particles are first analysed. The modulus of elasticity in  $x$  and  $y$  directions are calculated for different particles sizes (see Fig. 7(a)), different wood content (5% and 10%) and using three homogenisation methods (Voigt, Reuss and periodic), as shown in Tab. 6. As previously found in [32], the periodic homogenised elastic moduli are almost the same in both directions – e.i. a quasi-isotropic composite material is obtained – and they are contained into the Voigt and Reuss bounds in the axial and transverse directions, respectively. For both wood content, the Young’s moduli obtained from periodic homogenisation are very close for the three-particle sizes (A, B and C). Finally, the elastic modulus increases as average a 2.08% (4.36%) if 5%wt. (10%wt., respectively) of wood is added to PET. Those results are significantly lower than the experimental ones, especially for the highest content of wood. In fact, the numerical elastic modulus is 5.31%, 16.78%, 23.09% and 16.01% lower than those measured experimentally for A05, A10, B10 and C10 compositions, respectively. This discrepancy can be explained because particles can choose a particular space orientation in agreement with the manufacturing process of specimens, as empirically verified in Sec. 3.4.

Table 6: Elastic modulus for different formulations with random particles’ orientation (periodic homogenisation is calculated with DIGIMAT software)

%wt.	homogenisation	elastic modulus	elastic modulus
	method	$x$ -direction	$y$ -direction
5	Voigt	2.782	2.356
	Reuss	2.441	2.238
	periodic (A particles)	2.402	2.412
	periodic (B particles)	2.392	2.425
	periodic (C particles)	2.381	2.406
	Voigt	3.218	2.347
10	Reuss	2.546	2.141
	periodic (A particles)	2.501	2.439
	periodic (B particles)	2.411	2.430
	periodic (C particles)	2.496	2.463

If a specific orientation is given to wood particles by indicating the orientation tensor into the periodic homogenisation routine in DIGIMAT software, the numerical elastic modulus is impacted. Indeed, Fig. 11 compares the elastic modulus in  $x$ -direction for the A05 and A10 composites, taking into account the experimental tests, the Voigt and Reuss bounds and numerical predictions with three orientations: fully random and the two configurations defined by the tensors detailed in Tab. 7, where it is important to note that the O1-orientation is according to the tensor found by image processing in Tab. 4 for a A05 specimen. Because particles are not spherical, it is observed that when more they are preferentially aligned into the injection flow direction, more the Young's modulus increases. Actually, considering the orientation tensor O1 (O2), the numerical elastic modulus is 13.27% (20.39%, respectively) higher than the one with random arrangement. Finally, the prediction with O1-orientation (e.i. the one from image processing) is in agreement with the experimental Young's modulus for the A05 composite. However, in the case of 10% of wood content, the O1-orientation does not match enough the empirical tests, but a simulation with a higher degree of particles' alignment (e.i. the O2-orientation) is in conformity with the experimentation. This outcome could be explained under the hypothesis that the injection process induces particles to be oriented in the flow direction in a more severity way if wood content is added in a greater quantity.

Table 7: Orientation tensor used for periodic homogenisation in Fig. 11.

	$a_{xx}$	$a_{yy}$	$a_{zz}$	$a_{xy}$	$a_{xz}$	$a_{yz}$	orientation degree
O1	0.6	0.4	0	0.3	0	0	0.7243
O2	0.7	0.3	0	0.3	0	0	0.7908
O3	1/3	1/3	1/3	0	0	0	0

Fig. 12 shows the modulus of elasticity for WPCs with 10%wt. wood content and three different particle's sizes – A, B and C (see Table in Fig. 7(a))– where the periodic homogenisation method is checked against experimental results. Firstly, for each case (experimental, periodic homogenisation with O1-orientation or periodic homogenisation with O2-orientation) it is verified that the Young's modulus in  $x$ -direction for B10 is higher than for A10 composites, and the latter is higher than for C10 composites. Secondly, numerical predictions considering the O1-orientation underestimate the empirical values (except for C10), while O2-orientation matches the three experiments. However, B10 has the highest difference between the numerical and experimental mean values, then it can be assumed that B10 specimens have particles with a degree of orientation respect to the  $x$ -axis superior to 79% (see Table 7), according to Eq. 3. Furthermore, the simulation with random layout has the elastic modulus most weak. Finally, it can be concluded that for a fixed content of wood, the Young's modulus in the flow direction increases when the average particle size increases.

## 5. Conclusions

This paper contrast numerical simulations and experimental testing for estimating the mechanical properties of a WPC manufactured with PET and Chilean Radiate pine's wood flour. The influence of quantity, size and space orientation of particles on the elastic modulus was numerically predicted and then empirically validated. Simulations were carried out using a periodic homogenisation method combined with a finite element analysis, while 3 points bending tests were performed for obtaining elastic moduli, flexural strengths and the elongations at the break. Composites were manufactured with a laboratory extruder equipped with a twin-screw and specimens were then moulded by injection. The major outcomes of this work are:

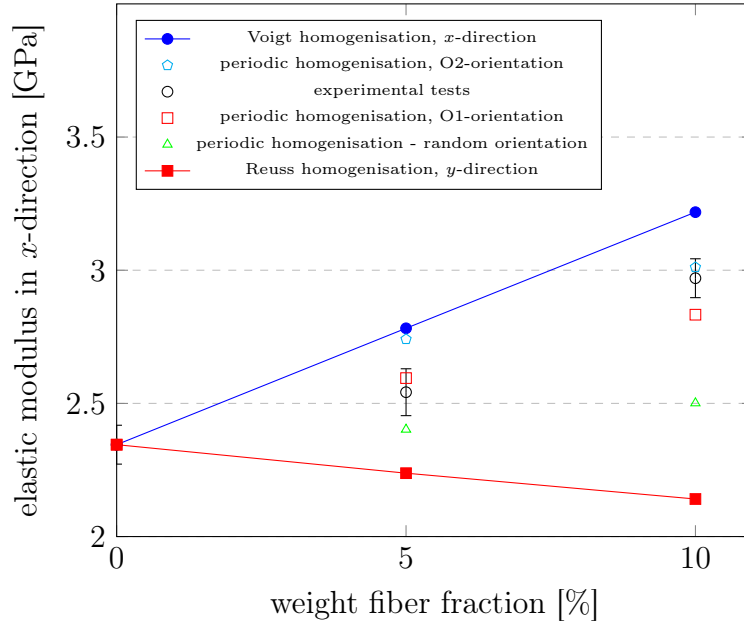


Figure 11: Numerical-experimental comparison of the Young's modulus in  $x$ -direction for A05 and A10 composites. As in a random spatial distribution (O3), the results are considered contained between the Voigt and Reuss limits in the axial and transverse directions, respectively.

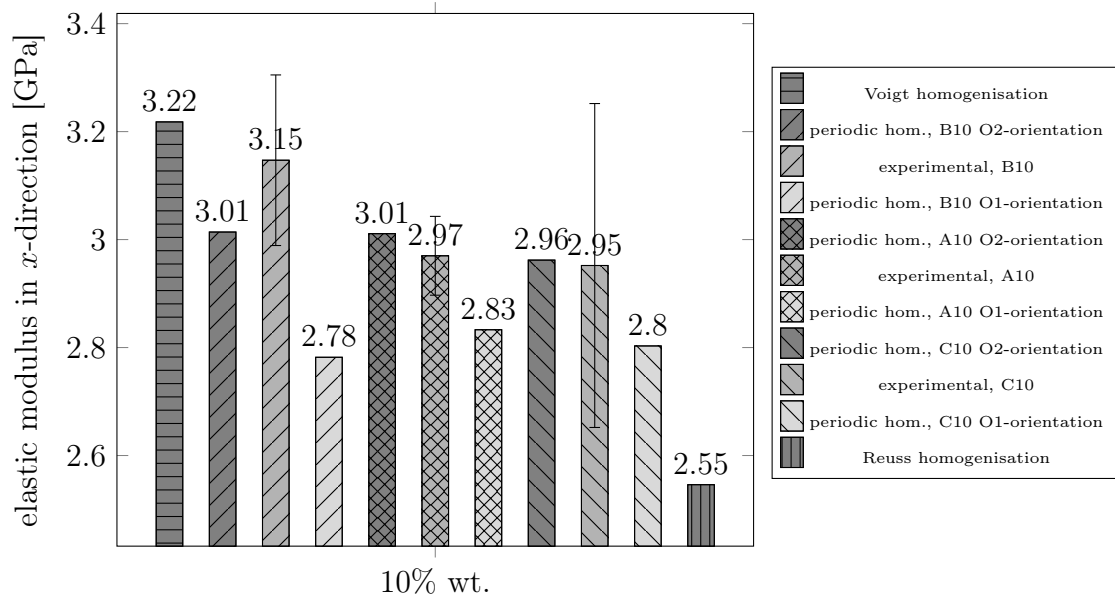


Figure 12: Influence of size and space orientation of particles on the Young's modulus in  $x$ -direction for A10, B10 and C10 composites.

- Experimentally, it has been verified that the elastic modulus not only increases with the wood flour content (8.0% and 26.1% for 5%wt. and 10%wt., respectively) of wood particles, but also with bigger particles.

- Experimentally, it is observed that the wood flour decreases the flexural strength and the ultimate tensile elongation respect to 100% PET specimen, but these properties are improved as the quantity of reinforcement is increased. It is also verified that if particles are not sieved the elastic modulus is similar to other distributions, but the flexural strength and the ultimate tensile elongation are 20% improved (for composites with 10%wt. of wood).
- Numerically, considering random orientation, the elastic modulus increases as average a 10.24% and 19.20% if 5%wt. and 10%wt. of wood is added to PET, respectively. However, those results are significantly lower than the experimental ones. This discrepancy is explained because the injection process induce particles to be oriented in the flow direction, specially if wood content is added in a greater quantity or using bigger particles.
- It is demonstrated that the homogenisation technique can predict the elastic moduli of wood PET composites. The experimental and numerical results are within the upper (Voigt) and lower (Reuss) limits. However it can be very sensitive to the space orientation due to the manufacturing process of the samples, and it is necessary to carefully measure it as an input for simulations. Image processing using computed tomography could be a potential tool in order to have more accurate simulations [46, 47, 48].

## Acknowledgements

The authors wish to acknowledge the financial support from the Chilean Regional Government of Maule through the FIC-R project “Valorization of recycled waste through the creation of new materials for the manufacture of marketable products”, code BIP 30.481.945.

## Appendix A. Detailed numerical results

Elastic moduli obtained by periodic homogenisation are here reviewed for the selection attempts related to the RVE size and RVE mesh. Compositions are referred to Fig. 7(a) and Tab. 3, while orientation is defined in Tab. 7.

Table A.8: Homogenised elastic modulus for A05 composite and random distribution, different RVE dimensions.

RVE size [mm]			elastic modulus [GPa]		
$x$	$y$	$z$	$E_{xx}$	$E_{yy}$	$E_{zz}$
1.0	1.0	1.0	2.511	2.437	2.267
1.5	1.5	1.5	2.410	2.446	2.363
2.0	2.0	2.0	2.392	2.384	2.427
2.5	2.5	2.5	2.360	2.429	2.408
3.0	3.0	3.0	2.432	2.382	2.411
3.5	3.5	3.5	2.384	2.392	2.439



Table A.9: Homogenised elastic modulus for B10 composite and random distribution, different RVE dimensions.

RVE size [mm]			elastic modulus [GPa]		
$x$	$y$	$z$	$E_{xx}$	$E_{yy}$	$E_{zz}$
2.0	2.0	2.0	2.395	2.464	2.559
4.0	4.0	4.0	2.484	2.458	2.351
6.0	6.0	6.0	2.431	2.461	2.474
8.0	8.0	8.0	2.496	2.402	2.457
10.0	10.0	10.0	2.463	2.433	2.478

Table A.10: Homogenised elastic modulus for A05 composite and O1-orientation, different RVE dimensions.

RVE size [mm]			elastic modulus [GPa]		
$x$	$y$	$z$	$E_{xx}$	$E_{yy}$	$E_{zz}$
1.0	1.0	0.5	2.838	2.310	2.197
1.5	1.5	0.75	2.470	2.466	2.210
2.0	2.0	1.0	2.620	2.414	2.207
3.0	3.0	1.5	2.634	2.402	2.213
3.5	3.5	2.0	2.594	2.447	2.215

Table A.11: Homogenised elastic modulus for B10 and C10 composites, different RVE dimensions.

sample	particles orientation	RVE size [mm]			elastic modulus [GPa]		
		$x$	$y$	$z$	$E_{xx}$	$E_{yy}$	$E_{zz}$
B10	O1	8.391	8.936	3.958	2.782	2.485	2.083
C10		3.158	3.345	1.710	2.803	2.463	2.075
B10	O2	9.244	7.987	3.930	3.014	2.352	2.081
C10		3.434	3.023	1.698	2.962	2.364	2.077

Table A.12: Homogenised elastic modulus for A05 composite with O1-orientation, different FE meshes.

voxel resolution	elastic modulus [GPa]			number of elements	number of nodes
	$E_{xx}$	$E_{yy}$	$E_{zz}$		
50x50x50	2.677	2.397	2.216	125,000	132,651
100x100x100	2.595	2.439	2.211	1,000,000	1,030,301
150x150x150	2.577	2.440	2.221	3,375,000	3,442,951

## References

- [1] S. Jarusombuti, N. Ayrilmis, Surface characteristics and overlaying properties of flat-pressed wood plastic composites, *European Journal of Wood and Wood Products* 69 (3) (2011) 375–382.
- [2] K.-S. Rahman, M. Islam, M. Rahman, M. Hannan, R. Dungani, H. A. Khalil, Flat-pressed wood

- plastic composites from sawdust and recycled polyethylene terephthalate (pet): physical and mechanical properties, *SpringerPlus* 2 (2013) 629.
- [3] M. Schwarzkopf, M. Burnard, Wood-plastic composites: Performance and environmental impacts, in: A. Kutnar, S. S. Muthu (Eds.), *Environmental Impacts of Traditional and Innovative Forest-based Bioproducts*, Springer, Singapore, 2016, pp. 19–43.
  - [4] A. A. Klyosov, *Wood–Plastic Composites*, John Wiley & Sons, Ltd, 2007.
  - [5] Y. Lei, Q. Wu, High density polyethylene and poly(ethylene terephthalate) in situ sub-micro-fibril blends as a matrix for wood plastic composites, *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 43 (1) (2012) 73 – 78.
  - [6] I. Pogrebnyak, N. Sova, B. Savchenko, V. Pakharenko, V. Moisyuk, A wood-filled composite based on recycled polyethylene terephthalate: production and properties, *International Polymer Science and Technology* 42 (2015) T41–T43.
  - [7] J. Cruz-Salgado, S. Alonso-Romero, R. Zitzumbo-Guzmán, J. Domínguez-Domínguez, Optimization of the tensile and flexural strength of a wood-pet composite, *Ingeniería, Investigación y Tecnología* 16 (1) (2015) 105 – 112.
  - [8] F. L. Mantia, M. Morreale, Green composites: A brief review, *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 42 (6) (2011) 579 – 588.
  - [9] S. K. Najafil, Use of recycled plastics in wood plastic composites - a review, *Waste Management* 33 (9) (2013) 1898 – 1905.
  - [10] W. Srubar, S. Billington, A micromechanical model for moisture-induced deterioration in fully biorenewable wood-plastic composites, *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 50 (2013) 81 – 92.
  - [11] OECD, *Extended Producer Responsibility: Updated Guidance for Efficient Waste Management*, OECD Publishing, 2016.
  - [12] N. M. Stark, R. E. Rowlands, Effects of wood fiber characteristics on mechanical properties of wood/polypropylene composites, *Wood and Fiber Science* 35 (2) (2003) 167–174.
  - [13] H. Chen, T. Chen, C. Hsu, Effects of wood particle size and mixing ratios of HDPE on the properties of the composites, *Holz als Roh- und Werkstoff* 64 (3) (2006) 172–177.
  - [14] T. Mbarek, L. Robert, F. Hugot, J.-J. Orteu, Mechanical behavior of wood-plastic composites investigated by 3D digital image correlation, *Journal of Composite Materials* 45 (26) (2011) 2751–2764.
  - [15] M. Schwarzkopf, L. Muszynski, Strain distribution and load transfer in the polymer-wood particle bond in wood plastic composites, *Holzforschung* 69 (1) (2015) 53 – 60.
  - [16] A. Schirp, J. Stender, Properties of extruded wood-plastic composites based on refiner wood fibres (TMP fibres) and hemp fibres, *European Journal of Wood and Wood Products* 68 (2) (2010) 219–231.
  - [17] J. Lisperguer, X. Bustos, Y. Saravia, C. Escobar, H. Venegas, Efecto de las características de harina de madera en las propiedades físico-mecánicas y térmicas de polipropileno reciclado, *Maderas, Ciencia y Tecnología* 15 (3) (2013) 321–336.
  - [18] C. Pao, C. Yeng, Properties and characterization of wood plastic composites made from agro-waste materials and post-used expanded polyester foam, *Journal of Thermoplastic Composite Materials* 32 (7) (2019) 951–966.
  - [19] S.-K. Yeh, R. Gupta, Improved wood-plastic composites through better processing, *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 39 (11) (2008) 1694 – 1699.
  - [20] M. Hietala, J. Niinimäki, K. Oksman, The use of twin-screw extrusion in processing of wood: The effect of processing parameters and pretreatment, *Bioresources* 6 (2011) 4615–4625.
  - [21] M. Hietala, E. Samuelsson, J. Niinimäki, K. Oksman, The effect of pre-softened wood chips on wood fibre aspect ratio and mechanical properties of wood–polymer composites, *Composites Part A - Applied Science and Manufacturing* 42 (2011) 2110–2116.
  - [22] S.-Y. Leu, T.-H. Yang, S.-F. Lo, T.-H. Yang, Optimized material composition to improve the physical and mechanical properties of extruded wood plastic composites (WPCs), *Construction and Building Materials* 29 (2012) 120 – 127.
  - [23] J. D. Eshelby, The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related prob-

- lems, *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 241 (1226) (1957) 376–396.
- [24] T. Mori, K. Tanaka, Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions, *Acta Metallurgica* 21 (5) (1973) 571 – 574.
- [25] R. Hill, A self-consistent mechanics of composite materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 13 (4) (1965) 213 – 222.
- [26] Z. Hashin, S. Shtrikman, A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11 (2) (1963) 127 – 140.
- [27] O. Pierard, C. Friebel, I. Doghri, Mean-field homogenization of multi-phase thermo-elastic composites: a general framework and its validation, *Composites Science and Technology* 64 (10) (2004) 1587 – 1603.
- [28] S. Kammoun, I. Doghri, L. Adam, G. Robert, L. Delannay, First pseudo-grain failure model for inelastic composites with misaligned short fibers, *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 42 (12) (2011) 1892 – 1902.
- [29] M. Geers, V. Kouznetsova, W. Brekelmans, Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 234 (7) (2010) 2175 – 2182, 4th International Conference on Advanced Computational Methods in Engineering (ACOMEN 2008).
- [30] R. Pucha, J. Worthy, Representative volume element-based design and analysis tools for composite materials with nanofillers, *Journal of Composite Materials* 48 (17) (2014) 2117–2129.
- [31] C. Soyarslan, M. Pradas, S. Bargmann, Effective elastic properties of 3D stochastic bicontinuous composites, *Mechanics of Materials* 137 (2019) 103098.
- [32] P. Pesante, K. Saavedra, G. Pincheira, J. Hinojosa, C. Retamal, Computational homogenisation of a recycled composite material based on pet and wood particles, In *Proceedings of the 6th European Conference on Computational Mechanics: Solids, Structures and Coupled Problems, ECCM 2018 and 7th European Conference on Computational Fluid Dynamics, ECFD 2018* (2020) 2326–2336.
- [33] J. Mandel, *Plasticité classique et viscoplasticité: Course held at CISM, Udine, Springer-Verlag, 1972.*
- [34] R. Hill, Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11 (5) (1963) 357 – 372.
- [35] W. Voigt, Ueber die beziehung zwischen den beiden elasticitätsconstanten isotroper körper, *Annalen der Physik* 274 (12) (1889) 573–587.
- [36] A. Reuss, Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 9 (1) (1929) 49–58.
- [37] MSC Software Company, *DIGIMAT User’s Manual* (2018).
- [38] W. Frącz, G. Janowski, Analysis of fiber orientation in the Wood-Polymer Composites (WPC) on selected examples, *Advances in Science and Technology Research Journal* 11 (2017) 122–129.
- [39] S. G. Advani, C. L. Tucker, The use of tensors to describe and predict fiber orientation in short fiber composites, *Journal of Rheology* 31 (8) (1987) 751–784.
- [40] J. Weissenböck, M. Arian, D. Salaberger, J. Kastner, J. D. Beenhouwer, J. Sijbers, Stefanie, Rauchenzauner, T. Raab-Wernig, E. Gröller, C. Heinzl, Comparative visualization of orientation tensors in fiber-reinforced polymers, *Proceeding of the 8th Conference on Industrial Computed Tomography, Wels, Austria* (2018) 1–9.
- [41] C. Fuentealba, Determinación de las constantes elásticas en pinus radiata d.don por ultrasonido: módulos de elasticidad, módulos de rigidez y razón de poisson, *Maderas, Ciencia y Tecnología* 3 (1-2) (2001) 90–90.
- [42] ASTM International, *ASTM E11-15, Standard Specification for Woven Wire Test Sieve Cloth and Test Sieves*, West Conshohocken, PA (2015).
- [43] L. Teuber, H. Militz, A. Krause, Characterisation of the wood component of WPC via dynamic image analysis, *Proceedings of the first International Conference on Resource Efficiency in Interorganizational Networks* (2013) 46–54.
- [44] Professional Plastics INC., Mechanical properties of plastic materials, [Web; accessed on 28-04-2020]. URL <https://www.professionalplastics.com/professionalplastics/MechanicalPropertiesofPlastics.pdf>

- [45] ASTM International, ASTM D790-17, Standard Test Methods for Flexural Properties of Unreinforced and Reinforced Plastics and Electrical Insulating Materials, Philadelphia, PA (2017).
- [46] A. Alemdar, H. Zhang, M. Sain, G. Cescutti, J. Müssig, Determination of fiber size distributions of injection moulded polypropylene/natural fibers using X-ray microtomography, *Advanced Engineering Materials* 10 (1-2) (2008) 126–130.
- [47] M. Krause, J. M. Hausherr, B. Burgeth, C. Herrmann, W. Krenkel, Determination of the fibre orientation in composites using the structure tensor and local X-ray transform, *Journal of Materials Science* 4 (45) (2010) 888 – 896.
- [48] P. Evans, O. Morrison, T. Senden, S. Vollmer, R. Roberts, A. Limaye, C. Arns, H. Averdunk, A. Lowe, M. Knackstedt, Visualization and numerical analysis of adhesive distribution in particleboard using X-ray micro-computed tomography, *International Journal of Adhesion and Adhesives* 30 (8) (2010) 754 – 762.