



## UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

## Dpto. de Ingeniería Mecánica y de Materiales

### Análisis numérico de un modelo de Phase Field para materiales ortótropos

Trabajo Fin de Máster

Máster Universitario en Ingeniería Mecánica

AUTOR/A: Morcillo Vizuete, Javier Tutor/a: Giner Maravilla, Eugenio Cotutor/a: Quiñonero Moya, Antonio Ramón CURSO ACADÉMICO: 2023/2024

# Análisis numérico de un modelo de Phase Field para materiales ortótropos

Javier Morcillo Vizuete

Valencia, Septiembre 2024

### Resumen

El uso del modelo variacional de fractura (Phase Field) ha ganado gran popularidad en los últimos años. Este método propone una regularización de las grietas que aparecen en un componente mediante una variable continua en el dominio estudiado, acoplada a su vez con el campo de desplazamientos. El modelo propone una función de denominada "densidad de grieta" que incluye términos locales de la variable de Phase Field, así como su gradiente que modela el comportamiento global de dicha variable. La formulación original de este método se propuso para materiales isótropos. Además, se observó que el modelo original predecía la aparición de grietas bajo estados de carga de compresión. Este trabajo propone modificar la función de densidad de grieta mediante un tensor estructural para implementar la ortotropía en las propiedades resistentes del material estudiado. Este tensor determinará las direcciones preferentes de crecimiento de grieta según las propiedades del material. Para remediar la aparición de grietas en estados de compresión, es usual emplear distintas descomposiciones de la energía de deformación. En este trabajo, se emplearán dos adaptaciones de las descomposiciones volumétrica-desviadora y espectral para materiales ortótropos. Se evaluará el desempeño de estas técnicas en dos geometrías: una placa plana con una grieta lateral cargada a tracción y cortante, y una viga con entalla sometida a flexión de tres puntos. Para ello, se empleará el software comercial de elementos finitos Abaqus junto con subrutinas de usuario.

Palabras Clave: Phase Field; descomposición espectral; descomposición volumétrica-desviadora; tensor estructural; material ortótropo

### Abstract

The use of the variational fracture model (Phase Field) has gained great popularity in recent years. This method proposes a regularization of the cracks appearing in a component by means of a continuous variable in the domain under study, coupled in turn with the displacement field. The model proposes a function called "crack density" that includes local terms of the Phase Field variable, as well as its gradient that models the global behavior of this variable. The original formulation of this method was proposed for isotropic materials. In addition, it was observed that the original model predicted the occurrence of cracks under compressive loading states. This work proposes to modify the crack density function by means of a structural tensor to implement the orthotropy in the strength properties of the studied material. This tensor will determine the preferred crack growth directions according to the material properties. To remedy the occurrence of cracks in compressive states, it is usual to employ different decompositions of the strain energy. In this work, two adaptations of the volumetric-deviatoric and spectral decompositions will be used for orthotropic materials. The performance of these techniques will be evaluated in two geometries: a flat plate with a lateral crack loaded in tension and shear, and a beam with notch subjected to three-point bending. For this purpose, the commercial finite element software Abaqus together with user subroutines will be used.

**Key Words:** Phase Field; spectral decomposition; volumetric-deviatoric decomposition; structural tensor; orthotropic material.

### Resum

L'ús del model variacional de fractura (Phase Field) ha guanyat gran popularitat en els últims anys. Este mètode proposa una regularització de les clivelles que apareixen en un component mitjançant una variable contínua en el domini estudiat, acoblada al seu torn amb el camp de desplaçaments. El model proposa una funció de denominada "densitat de clivella" que inclou termes locals de la variable de Phase Field, així com el seu gradient que modela el comportament global d'esta variable. La formulació original d'este mètode es va proposar per a materials isòtrops. A més, es va observar que el model original predeia l'aparició de clivelles sota estats de càrrega de compressió. Este treball proposa modificar la funció de densitat de clivella mitjançant un tensor estructural per a implementar l'ortotropía en les propietats resistents del material estudiat. Este tensor determinarà les direccions preferents de creixement de clivella segons les propietats del material. Per a remeiar l'aparició de clivelles en estats de compressió, és usual emprar diferents descomposicions de l'energia de deformació. En aquest treball, s'empraran dos adaptacions de les descomposicions volumètrica-desviadora i espectral per a materials ortòtrops. S'avaluarà l'acompliment d'estes tècniques en dos geometries: una placa plana amb una clivella lateral carregada a tracció i tallant, i una biga amb entalla sotmesa a flexió de tres punts. Per a això, s'emprarà el programa comercial d'elements finits Abaqus juntament amb subrutines d'usuari.

**Paraules Clau:** Phase Field; descomposició espectral; descomposició volumètrica-desviadora; tensor estructural; material ortòtrop

## CONTENIDO

	Ι	MI	EMO	RIA	<b>2</b>
1	Int	trodu	ucción		4
		1-1	Motiva	ación	4
		1-2	Estado	o del arte	5
		1-3	Objeti	WO	6
		1-4	Estruc	tura	6
2	Ma	arco	Teóric	20	7
		2-1	Mecán	ica de Medios Continuos	7
			2-1-1	Descripción del movimiento	8
			2-1-2	Medidas de deformación	9
			2-1-3	Tensión	9
		2-2	Teorer	na de la Energía Potencial Total Mínima	10
			2-2-1	Enfoque variacional	11
			2-2-2	Ecuaciones de equilibrio	11
		2-3	Phase	Field en fractura frágil	12
			2-3-1	Teoría de Griffith y enfoque variacional	12
			2-3-2	Topología de grieta	15
			2-3-3	Descomposiciones energéticas	16
3	$\mathbf{Es}$	tudio	os y re	sultados	19
		3-1	Mater	ial Isótropo	20
			3-1-1	Ensayo de tracción. Modo I	20
			3-1-2	Ensayo de cortadura. Modo II	27
			3-1-3	Ensayo de flexión de 3 puntos	29
		3-2	Mater	ial Ortótropo	32
			3-2-1	Ensayo de tracción: Modo I	32



		3-2-2	Ensayo de cortadura: Modo II	35
		3-2-3	Ensayo de flexión de 3 puntos	40
4 C	oncl	usiones		43
I	I A	ANEX	OS	<b>49</b>
ΑN	ſode	lado en	Abaqus	51
	A-1	Model	ado en Abaqus (CAE)	52
		A-1-1	Part	52
		A-1-2	Property	53
		A-1-3	Assembly	58

## Parte I

## MEMORIA

### CAPÍTULO 1

## Introducción

El diseño mecánico, cuando trata de acercarse al comportamiento real de los materiales, debe reconocer la presencia de defectos internos o grietas en los componentes. Estos defectos internos afectan a las más importantes propiedades de los materiales, como puede ser la resistencia última. Por ello, pueden ser críticos y causar fracturas inesperadas, Figura 1-0.1.

La **Mecánica de la Fractura** surge como la disciplina que se encarga del estudio del comportamiento mecánico de materiales en presencia de grietas. Esta disciplina comienza con los trabajos de A.A. Griffith, 1921 [9], que posteriormente fueron impulsados por E. Orowan, 1948 [16] y G.R. Irwin, 1958 [10]. Hoy en día, la disciplina ha incorporado al diseño mecánico conceptos como el diseño tolerante al fallo ó el diseño seguro al fallo. Dónde respectivamente, un componente es tolerante a la existencia de grietas en estado de servicio, ó incluye redundancias que evitan un fallo catastrófico del componente en caso de fractura.

Las fracturas son la principal causa de fallo de componentes estructurales, por lo que es un fenómeno crítico para la industria. Una precisa predicción del inicio y propagación de grietas es fundamental para mejorar la seguridad y vida útil de estructuras y componentes en todos los sectores de la ingeniería. La *Mecánica de la Fractura Elástico Lineal (MFEL)* y la *Mecánica de la Fractura No Lineal (MFNL)* proporcionan una base sólida para el estudio de la iniciación y propagación de grietas, pero presentan limitaciones al enfrentarse a problemas complejos (geometrías complejas, interacción entre grietas, materiales ortótropos...). Estos métodos requieren una definición explicita de la geometría de la grieta y un seguimiento explicito de su evolución, lo que resulta en implementaciones numéricas muy complicadas y potencialmente inestables.

El modelo **Phase Field** ha emergido como un enfoque robusto en el modelado numérico de grietas, superando las limitaciones anteriormente mencionadas. Phase Field se basa en un enfoque variacional de minimización de la energía potencial del sistema y incorpora los conceptos de *Función de densidad de grieta* y *Función de degradación de grieta*. A partir de estos conceptos, junto a una variable continua sobre el dominio que se acopla con el campo de desplazamientos, el modelo permite capturar el inicio, la propagación, y otros fenómenos, como la bifurcación y coalescencia de grietras. Todo esto lo hace desde un planteamiento global del problema, considerando homogeneidad en el material.

### 1-1 Motivación

Los **materiales compuestos** obtienen cada vez más atención en la industria porque son capaces de combinar lo mejor de diferentes materiales, resultando en materiales con excelentes propiedades. Estos materiales pueden diseñarse para mejorar propiedades específicas que sean de interés para la aplicación en cuestión. Pero una de las características que más ha extendido su uso, especialmente en el sector aeronáutico, es la capacidad de obtener materiales con una resistencia y rigidez específicas muy superiores a sus competidores.





Figura 1-0.1: Buques *Liberty* fracturados. Marina de EE.UU. Segunda Guerra Mundial.

Los polimeros reforzados con fibra, son ejemplos de este tipo de materiales con muy bajo peso y altas propiedades mecánicas. Pero ocurre que estos materiales presentan, o pueden presentar, diferentes propiedades mecánicas en función de la dirección de aplicación de las cargas. Esto dificulta su estudio ya que la ortotropía, o anisotropía, no solo afecta al comportamiento elástico, sino también, al comportamiento de las fracturas. Este fenómeno puede abordarse teniendo en cuenta la heterogeneidad del material, y por tanto, su microestructura. Pero resultaría ineficiente y demasiado pesado para el estudio de componentes reales, de grandes dimensiones en relación a la microestructura. Por ello, este trabajo pretende implementar el modelo de Phase Field para el estudio de materiales ortótropos, teniendo en cuenta un enfoque global de las propiedades mecánicas de materiales compuestos.

El trabajo se centra en la simulación con Phase Field de materiales ortótropos sometidos a diferentes ensayos, tracción pura, cortante puro y flexión de tres puntos. Donde no sólo se pretende estudiar el comportamiento del modelo con este tipo de materiales, sino además, la influencia de diferentes descomposiciones energéticas en los resultados. De esta forma, se pretende aportar a la investiagación de Phase Field, que no tiene una extensa literatura en cuanto a simulación de materiales ortótropos se refiere.

### 1-2 Estado del arte

La teoría de Griffith, 1921 «The phenomena of rupture and flow in solids», se considera el inicio de la mecánica de fractura como disciplina. Griffith con su enfoque global trata las grieta como superficies que tratan de propagarse si tienen suficiente energía disponible en el sistema. El enfoque de G.R. Irwin, 1958, está más basado en el estudio de las tensiones alrededor de la grieta intruduciendo el concepto de Factor de Intensidad de Grieta ( $K_0$ ) y estableciendo las bases de la Mecáncanica de la Fractura Elástica Lineal (MFEL).

Este trabajo se centra en las simulaciones numéricas, en este campo y más recientemente, autores como G.A. Francfort y J.J. Mariago, 1998 [8], han hecho importantes aportanciones. Especialmente, en el modelado numérico de grietas discretas mediante el enfoque variacional de la fractura frágil. Cabe mencionar también, en esta misma línea, el trabajo de B. Bourdin, 2007 [5] junto a estos mismos autores, y el trabajo de Wu, 2020 [19] tratando el modelado de fracturas en Phase Field de forma completa.



Las simulaciones realizadas en este trabajo parten de los ensayos propuestos por Miehe, 2010 [14], que ya han sido utilizados por otros autores como Ambati, 2014 [1], Kristensen, 2020 [12] o Navidtehrani, 2021 [15].

En cuanto a la simulación de materiales ortótropos, han contribuido autores como van Dijk, 2020 [7] o como Bui, 2021 [6] que ensayan también, modelos de características similares a los ensayados en este trabajo.

### 1-3 Objetivo

El objetivo central del trabajo es el estudio y simulación de fracturas en materiales ortótropos, mediante un modelo de Phase Field implementado en Abaqus. Analizando, el comportamiento bajo diferentes direcciones de fibra y bajo diferentes descomposiciones energéticas. Así mismo, otros objetivos son desarrollar el contexto teórico adecuado para la compresión del modelo Phase Field. Análizar la influencia de parámetros importantes en este tipo de simulaciones, con el objetivo de ver su sensibilidad a la precisión de los resultados. Y exponer un repertorio de resultados donde se muestra el comportamiento de propagación de fracturas bajo diferentes modos de carga.

### 1-4 Estructura

La estructura del trabajo se organiza en cuatro capítulos, que abordan los siguientes contenidos:

- **Capítulo 1. Introducción**. Se introduce el modelo variacional de la fractura Phase Field, en el marco contextual correspondiente al trabajo desarrollado. Se manifiesta la motivación, junto a un breve estado del arte y a los objetivos a alcanzar durante el trabajo.
- Capítulo 2. Marco Teórico. Se desarrollan los conceptos teóricos más relevantes para la comprensión de la teoría detrás de Phase Field en simulaciones numéricas. Estos conceptos se plantean con el objetivo de que el lector pueda conceptualizar el método, sin entrar en grandes detalles y extendidas explicaciones. Estos conceptos se engloban en tres grupos, la *Mecánica de Medios Continuos*, el *Teorema de la Energía Potencial Total Mínima* en su enfoque variacional y el propio desarrollo de *Phase Field* aplicado a fracturas frágiles.
- Capítulo 3. Estudios y resultados. Se muestran de forma estructurada los resultados de todos los ensayos, estudios y simulaciones realizadas. Primeramente, se realizan ensayos sobre materiales isótropos, con el fin principal de analizar la influencia de diferentes parámetros relevantes en la simulación. Posteriormente, se ensayan materiales ortótropos con el objetivo principal del trabajo, que es, análizar el comportamiento a fractura de estos materiales bajo diferentes descomposiciones energéticas. Estos ensayos, en ambos materiales consisten en tracción pura (Modo I), cortadura pura (Modo II) y flexión de tres puntos.
- **Capítulo 4. Conclusiones**. Se detallan las conclusiones extraidas de los resultados de la simulaciones realizadas en el *Capítulo 3. Estudios y resultados*, comparando los resultados obtenidos con la literatura disponible.

Adicionalmente, se adjunta el Anexo A. Exponiendo de forma detallada todo el proceso de modelado llevado a cabo para realiazar las simulaciones numéricas. Los modelos han sido creados con el software comerical Abaqus, junto a diferentes subrutinas de usuario desarrolladas por el DIMM (UPV), basadas en la propuesta de Navidtehrani [15].

## Marco Teórico

La teoría detrás del modelo variacional de la fractura, *Phase Field*, no se entiende sin comprender antes otros conceptos más elementales. Primero, se aborda el problema elástico, partiendo de una introdución a la Mecánica de Medios Continuos. El problema elástico se rige por las ecuaciones constitutivas y de gobierno, que son deducibles a través del enfoque variacional del Teorema de la Energía Potencial Mínima. El enfoque Phase Field propone regularizar en el problema una nueva variable continua, de forma que se resuelven acopladamente el campo de desplzamientos (u) y el campo de la variable de Phase Field ( $\phi$ ). Una vez se tienen las ecuaciones de gobierno regularizadas, se puede implementar el modelo numéricamente para su resolución computacional, el *Método de los Elementos Finitos* permite discretizar el problema para su resolución.

La Mecánica de Medios Continuos proporciona el marco teórico-matemático que describe el comportamiento de los materiales, bajo la hipótesis de medios continuos. Esto lo hace a través del estudio de desplazamientos, deformaciones y tensiones caracterizadas por las ecuaciones constitutivas y las ecuaciones de gobierno.

El Teorema de la Energía Potencial Total Mínima es la base para la resolución del problema elásticos. Para su posterior implementación en modelos numéricos que discretizan el problema. Se comprenden así conceptos como las ecuaciones de equilibrio y su relación con las condiciones de contorno.

La modelo Phase Field incluye en la ecuación de equilibrio de energía potencial total un término energético asociado a las superficies de grieta. De modo que, regulariza una nueva variable ( $\phi$ ) que representa el nivel de daño sobre el material debido a fracturas. Este daño afecta no sólo a la energía potencial total, sino también a la propia energía potencial elástica. Con estos ingredientes se replantean las ecuaciones de equilibrio incluyendo el campo de Phase Field en el problema.

### 2-1 Mecánica de Medios Continuos

La Mecánica de Medios Continuos es la rama de la mecánica que se encarga del estudio de problemas mecánicos sobre cuerpos físicos. Tratando los cuerpos físicos como *cuerpos continuos*, es decir, sin discontinuidades internas. Esta *hipótesis de partida* es válida cuando los cuerpos tienen una dimensión mucho mayor a la de los átomos. La hipótesis sirve para poder describir matemáticamente el medio y sus propiedades mediante funciones continuas. Los cuerpos físicos pueden ser de cualquier naturaleza, pero en este caso se aborda el problema de los sólidos.

Un cuerpo continuo se define matemáticamente como un conjunto  $\mathcal{B}$  formado por infinitas partículas  $P_1, P_2, ..., P_n$ . Que puede transformarse en conjuntos abiertos de  $\mathbb{R}^{n_{dim}}$ , siendo  $n_{dim} = [1, 2, 3]$  el número de dimensiones espaciales, a través de un conjunto infinito de aplicaciones ( $\chi$ ). Estas aplicaciones transforman el conjunto  $\mathcal{B}$  en las llamadas configuraciones,  $\chi(\mathcal{B})$ . De entre todas estas configuraciones, se establece la llamada configuración de referencia ( $\chi_{ref}$ ), generalmente haciéndola coincidir con la



configuración sin deformar. Con esta configuración de referencia, se puede referenciar cómodamente cada partícula  $P \in \mathcal{B}$ . De esta forma, dado un sistema de coordenadas cualquiera para  $\mathbb{R}^3$  a cada partícula P le corresponde un único trío de coordenadas  $(X_1, X_2, X_3)$ .

El problema fundamental de la Mecánica de Medios Continuos consiste en estudiar las causas y efectos que hacen que un cuerpo  $\mathcal{B}$  se transforme desde una configuración de referencia  $\chi_{ref}$  a una configuración deformada  $\chi_{def}$ .



Figura 2-1.1: Representación del campo de deformación de un medio continuo.

#### 2-1-1. Descripción del movimiento

La deformación ( $\varphi$ ) se define como la aplicación definida entre la configuración de referencia  $\mathcal{B}_{ref} \equiv \chi_{ref}(\mathcal{B})$  y la configuración deformada  $\mathcal{B}_{def} \equiv \chi_{def}(\mathcal{B})$ .

$$\varphi := \chi_{ref} \to \chi_{def}, \quad \varphi := \chi_{def} \circ \chi_{ref}^{-1}$$
(2-1.1)

Dado un sistema de coordenas cartesianas en  $\mathbb{R}^3$ , con coordenadas  $(x_1, x_2, x_3)$ , y versores  $(e_1, e_2, e_3)$  se puede identificar cada punto  $x \in \mathbb{R}^3$  con el vector de posición **x**.

$$\mathbf{x} = x_1 e_1 + x_2 e_2 + x_3 e_3 \tag{2-1.2}$$

De esta forma, la deformación  $\varphi$  se puede expresar como una función vectorial de variable vectorial.

En el caso general:  $x = \chi(X, t)$ , En el caso particular:  $x := \varphi(X)$ ,  $X \in \mathcal{B}_{ref}$ 

 $X_1, X_2, X_3 \in \mathcal{B}_{ref}$  Coordenadas materiales.  $x_1, x_2, x_3 \in \mathcal{B}_{def}$  Coordenadas espaciales.

El gradiente de deformación es el primer objeto derivado de la deformación, que se define como un tensor de segundo orden.



$$F(X) := \frac{\partial \varphi(X)}{\partial X}, \quad donde \quad dx = F(X) \, dX$$
 (2-1.3)

El campo de desplazamientos representa el vector que une la posición de cada particula en configuración sin deformar con la posición en configuración deformada.

$$u(X) := \varphi(X) - X = x - X$$
 (2-1.4)

El gradiente del desplazamiento es un tensor que se obtiene derivando el desplazamiento, y se define como.

$$H(X) := \frac{\partial u(X)}{\partial X} = \frac{\partial [\varphi(X) - X]}{\partial X} = F(X) - I, \quad \text{Siendo } I \text{ el tensor identidad}$$
(2-1.5)

#### 2-1-2. Medidas de deformación

Existen muchas medidas locales de deformación de interés. A pesar de que el gradiente de deformación contiene información suficiente sobre la deformación local de un cuerpo, otros tensores de deformación encuentran aplicación.

El tensor derecho de Cauchy-Green:

$$C(X) = F(X)^T F(X)$$
 (2-1.6)

En términos de desplazamientos.  $\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$ 

El tensor de Green-Lagrange:

$$E = \frac{1}{2}(F^T F - I)$$
(2-1.7)

En términos de desplazamientos.  $\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \sum_k^3 \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right)$ 

El tensor de **Almansi**:

$$e = \frac{1}{2}(I - F^{-T}F^{-1}) \tag{2-1.8}$$

#### 2-1-3. Tensión

la tensión se refiere a las fuerzas internas que actúan dentro de un material bajo deformación. Se puede expresar como, Ecuación 2-1.9.

$$\sigma = C : \epsilon \tag{2-1.9}$$



### 2-2 Teorema de la Energía Potencial Total Mínima

#### El Teorema de la Energía Potencial Total Mínima establece que:

La configuración deformada real de un sistema es aquella que satisfaciendo las ecuaciones diferenciales de equilibrio, así como las condiciones de contorno, da un mínimo para la energía potencial total. En comparación con cualquier otro campo de desplazamientos que también satisfaga las mismas condiciones de contorno.

La energía potencial total ( $\Pi$ ) es la suma de la energía potencial elástica interna ( $U_int$ ), y la energía potencial externa ( $U_ext$ ) debida a las fuerzas externas aplicadas. Estas fuerzas externas pueden ser volumétricas, como la fuerza gravitatoria, o aplicadas sobre el contorno, en forma de presión o cargas puntuales.

$$\Pi = U_{int} + U_{ext} \tag{2-2.1}$$

O expresado de otra manera, la energía potencial total es la diferencia entre la energía de deformación (U) y el trabajo realizado por las fuerzas externas  $(W_{ext})$ .

$$\Pi = U - W_{ext} \tag{2-2.2}$$

donde en el caso elástico-lineal:

$$U = \int_{\Omega} \psi(\epsilon) \, dV, \quad \text{siendo} \quad \psi(\epsilon) = \frac{1}{2} \, \epsilon(u) : C : \epsilon(u) = \frac{1}{2} \, \sigma(u) : \epsilon(u)$$

$$U = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sigma(u) : \epsilon(u) \, dV$$
(2-2.3)

$$W_{ext} = \int_{\Omega} \rho \,\mathbf{b} \,\mathbf{u} \,dV + \int_{\partial\Omega} \mathbf{t} \,\mathbf{u} \,dS \tag{2-2.4}$$

Siendo, u el campo de desplazamientos,  $\psi$  la densidad de energía de deformación,  $\epsilon$  el tensor de deformación,  $\Omega$  el dominio del cuerpo,  $\sigma$  el tensor de tensiones  $\sigma(u) = C : \epsilon(u)$ .  $\rho$  la densidad del cuerpo, b la carga volumétrica, t la carga sobre el contorno,  $\partial\Omega$  el contorno del dominio del cuerpo. De esta forma, la expresión de energía potencial total desarrollada queda:

$$\Pi(u) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sigma(u) : \epsilon(u) \, dV - \int_{\Omega} \rho \, \mathbf{b} \, \mathbf{u} \, dV - \int_{\partial \Omega} \mathbf{t} \, \mathbf{u} \, dS \tag{2-2.5}$$



#### 2-2-1. Enfoque variacional

El campo de desplazamientos en equilibrio es aquel que minimiza la energía potencial total, por lo que se hace uso de la primera variación del funcional de energía respecto al campo de desplazamientos (u).

$$\delta \Pi = 0 \tag{2-2.6}$$
  
$$\delta \Pi = \delta U - \delta W_{ext} = 0$$

Por lo que, la variación de energía de deformación  $(\delta U)$  y la variación de trabajo por las fuerzas externas  $(\delta W_{ext})$  quedan definidos como:

$$\delta U = \int_{\Omega} \frac{\partial \psi(\epsilon)}{\partial \epsilon} : \delta \epsilon \, dV, \quad \text{siendo} \quad \delta \psi(\epsilon) = C : \epsilon(u) : \delta \epsilon = \sigma(u) : \delta \epsilon$$

$$\delta U = \int_{\Omega} \sigma(u) : \delta \epsilon \, dV$$
(2-2.7)

$$\delta W_{ext} = \int_{\Omega} \rho \,\mathbf{b} \,\delta \mathbf{u} \,dV + \int_{\partial \Omega} \mathbf{t} \,\delta \mathbf{u} \,dS \tag{2-2.8}$$

La variación de energía potencial total ( $\delta \Pi$ ), finalmente se desarrolla como:

$$\delta \Pi(u) = \int_{\Omega} \sigma(u) : \delta \epsilon \, dV - \int_{\Omega} \rho \, \mathbf{b} \, \delta \mathbf{u} \, dV - \int_{\partial \Omega} \mathbf{t} \, \delta \mathbf{u} \, dS = 0 \tag{2-2.9}$$

#### 2-2-2. Ecuaciones de equilibrio

Para hallar las expresiones de equilibrio cabe operar con la Ecuación 2-2.9. Haciendo uso de la relación entre el tensor de deformaciones ( $\epsilon$ ) y los desplazamientos (u), en este caso tensor de deformaciones utilizado es el de Cauchy-Green:

$$\delta U = \int_{\Omega} \sigma(u) : \delta \epsilon \, dV \tag{2-2.10}$$

$$\epsilon = \frac{1}{2} \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right), \quad \text{entonces} \quad \delta \epsilon = \frac{1}{2} \left( \nabla \delta \mathbf{u} + (\nabla \delta \mathbf{u})^T \right) = \nabla^S \delta \mathbf{u}$$
(2-2.11)

$$\delta U = \int_{\Omega} \sigma(u) : \nabla^S \delta \mathbf{u} \, dV \tag{2-2.12}$$

Hecho esto, se utiliza el teorema de la divergencia para reescribir la ecuación.

$$\int_{\Omega} \sigma(u) : \nabla^{S} \delta \mathbf{u} \, dV = -\int_{\Omega} \nabla \sigma(u) \, \delta \mathbf{u} \, dV + \int_{\partial \Omega} \sigma(u) \, \mathbf{n} \, \delta \mathbf{u} \, dS \tag{2-2.13}$$





Siendo **n** el vector normal a la superficie  $\delta\Omega$ . Finalmente, se reescribe la ecuación de equilibrio, dando lugar a las ecuaciones de gobierno del problema.

$$-\int_{\Omega} \nabla \sigma(u) \,\delta \mathbf{u} \, dV + \int_{\partial \Omega} \sigma(u) \,\mathbf{n} \,\delta \mathbf{u} \, dS = \int_{\Omega} \rho \,\mathbf{b} \,\delta \mathbf{u} \, dV + \int_{\partial \Omega} \mathbf{t} \,\delta \mathbf{u} \, dS \tag{2-2.14}$$

$$\begin{cases} -\nabla \sigma = \rho \mathbf{b}, & \text{en } \Omega \\ \sigma \mathbf{n} = t, & \text{en } \partial \Omega \end{cases}$$
(2-2.15)

### 2-3 Phase Field en fractura frágil

Antes que nada, cabe definir el problema objeto de estudio. En su forma más básica, consiste en un sólido, definido como un cuerpo continuo  $\Omega \subset \mathbb{R}^{n_{dim}}$ , con un contorno  $\delta \Omega \subset \mathbb{R}^{n_{dim}-1}$ , en el que se halla una discontinuidad o grieta,  $\Gamma \subset \mathbb{R}^{n_{dim}-1}$ . Representación en la Figura 2.1(a)

El modelo variacional de Phase Field regulariza las grietas mediante una variable continua ( $\phi$ ). Esto permite no tener que modelar explicitamente la grieta y su evolución, sino que se resuelve el campo de  $\phi$  como un problema acoplado al elástico. La variable de Phase Field,  $\phi$ , representa el nivel de daño del material, siendo  $\phi = 0$  material intacto y  $\phi = 1$  material completamente fracturado. Por tanto, la evolución de la variable de Phase Field representa de una forma difusa el comportamiento de propagación de la grieta, Figura 2.1(b). La evolución de  $\phi$  implica una degradación parcial o total del material, por lo que esta variable afecta al comportamiento de la energía potencial total, y también, de la energía elástica.



Figura 2-3.1: Representación de Phase Field: (a) Grieta superficial real, (b) Grieta difusa de Phase Field, figura extraida de *Kristensen, 2020* [12]

#### 2-3-1. Teoría de Griffith y enfoque variacional

#### Griffith, 1921

- Existe energía superficial asociada a las superficies de fractura.
- Existe un criterio energético de propagación para dichas superficies.
- El proceso de fractura es irreversible.  $l \nearrow^t$



*Griffith, 1921* considera que en un sólido fracturado, en ausencia de cargas externas y sin efectos cinéticos, la variación de energía total ( $\Pi$ ) debida a un aumento incremental de la superficie de grieta (dA) viene dada por la expresión, Ecuación 2-3.1.

$$\frac{d\Pi}{dA} = \frac{d\psi(\epsilon)}{dA} + \frac{dW_c}{dA} = 0$$
(2-3.1)

Siendo,  $\psi$  la densidad de energía elástica y  $W_c$  el trabajo requerido para aumentar la superficie de grieta. El término  $\frac{d\psi(\epsilon)}{dA} = \Psi_e$  hace referencia a la energía elástica del sistema, y el término  $\frac{dW_c}{dA} = \Psi_f$  hace referencia a la energía asociada a la generación de grieta. Siendo este último término la llamada tasa crítica de liberación de energía ( $\mathcal{G}_c$ ).

$$\mathcal{G}_c = \frac{dW_c}{dA} \tag{2-3.2}$$

Introduciendo el término del trabajo producido por las fuerzas externas, la expresión del equilibrio energético de Griffith se puede escribir.

$$\Pi = \Psi_e + \Psi_f - W_{ext} = \int_{\Omega \setminus \Gamma} \psi(\epsilon(u), \Gamma) \, dV + \int_{\Gamma} \mathcal{G}_c \, dS - W_{ext}$$
(2-3.3a)

$$\Pi = \int_{\Omega \setminus \Gamma} \psi(\epsilon(u), \Gamma) \, dV + \int_{\Gamma} \mathcal{G}_c \, dS - \int_{\Omega_b} \rho \, \mathbf{b} \, \mathbf{u} \, dV - \int_{\partial \Omega_t} \mathbf{t} \, \mathbf{u} \, dS \tag{2-3.3b}$$

La variable de Phase Field ( $\phi$ ) es una variable continua y difusa en el dominio del problema, no una superficie de discontinuidad. Por ello, se requiere transformar el término asociado a la energía de grieta ( $\Psi_f$ ). Esto se hace incorporando el concepto de *Funcion de Densidad de Grieta* ( $\gamma$ ). De esta forma, el termino de energía de grieta que existe en el dominio de la superficie de grieta ( $\Gamma$ ), se aproxima mediante la función ( $\gamma$ ) sobre en el dominio del sólido ( $\Omega$ ).

$$\Psi_f = \int_{\Gamma} \mathcal{G}_c \, dS \approx \int_{\Omega} \gamma(\phi, \nabla \phi) \, \mathcal{G}_c \, dV \tag{2-3.4}$$

La función de densidad de grieta,  $\gamma$ , es función de la variable de Phase Field ( $\phi$ ) y de su gradiente ( $\nabla \phi$ ). La expresión propuesta por *Bourdin*, 2000 [4].

$$\gamma(\phi, \nabla \phi) = \frac{1}{\ell} \alpha(\phi) + \ell \left| \nabla \phi \right|^2$$
(2-3.5)

Siendo,  $\ell$  la longitud característica de Phase Field, que representa el tamaño de difusión de la grieta, y  $\alpha$  la función geométrica de grieta, Tabla 2-3.2.

Atendiendo a la degradación del material debido a la propagación de la fractura, también hay que incorporar el concepto de Función de Degradación de Grieta (g). De forma que un punto fracturado del dominio no es capaz de acumular energía elástica. La expresión de la energía de grieta ( $\Psi_e$ ) queda.

$$\Psi_e = \int_{\Omega \setminus \Gamma} \psi(\epsilon) \, dV = \int_{\Omega \setminus \Gamma} g(\phi) \, \psi_0(\epsilon) \, dV \tag{2-3.6}$$



$g(\phi)$	Autores
$(1-\phi)^2$	Bourdin et al. $(2000)$ [4]
$3(1-\phi)^2 - 2(1-\phi)^3$	Karma et al. (2001) [11]
$(3-s)(1-\phi)^2 - (2-s)(1-\phi)^3$	Borden et al. (2016) [3]
$4(1-\phi)^3 - 3(1-\phi)^4$	Kuhn et al. (2015) [13]

En la Tabla 2-3.1, se muestran funciones de degradación de grieta propuestas por diferentes autores.

Tabla 2-3.1: Funciones de degradación de grieta [19].

La ecuación de equilibrio de energía potencial total regularizada, por tanto.

$$\Pi = \int_{\Omega} g(\phi) \,\psi_0(\epsilon) \,dV + \int_{\Omega} \gamma(\phi, \nabla\phi) \,\mathcal{G}_c \,dV - \int_{\Omega_b} \rho \,\mathbf{b} \,\mathbf{u} \,dV - \int_{\partial\Omega_t} \mathbf{t} \,\mathbf{u} \,dS \tag{2-3.7}$$

Derivando la ecuación de equilibrio, el primer varicional de la energía potencial total regularizada se expresa.

$$\delta \Pi = \int_{\Omega} \sigma : \delta \epsilon \, dV + \int_{\Omega} \frac{\delta \psi}{\delta \phi} \delta \phi \, dV + \int_{\Omega} \mathcal{G}_c \left( \frac{\delta \gamma}{\delta \phi} \delta \phi + \frac{\delta \gamma}{\delta \nabla \phi} \delta \nabla \phi \right) \, dv - \int_{\Omega_b} \rho \, \mathbf{b} \, \delta \mathbf{u} \, dV - \int_{\partial \Omega_t} \mathbf{t} \, \delta \mathbf{u} \, dS \quad (2-3.8)$$

Aplicando el teorema de divergencia.

$$\delta \Pi = -\int_{\Omega} (\nabla \cdot \sigma + \rho \mathbf{b}) \delta \mathbf{u} \, dV + \int_{\Omega_t} (\sigma \mathbf{n} - \mathbf{t}) \delta \mathbf{u} \, dS$$

$$+ \int_{\Omega} \frac{\delta \psi}{\delta \phi} + \mathcal{G}_c \left( \frac{\delta \gamma}{\delta \phi} - \nabla (\frac{\delta \gamma}{\beta}) \right) \delta \phi \, dV + \int_{\delta \Omega} \mathcal{G}_c \left( \frac{\delta \gamma}{\delta \nabla \phi} \mathbf{n} \right) \, dS$$
(2-3.9)

Definiendo la función de densidad de grieta acorde a la expresión de la Ecuación 2-3.17.

$$\delta \Pi = -\int_{\Omega} (\nabla \cdot \sigma + \rho \mathbf{b}) \delta \mathbf{u} \, dV + \int_{\delta \Omega_t} (\sigma \, \mathbf{n} - \mathbf{t}) \delta \mathbf{u} \, dS$$

$$+ \int_{\Omega} \left( g'(\phi) \psi_0(\epsilon) + \frac{\mathcal{G}_c}{c_0 \, \ell} (\alpha'(\phi) - 2 \, \ell^2 \, \nabla^2 \phi) \right) \delta \phi \, dV + \int_{\delta \Omega} \frac{2 \, \mathcal{G}_c \ell}{c_0} \nabla \phi \, \mathbf{n} \, \delta \phi \, dS$$
(2-3.10)

De esta forma, las ecuaciones de gobierno quedan finalmente definidas en su forma fuerte.

$$\delta \Pi(u,\phi,\nabla\phi) = 0 \tag{2-3.11}$$



$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b} = 0, & \text{en } \Omega \\ \boldsymbol{\sigma} \, \mathbf{n} = \mathbf{t}, & \text{en } \delta \Omega_t \\ g'(\phi) \psi_0(\epsilon) + \frac{\mathcal{G}_c}{c_0 \,\ell} \left( \alpha'(\phi) - 2 \,\ell^2 \,\nabla^2 \phi \right) = 0, & \text{en } \Omega \\ \frac{2 \mathcal{G}_c \ell}{c_0} \nabla \phi \, \mathbf{n} = 0, & \text{en } \delta \Omega \end{cases}$$
(2-3.12)

El término,  $g'(\phi)\psi_0(\epsilon) = Y$ , se conoce como la fuerza de propagación de fractura, y el término,  $\frac{\mathcal{G}_c}{c_0 \ell} \left( \alpha'(\phi) - 2 \ell^2 \nabla^2 \phi \right)$ , como la resistencia a la fractura.

Denominación	$lpha(\phi)$	$c_0$	Autores
AT1	$\phi$	8/3	Pham et al. (2011) [17]
AT2	$\phi^2$	2	Bourdin et al. (2000) [4]
_	$1 - (1 - \phi^{p/2})$	_	Pham et al. (2011) [17]
PF-CZM	$\xi\phi + (1-\xi)\phi^2$	_	Wu et al. (2017) [18]

Tabla 2-3.2: Funciones geométricas de grieta [19].

#### 2-3-2. Topología de grieta

Un aspecto importante en el modelo Phase Field es modelar adecuadamente la grieta difusa, con su respectiva longitud característica ( $\ell$ ). Una grieta es una superficie de discontinuidad por lo que una buena representación continua es aquella capaz de ser lo más afilada posible. En el caso unidimensional, considerando una barra infinita,  $L = [-\infty, +\infty]$ , sobre el eje  $x, x \in L$ , Figura 2-3.2. La grieta discontinua se define a través una una función auxiliar  $\phi(x) \in [0, 1]$ . Siendo  $\phi = 0$  material intacto y  $\phi = 1$  material fracturado.

$$\phi(x) := \begin{cases} 1 & \text{en } x = 0 \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases}$$
(2-3.13)



Figura 2-3.2: Representación unidimensional de grieta: (a) grieta discontinua, y (b) grieta difusa. Figura extraída de *Miehe, 2010* [14].



La grieta difusa puede representarse con cualquier función que cumpla  $\phi(0) = 1$ , y sea lo más afilada posible al alejarse de x = 0, cumpliendo  $\phi(x) \to 0 : x \to \pm \infty$ . Un ejemplo, es la siguiente ecuación exponencial.

$$\phi(x) = e^{-\frac{|x|}{\ell}} \tag{2-3.14}$$

Esta ecuación es solucionable como una ecuación diferencial ordinaria (EDO).

$$\frac{1}{\ell}\phi(x) - \ell\,\phi''(x) = 0 \tag{2-3.15}$$

Acorde al principio variacional, se busca una función de densidad de grieta cuya condición de minimización de lugar a la ecuación diferencial ordinaria especificada, Ecuación 2-3.15.

$$\Gamma(\phi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{2} \phi^2 + \ell(\phi')^2 \right] dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \gamma(\phi, \nabla\phi) dx$$
(2-3.16)

Siendo la función de degradación de grieta propuesta por Miehe, 2010.

$$\gamma(\phi, \nabla \phi) = \frac{1}{\ell} \alpha(\phi) + \ell \left| \nabla \phi \right|^2$$
(2-3.17)

#### 2-3-3. Descomposiciones energéticas

La propagación de grieta en la realidad sólo se da en presencia de energía asociada a tensiones de tracción, y no de compresión. Por ello, se requiere de descomposiciones energéticas que tengan en cuenta este efecto.

$$\Pi(u,\phi) = \int_{\Omega\setminus\Gamma} \left(g(\phi)\,\psi_+(\epsilon) + \psi_-(\epsilon)\right)\,dV + \gamma(\phi,\nabla\phi)\,\mathcal{G}_c\,dV \tag{2-3.18}$$

La densidad de energía elástica ( $\psi$ ) se descompone en dos partes ( $\psi_+$ ) y ( $\psi_-$ ), ( $\psi(\epsilon) = \psi_+ + \psi_-$ ). Siendo,  $\psi_+$  la parte asociada a la tracción, y  $\psi_-$  la parte asociada a la compresión. Afectando la función de degradación de grieta (g) tan sólo a la parte de tracción.

#### Descomposición de Miehe

*Miehe, 2010* [14] introduce una descomposición de la densidad de energía elástica para materiales isótropos. Esta descomposición se basa en los estados de deformación por tracción. La energía de deformación elástica en términos de los parámetros de Lamé se puede expresar como, Ecuación 2-3.19.

$$\psi(\epsilon) = \frac{1}{2}\lambda \left(tr(\epsilon)\right)^2 + \mu tr(\epsilon^2)$$
(2-3.19)

•  $\lambda$ : Primer parámetro de Lamé.



•  $\mu$ : Segundo parámetro de Lamé ó módulo de corte.

Siendo,  $tr(\boldsymbol{\epsilon})$  la traza del tensor de deformaciones  $tr(\boldsymbol{\epsilon}) = (\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33}).$ 

Los términos de la expresión de la energía de deformación elástica, Ecuación 2-3.19, son una combinación lineal de invariantes del tensor de deformación. Dado que  $tr(\epsilon)$  y  $tr(\epsilon^2)$  son invariantes. Se puede desarrollar la ecuación y descomponer la densidad de energía elástica en función de las deformaciones principales  $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3)$ .

$$\psi(\epsilon) = \frac{1}{2}\lambda(\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33})^2 + \mu(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 + \epsilon_3^2)$$

$$\psi_{+-}(\epsilon) = \frac{1}{2}\lambda\langle\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33}\rangle_{+-}^2 + \mu\langle\epsilon_1\rangle_{+-}^2 + \mu\langle\epsilon_2\rangle_{+-}^2 + \mu\langle\epsilon_3\rangle_{+-}^2$$
(2-3.20)

Siendo  $\langle x \rangle = max\{x, 0\}$ . De esta forma, se puede separar cada argumento en función de si es positivo o negativo. Por tanto, la expresión de la contribución a las tensiones y la contribución a la matriz de rigidez queda.

$$\sigma_{+-} = \frac{d\psi_{+-}}{d\epsilon}, \qquad C_{+-} = \frac{d^2\psi_{+-}}{d\epsilon^2}$$
 (2-3.21)

Para materiales ortótropos, se vuelve a utilizar la energía de deforamción elástica, en términos de los parámetros de Lamé para materiales isótropos. Pero en este caso, se utiliza un nuevo tensor de deformación.

$$\psi(\epsilon) = \frac{1}{2}\lambda \left(tr(\boldsymbol{\varphi}_{\lambda})\right)^2 + \mu tr(\boldsymbol{\varphi}_{\mu}^2)$$
(2-3.22)

Siendo,  $\varphi_{\lambda}$  el tensor  $\varphi_{\lambda} = \sqrt{\lambda}\epsilon$ , y  $\varphi_{\mu}$  el tensor  $\varphi_{\mu} = \sqrt{\mu}\epsilon$ . Y siendo las contantes  $\sqrt{\lambda}$  y  $\sqrt{\mu}$ , dependientes de las direcciones del material.

Para desarrollar los tensores  $\varphi_{\lambda}$  y  $\varphi_{\mu}$  definimos primero la matriz de rigidez del material.

$$\boldsymbol{C} = \frac{d^2 \psi}{d \epsilon^2} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{31} & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_{12} & \alpha_{22} & \lambda_{23} & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_{31} & \lambda_{23} & \alpha_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu_{23} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu_{31} \end{bmatrix}$$
(2-3.23)

Siendo,  $\mu_{ij}$  el módulo de corte,  $\alpha_{ij}$  el llamdo módulo de restricción, y  $\lambda_{ij}$  la componente diagonal de la matriz de rigidez.



Se definen entonces los tensores  $(\varphi_{\lambda})$  y  $(\varphi_{\mu})$ .

$$\varphi_{\lambda} = \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_{11}}\epsilon_{11} & \sqrt{\lambda_{12}}\epsilon_{12} & \sqrt{\lambda_{31}}\epsilon_{31} \\ \sqrt{\lambda_{12}}\epsilon_{12} & \sqrt{\lambda_{22}}\epsilon_{22} & \sqrt{\lambda_{23}}\epsilon_{23} \\ \sqrt{\lambda_{31}}\epsilon_{31} & \sqrt{\lambda_{23}}\epsilon_{23} & \sqrt{\lambda_{33}}\epsilon_{33} \end{bmatrix}, \quad \varphi_{\mu} = \begin{bmatrix} \sqrt{\mu_{11}}\epsilon_{11} & \sqrt{\mu_{12}}\epsilon_{12} & \sqrt{\mu_{31}}\epsilon_{31} \\ \sqrt{\mu_{12}}\epsilon_{12} & \sqrt{\mu_{22}}\epsilon_{22} & \sqrt{\mu_{23}}\epsilon_{23} \\ \sqrt{\mu_{31}}\epsilon_{31} & \sqrt{\mu_{23}}\epsilon_{23} & \sqrt{\mu_{33}}\epsilon_{33} \end{bmatrix}$$
(2-3.24)

La descomposición para materiales ortótropos, por tanto, se define de la misma forma que en el caso isótropo.

$$\psi(\epsilon) = \frac{1}{2}\lambda(\varphi_{\lambda,11} + \varphi_{\lambda,22} + \varphi_{\lambda,33})^2 + \mu(\varphi_{\mu,1}^2 + \varphi_{\mu,2}^2 + \varphi_{\mu,3}^2)$$
(2-3.25)

Definiendose su parte positiva y negativa.

$$\psi_{+}(\epsilon) = \frac{1}{2}\lambda\langle\varphi_{\lambda,11} + \varphi_{\lambda,22} + \varphi_{\lambda,33}\rangle_{+}^{2} + \mu\langle\varphi_{\mu,1}\rangle_{+-}^{2} + \mu\langle\varphi_{\mu,2}\rangle_{+}^{2} + \mu\langle\varphi_{\mu,3}\rangle_{+}^{2}$$

$$\psi_{-}(\epsilon) = \frac{1}{2}\lambda\langle\varphi_{\lambda,11} + \varphi_{\lambda,22} + \varphi_{\lambda,33}\rangle_{-}^{2} + \mu\langle\varphi_{\mu,1}\rangle_{-}^{2} + \mu\langle\varphi_{\mu,2}\rangle_{-}^{2} + \mu\langle\varphi_{\mu,3}\rangle_{-}^{2}$$
(2-3.26)

#### Descomposición de Amor

*Amor, 2009* [2] introduce una descomposición de la densidad de energía elástica basada en estados de deformación volumétricos de tracción y los cortantes. Esta descomposición divide el tensor deformación en deformación hidroestática y desviadora.

$$\epsilon = \epsilon_K \boldsymbol{I} + \boldsymbol{e}, \quad \text{siendo} \quad \epsilon_K = \frac{tr(\epsilon)}{n_{dim}}$$
(2-3.27)

Siendo,  $\epsilon_K$  la deformación hidroestática, I el tensor identidad de segundo orden, e la deformación desviadora.

La densidad de deforamción elástica puede escribirse por tanto.

$$\psi(\epsilon) = \frac{1}{2} K \left( tr(\epsilon) \right)^2 + G tr(e^2)$$
(2-3.28)

Siendo,  $K = \lambda + 2 \mu / n_{dim}$  el modulo de compresibilidad,  $G = \mu$  el módulo de corte. La densidad de energía elástica se descompone en base a estos términos en su parte positiva y negativa.

$$\begin{cases} \psi(\epsilon)_{+} = \frac{1}{2}K \langle tr(\epsilon) \rangle_{+}^{2} + G tr(e^{2}) \\ \psi(\epsilon)_{-} = \frac{1}{2}K \langle tr(\epsilon) \rangle_{-}^{2} \end{cases}$$
(2-3.29)

## Estudios y resultados

#### • 4-1 Material Isótropo

- 4-1-1. Ensayo de tracción. Modo I
  - $\circ~$  Análisis de influencia  $\Delta t$
  - $\circ~$  Análisis de influencia  $\ell$
  - $\circ\,$  Análisis de influencia  $h_e$
  - Análisis de influencia grieta explícita
- 4-1-2. Ensayo de cortadura. Modo II
  - Análisis de Descomposición Energética
- 4-1-3. Ensayo de Flexión de 3 puntos
  - Análisis de Descomposición Energética

#### 4-2 Material Ortótropo

- 4-2-1. Ensayo de tracción. Modo I
- 4-2-2. Ensayo de cortadura. Modo II
- 4-2-3. Ensayo de flexión de 3 puntos

El enfoque central de este trabajo se halla en estudiar el comportamiento de fracturas sobre materiales ortótropos, analizando las diferencias de dos descomposiciones energéticas diferentes, la volumétricadesviadora porpuesta por *Amor, 2009.* y la espectral propuesta por *Miehe, 2010.*, y enfrentandolas a no incorporar descomposición energética alguna. Todo ello, bajo tres casos de carga diferentes. Primeramente, un ensayo de tracción sobre una placa con una grieta lateral, emulando el modelo propuesto por Miehe. Un ensayo a cortante de esta misma placa con grieta lateral, y finalmente, un modelo de viga a flexión simple, de 3 puntos, acorde también a los modelos propuestos por Miehe, utilizados posteriormente por otros autores. Los detalles del modelado de estos ensayos se encuentran en el Anexo A.

Antes de entrar en dichas simulaciones, se estudia previamente la influencia de algunos parámetros importantes en la simulación. Utilizando el caso isótropo se estudia la influencia del incremento de desplazamiento,  $\Delta u$ , o de forma equivalente, del incremento de tiempo,  $\Delta t$ , la influencia de la longitud característica de Phase Field,  $\ell$ , la influencia del tamaño de elemento,  $h_e$  y además, la influencia de definir explicitamente la entalla mediante una condición de contorno, de  $\phi = 1$  sobre la misma.

Todas las simulaciones se realizan con un **Esquema de Resolución Escalonado**, donde se resuelven de forma secuencial el problema de elástico y de fractura. En cada paso temporal se impone el desplazamiento (u) y se calcula el campo de  $(\phi)$  que satisfaga las ecuaciones de gobierno. Se utiliza este esquema por ser más estable a pesar de que los resultados pueden ser menos precisos, especialmente si se utilizan incrementos de desplazamiento  $(\Delta u)$  elevados.



### 3-1 Material Isótropo

#### 3-1-1. Ensayo de tracción. Modo I

El ensayo de tracción de una placa con una grieta lateral sometida a tracción pura, se elabora a partir de una placa de dimensiones 1x1mm con la grieta lateral centrada desde el borde hasta el centro de la placa. Sobre la placa se aplica una tracción en su contorno superior en forma de desplzamiento, ya que esto produce una simulación más estable frente a imponer una presión. Y se le aplican las restricciones desplazamiento en el contorno inferior de la placa, restringiendo el desplazamiento horizontal en un sólo nodo, situado en el vertice inferior dercho.

Este modelo por ser detracción pura no procede estudiar las descomposiciones energéticas, ya que estas evitan que las tensiones de compresión participen en la evolución de la grieta, y no hay estas tensiones en el problema. En la Tabla 3-1.1, se exponen los parámetros estándar utilizados en este ensayo.



Figura 3-1.1: Esquema del ensayo de tracción pura, Modo I.

E[MPa]	ν	$\mathcal{G}_c[N/mm]$	$\ell[mm]$	$h_e[mm]$	$\Delta t$	u[mm]
210000	$0,\!3$	2,7	0,024	0,01	$5\cdot 10^{-3}$	0,01

Tabla 3-1.1: Parámetros estándar para el ensayo de tracción pura, Modo I.

#### Análisis de influencia $\Delta t$

Se estudia la influencia del incremento de timepo en los resultados de la simulación, los parámetros establecidos son acorde a la Tabla 3-1.1, variando  $\Delta t$  acorde a los siguientes valores, Tabla 3-1.2.



Tabla 3-1.2: Incrementos de tiempo  $(\Delta t)$  de estudio.

 $\mathbf{21}$ 





Figura 3-1.2: Resultados del estudio de influencia del incremento de tiempo ( $\Delta t$ ): Cada fila representa un incremento de tiempo diferente ordenados de forma ascendente (a)  $\Delta t = 10^{-4}$ , (d)  $\Delta t = 10^{-3}$ , (g)  $\Delta t = 5 \cdot 10^{-3}$ , (j)  $\Delta t = 10^{-2}$ . Primera columna representa el paso previo a la formación de la grieta, la segunda columna el primer paso con grieta y la última columna el paso final con la grieta completa.





Figura 3-1.3: Resultado comparativa del estudio de influencia del incremento de tiempo ( $\Delta t$ ).

#### Análisis de influencia $h_e$

Se estudia la influencia del tamaño de elemento en la simulación, los parámetros establecidos son acorde a la Tabla 3-1.1, variando  $h_e$  acorde a los siguientes valores, Tabla 3-1.3.

Tabla 3-1.3: Valores de tamaño de elemento  $(h_e)$  de estudio.

La malla de estudio es una malla regular en todo el dominio por lo que una disminución en el tamaño de elemento provoca un gran aumento del tiempo de computo, ver Tabla 3-1.5.



Figura 3-1.4: Comparativa mallas regulares de estudio: (a)  $h_e = 0,024mm$  y 1.764 elementos, (b)  $h_e = 0,01mm$  y 10.000 elementos, (c)  $h_e = 0,005mm$  y 40.000 elementos, (d)  $h_e = 0,001mm$  y 1.000.000 elementos.





Figura 3-1.5: Resultados del estudio de influencia del tamaño de elemento  $h_e$ : (a)  $h_e = 0,024mm$ , (c)  $h_e = 0,01mm$ , (e)  $h_e = 0,005mm$ , (g)  $h_e = 0,001mm$ . A la derecha de las mismas se representa la malla junto al campo de  $\phi$ .



Figura 3-1.6: Resultado comparativa del estudio de influencia del tamaño de elemento  $(h_e)$ .



#### Análisis de influencia $\ell$

Se estudia la influencia de la longitud característica de Phase Field en la simulación, los parámetros establecidos son acorde a la Tabla 3-1.1, variando  $\ell$  acorde a los siguientes valores, Tabla 3-1.4.

$\ell[mm]$	0,006	0,012	0,048	0,096
------------	-------	-------	-------	-------

Tabla 3-1.4: Valores de longitud característica  $(\ell)$  de estudio.



Figura 3-1.7: Comparativa de las diferentes longitudes característica Phase Field de estudio.



Figura 3-1.8: Resultados del estudio de influencia de la longitud característica Phase Field ( $\ell$ ): (a) 0,006mm, (b) 0,012mm, (c) 0,048mm, (d) 0,096mm.

#### Análisis adicionales

Una vez realizados los análisis de influencia también es interesante estudiar espectos como la influencia de describir de forma explícita la grieta, en forma de condición de contorno, asignando un valor  $\phi = 1$  en la superficie de grieta. O también, estudiar el impacto de los parámetros anteriores en el tiempo de computo de las simulaciones.

Por ello, se realiza el estudio la influencia de la grieta explicita en la simulación, los parámetros establecidos son acorde a la Tabla 3-1.1.





Figura 3-1.9: Resultado comparativa del estudio de influencia de longitud característica Phase Field  $(\ell)$ .



Figura 3-1.10: Resultado del estudio de la grieta explicita, en la fila superior la grieta se define de forma explicita mediante condición de contorno y en la fila de abajo no. La primera columna (a)(c) es previo a la aplicación de la carga (t = 0) y la segunda columna (b)(d) finalizada la simulación (t = 1).





Figura 3-1.11: Resultado comparativa del estudio de grieta explicita e implicita.

En cuanto al estudio del esfuerzo computacional de los modelos, se aprovecha la información de los análisis realizados, recopilando los datos de tiempo de compunto en la Tabla 3-1.5.

$h_e[mm]$	$\Delta t[-]$	n <sup>o</sup> Elementos	Tiempo[s]
0.01	$10^{-2}$	10000	540,90
0.01	$5\cdot 10^{-3}$	10000	1060,6
0.01	$10^{-3}$	10000	5278,9
0.01	$10^{-4}$	10000	52146
0.005	$5 \cdot 10^{-3}$	40000	4547,2
0.0025	$5 \cdot 10^{-3}$	160000	15296

Tabla 3-1.5: Tiempo de computo.



#### 3-1-2. Ensayo de cortadura. Modo II

El ensayo de cortante simple de una placa con una grieta lateral sometida a cortante simple, se elabora a partir de la misma placa utilizada en el ensayo de tracción. Pero en este caso el desplazamiento impuesto es en dirección perpendicular al ensayo anterior. Por ello, este modelo requiere un empotramiento completo del contorno inferior de la placa y una condición adicional de restricción de desplazamiento en el borde superior para evitar que el ensayo tienda a acercarse a un Modo I mediante el desplazamiento, en vez de ser un esfuerzo cortante puro.

Una vez analizados los parámetros más relevantes del modelo, se estudia ya la influencia de los modelos de descomposición energética, el problema actual es un gran ejemplo de la importancia de esta descomposición para obtener resultados fieles al comportamiento real de los materiales. Como ya se ha mencionado, se emplean dos de las descomposiciones más utilizadas en la bibliografía, la descomposición volumétrica-desviadora *Amor, 2009.* y la descomposición espectral de *Miehe, 2010.* Comparandose los resultados de ambas descomposiciones con los resultados de no emplear descomposición energética alguna.

En la Tabla 3-1.6, se muestran los valores de los parámtros utilizados en las simulaciones del ensayo de cortadura.



Figura 3-1.12: Esquema del ensayo de cortante puro, Modo II.

E[MPa]	ν	$\mathcal{G}_c[N/mm]$	$\ell[mm]$	$h_e[mm]$	$\Delta t$	u[mm]
210000	$0,\!3$	2,7	$0,\!024$	0,01	$5\cdot 10^{-3}$	0,03

Tabla 3-1.6: Parámetros de estándar para el ensayo de cortante simple, Modo II.

$Descomposici\'on$	Ninguna	Amor	Miehe
--------------------	---------	------	-------

Tabla 3-1.7: Descomposiciones energéticas utilizadas en el estudio.





Figura 3-1.13: Resultados del estudio de descomposiciones energéticas. Los resultados de la primera fila hacen referencia a la simulación sin descomposición energética, la segunda fila a la descomposición de Amor, y la tercera fila a la descomposición de Miehe. (a)(e)(i)  $u = 1,08 \cdot 10^{-2}mm$ , (b)(f)(j)  $u = 1,35 \cdot 10^{-2}mm$ , (c)(g)(k)  $u = 1,71 \cdot 10^{-2}mm$ , (d)(h)(l)  $u = 3 \cdot 10^{-2}mm$ .





Figura 3-1.14: Resultado comparativa del estudio de descomposiciones energéticas en el ensayo de cortante simple.

#### 3-1-3. Ensayo de flexión de 3 puntos

El ensayo de flexión de 3 puntos se elabora a partir de una viga sometida a una flexión en tres puntos. La viga de 2mm de alto y 8mm de ancho se apoya en ambos extremos, con un apoyo empotrado y otro flotante y se impone un desplazamiento en el centro de la superficie superior, Figura 3-1.15.

Este modelo presenta un inconveniente que los anteriores no presentaban. Las condiciones de contorno son puntuales sobre un sólo nodo, lo que provoca concentradores de tensiones en estos puntos. Como estos concentradores de tensiones son a causa del modelo y no tienen efecto sobre el interés real del estudio, se crean zonas con condición de contorno  $\phi = 0$  alrededor de estos puntos para que no prosperen grietas en estas zonas.



Figura 3-1.15: Esquema del ensayo de flexión de 3 puntos.

Los parámetros estandar en este ensayo se muestran en la Tabla 3-1.8.



E[MPa]	ν	$\mathcal{G}_c[N/mm]$	$\ell[mm]$	$h_e[mm]$	$\Delta t$	u[mm]
20800	$0,\!3$	$0,\!5$	0,024	0,01	$5\cdot 10^{-3}$	$0,\!15$

Tabla 3-1.8: Parámetros de estándar Flexión.

$Descomposici\'on$	Ninguna	Amor	Miehe
--------------------	---------	------	-------

Tabla 3-1.9: Descomposiciones energéticas utilizadas en el estudio.

Para poder mantener el nivel de tamaño de elemento en la simulación de la fractura  $h_e = 0.01mm$ , se realiza un refinamiento de la malla en la región de interés. Una malla regular en este caso daría un elevado número de elementos, y por tanto, un gran esfuerzo computacional. Por ello, se mantiene una malla regular en una franja de 0.8mm alrededor de la grieta con un tamaño de elemento de  $h_e = 0.01mm$  y fuera de la franja se permiten elementos hasta un tamaño de  $h_e = 0.1mm$ . La malla se puede visualizar en la Figura 3-1.16.



Figura 3-1.16: Malla utilizada en el ensayo de flexión simple.



Figura 3-1.17: Resultados del estudio de descomposiciones energéticas. Primera columna sin descomposición energética, segunda columna con descomposición de Amor, y tercera columna con descomposición de Miehe. (a)(b)(c)  $\Delta u = 6, 15 \cdot 10^{-2}mm$ , (d)(e)(f)  $\Delta u = 7, 5 \cdot 10^{-2}mm$ , (g)(h)(i) $\Delta u = 9 \cdot 10^{-2}mm$ , (j)(k)(l) $\Delta u = 1, 5 \cdot 10^{-1}mm$ .





Figura 3-1.18: Resultado comparativa del estudio de descomposiciones energéticas en el ensayo de flexión de 3 puntos.



### 3-2 Material Ortótropo

#### 3-2-1. Ensayo de tracción: Modo I

El ensayo de tracción sobre material ortótropo se lleva a cabo utilizando la misma geometría de placa con grieta lateral que en el caso isótropo. El desplazamiento impuesto sobre el borde superior, en esta caso, será  $u = 8 \cdot 10^{-3} mm$ . Se modifican las propiedades del material a las de un material ortótropo con características similares a una lámina de epoxy reforzada con fibra de carbono unidireccional, Anexo A. Las propiedades principales y otros parámetros de la simulación se muestran en la Tabla 3-2.1.

El ensayo se realiza utilizando las descomposiciones volumétrica-desviador de Amor y la espectral de Miehe, sobre diferentes direcciones principales de fibra, con ángulo ( $\theta$ ). La dirección de la fibra se mida respecto a la horizontal, véase Figura 3-2.1.



Figura 3-2.1: Esquema del ensayo de tracción pura con material ortótropo, Modo I.

$E_1[MPa]$	$E_2[MPa]$	$\nu_1$	$\nu_2$	$G_{12}[MPa]$	$S_t[MPa]$
230000	13000	$0,\!3$	0,35	11000	2000
$\mathcal{G}_{c1}[N/mm]$	$\mathcal{G}_{c1}[N/mm]$	$\ell[mm]$	$h_e[mm]$	$\Delta t$	u[mm]
0,250	0,070	0,024	0,01	$5\cdot 10^{-3}$	$8 \cdot 10^{-3}$

Tabla 3-2.1: Parámetros estándar para el ensayo de tracción pura con material ortótropo, Modo I.

Amor	0 <u>0</u>	$45^{\underline{0}}$	90 <u>0</u>	-45 <sup>0</sup>
Miehe	0 <u>0</u>	$45^{0}$	$90^{0}$	$-45^{0}$

Tabla 3-2.2: Combinaciones de descomposiciones energéticas y ángulos de fibra ( $\theta$ ) utilizadas en el estudio.





Figura 3-2.2: Resultados del estudio de descomposiciones energéticas con material ortótropo, Modo I. Primera fila con descomposición de Amor, segunda fila con descomposición de Miehe. (a)(e)  $\theta = 0$ , (b)(f)  $\theta = 45$ , (c)(g)  $\theta = 90$ , (d)(h)  $\theta = -45$ .



Figura 3-2.3: Resultado comparativa del estudio de la descomposición de Amor con material ortótropo, Modo I.





Figura 3-2.4: Resultado comparativa del estudio de la descomposiciones de Miehe con material ortótropo, Modo I.



Figura 3-2.5: Resultado comparativa del estudio de descomposiciones energéticas con material ortótropo, Modo I.



#### 3-2-2. Ensayo de cortadura: Modo II

El ensayo de cortante simple sobre placa con grieta lateral se realiza utilizando el mismo modelo geométrico que en el ensayo isótropo, pero con propiedades de material que en el ensayo ortótropo, idénticas a las del ensayo de tración. Se mantiene el incremento temporal  $(\Delta t)$ y se reduce el desplazamiento impuesto sobre el contorno supeior a u = 0,02mm De la misma forma que en el ensayo anterior, se simularán con ambas descomposiciones energéticas las combinaciones de dirección de fibra  $(\theta)$  mostradas en la Tabla 3-2.4.

Con este ensayo se hace añadidamente un estudio específico de la combinación con descomposicón volumétrica-desciadora de Amor y dirección de fibra  $\theta = 90$ , dados los resultados obtenidos en la simulación.



Figura 3-2.6: Esquema del ensayo de cortante simple con material ortótropo, Modo II.

$E_1[MPa]$	$E_2[MPa]$	$ u_1 $	$\nu_2$	$G_{12}[MPa]$	$S_t[MPa]$
230000	13000	$0,\!3$	$0,\!35$	11000	2000
$\mathcal{G}_{c1}[N/mm]$	$\mathcal{G}_{c1}[N/mm]$	$\ell[mm]$	$h_e[mm]$	$\Delta t$	u[mm]
0,250	0,070	0,024	0,01	$5 \cdot 10^{-3}$	0,02

Tabla 3-2.3: Parámetros estándar para el ensayo de cortante simple con mateial ortótropo, Modo II.

Amor	$0^{\underline{0}}$	$45^{0}$	$90^{\mathbf{O}}$	-45 <sup>o</sup>
Miehe	$0^{\underline{0}}$	$45^{0}$	$90^{\mathbf{Q}}$	-45 <sup>0</sup>

Tabla 3-2.4: Combinaciones de descomposiciones energéticas y ángulos de fibra ( $\theta$ ) utilizadas en el estudio.





Figura 3-2.7: Resultados del estudio de descomposición de Amor con material ortótropo, Modo II. Primera fila  $\theta = 0$ , segunda fila  $\theta = 45$ , tercera fila  $\theta = 90$ , cuarta fila  $\theta = -45$ . (a)(e)(i)(m)  $u = 6 \cdot 10^{-3}$ , (b)(f)(j)(n)  $u = 1 \cdot 10^{-2}$ , (c)(g)(k)(ñ)  $u = 1, 4 \cdot 10^{-2}$ , y (d)(h)(l)(o)  $u = 2 \cdot 10^{-2}$ .







Figura 3-2.8: Resultados del estudio de descomposición de Miehe con material ortótropo, Modo II. Primera fila  $\theta = 0$ , segunda fila  $\theta = 45$ , tercera fila  $\theta = 90$ , cuarta fila  $\theta = -45$ . (a)(e)(i)(m)  $u = 6 \cdot 10^{-3}$ , (b)(f)(j)(n)  $u = 1 \cdot 10^{-2}$ , (c)(g)(k)(ñ)  $u = 1, 4 \cdot 10^{-2}$ , y (d)(h)(l)(o)  $u = 2 \cdot 10^{-2}$ .









Figura 3-2.9: Resultado comparativa del estudio de descomposición de Amor con material ortótropo, Modo II.



Figura 3-2.10: Resultado comparativa del estudio de descomposición de Miehe con material ortótropo, Modo II.





Figura 3-2.11: Resultado comparativa general del estudio de descomposiciones energéticas con material ortótropo, Modo II.



Figura 3-2.12: Resultados del estudio del caso:  $\theta = 90$  con descomposición de Amor.

El fenómeno que ocurre en la simulación realizada con descomposición energética de Amor y dirección de fibra  $\theta = 90$  no está documentado en la bibliografía. Ese cambio de dirección de la grieta parece una inexactitud en el resultado de la simulación. Por ello, se realizan diferentes simulaciones con incrementos de tiempo,  $\Delta t$ , diferentes.



Tabla 3-2.5: Incrementos temporales utilizados.

Se observa como el fenómeno tarda más en aparecer a medida que disminuye el incremento de desplazamiento ( $\Delta u$ ), por lo que efectivamente, el efecto parece fruto de la imprecisión causada por el incremento temporal utilizado en la simulación.





#### 3-2-3. Ensayo de flexión de 3 puntos

En ensayo de flexión de 3 puntos se realiaza utilizando la misma geometría de viga que en el caso isótropo. Las propiedades de material ortótropo son las mismas que en los dos ensayos anteriores, se muestran junto al resto de parámetros en la Tabla 3-2.6. El desplazamiento impuesto se reduce a u = 0, 1mm respecto al desplazamiento impuesto en el ensayo isótropo. La malla se mantiene con un tamaño de elemento en la región de interés de  $h_e = 0, 01$ .



Figura 3-2.13: Esquema ensayo flexión.

$E_1[MPa]$	$E_2[MPa]$	$ u_1 $	$\nu_2$	$G_{12}[MPa]$	$S_t[MPa]$
230000	13000	$0,\!3$	0,35	11000	2000
$\mathcal{G}_{c1}[N/mm]$	$\mathcal{G}_{c1}[N/mm]$	$\ell[mm]$	$h_e[mm]$	$\Delta t$	u[mm]
0,250	0,070	0,024	0,01	$5 \cdot 10^{-3}$	0,1

Tabla 3-2.6: Parámetros estándar para el ensayo de flexión de 3 puntos con material ortótropo.

Amor	$0^{\underline{0}}$	$45^{0}$	$90^{\underline{0}}$	-45º
Miehe	$0^{\mathbf{O}}$	$45^{0}$	90 <sup>0</sup>	-45 <sup>o</sup>

Tabla 3-2.7: Combinaciones de descomposiciones energéticas y ángulos de fibra ( $\theta$ ) utilizadas en el estudio.





Figura 3-2.14: Resultados del estudio de descomposiciones energéticas con material ortótropo, flexión de 3 puntos. Primera columna con descomposición de Amor, segunda columna con descomposición de Miehe. (a)(b)  $\theta = 0$ , (c)(d)  $\theta = 45$ , (e)(f)  $\theta = 90$ , (g)(h)  $\theta = -45$ 



Figura 3-2.15: Resultado comparativa del estudio de descomposición de Amor con material ortótropo, flexión de 3 puntos.





Figura 3-2.16: Resultado comparativa del estudio de descomposición de Miehe con material ortótropo, flexión de 3 puntos.



Figura 3-2.17: Resultado comparativa del estudio de descomposiciones energéticas con material ortótropo, flexión de 3 puntos.

## Conclusiones

En el trabajo se ha introducido el modelo variacional de fractura Phase Field, el modelo empleado en la simulación de fracuras durante el trabajo. Para comprender la teoría detrás del modelo, se ha expuesto un marco teórico en el que se introducen algunos conceptos elementales de la Mecánica de Medios Continuos. Posteriormente, se desarrolla el enfoque variacional del Teorema de la Energía Potencial Total Mínima. Para finalmente, explicar los conceptos que incorpora el modelo Phase Field sobre la ecuación de equilibrio de energía potencial total, y sobre las ecuaciones de gobierno en su forma fuerte.

Las conclusiones de las simulaciones se exponen de forma estructurada acorde a los diferentes estudios.

#### Análisi de influencia $\Delta t$

Los resultados del campo de  $\phi$  con la grieta completamente desarrollada, no muestran grandes diferencias entre los distintos casos. Se aprecia que con incrementos temporales ( $\Delta t$ ) mayores, que se traduce en incrementos de desplazamiento mayores ( $\Delta u$ ), en ancho de banda aparente de la grieta es superior. Mientras que a menor incremento de tiempo la grieta está más definida, limitada por la longitud característica de Phase Field.

La gráfica comparativa de las curvas F/u sí que muestra diferencias importantes entre las distintas simulaciones. En el tramo previo a la fractura, todos los casos se comportan de forma predeciblemente elástica. Cuando empiezan a fallar, las simulaciones con un  $\Delta t$  menor, fallan antes y de forma más abrupta. Las simulaciones con incrementos temporales más grandes sobreestiman la resistencia del sistema y la fractura se da de forma más progresiva con una curva cada vez mas suave.

#### Análisis de influencia $h_e$

De la misma forma que en el caso anterior, los resultados del campo de  $\phi$  con la grieta completamente desarrollada no muestran diferencias apreciables, salvo que la malla sea suficientemente grande,  $2 h_e > \ell_0$ , en este caso se ve afectado el campo de  $\phi$ . La longitud carácteristica  $\ell$  debe tener al menos el tamaño de dos elementos  $\ell_{min} \geq 2 \cdot h_e$ .

La gráfica comparativa de las curvas F/u evidencia que las diferencias en los resultados no son especialmente notorias. Un tamaño de elemento más grande sobrestima la resistencia, esto es representativo cuando la relación  $\ell/h_e$  se aproxima a dos, una relación  $\ell/h_e > 5$  ya no mejora sustancialmente los resultados. En este caso el tamaño de elemento no parece tener un gran efecto sobre la velocidad de propagación de la grieta.



#### Análisis de influencia $\ell$

Los campos de  $\phi$  con la grieta desarrollada muestran el efecto de la difusión de la grieta. Al aumentar la dimensión de  $\ell$ , se genera una grieta difusa que crea grandes zonas de material dañado, pero no completamente fracturado. Lo cual es un efecto poco fiel a la realidad que resultará en resultados poco precisos. Idealmente, el ancho de banda aparente debe tener una dimensión significativamente menor a la longitud de grieta.

En la gráfica comparativa de las curvas F/u se evidencia el gran efecto que tiene la longitud característica de grieta  $\ell$  en los resultados. Una longitud característica grande infravalora la resistencia del sistema. Lo cual es trivial, ya que más parte del dominio está bajo los efectos de la degradación producidos por la fractura. Se observa que en el caso de menor  $\ell$ ni siquiera llega a fracturarse completamente la placa. Aunque es cierto, que al bajar tanto la longitud característica no se estaba cumpliendo la relación 2 $h_e > \ell_0$ .

#### Análisis adicionales

La llamada grieta explicita consiste en definir una condición de contorno sobre la entalla geométrica. Esta condición tiene efecto tanto en la rigidez del sistema, como el la resistencia del mismo. Que exista una zona dañada desde t = 0 hace que es sistema sea menos rígido. Además, parece que favorece al crecimiento de la grieta bajando su resistencia y haciendo la transición a la fractura más suave.

En cuanto a los tiempos, a pesar de ser un asunto trivial, el incremento de timpo  $\Delta t$  tiene una relación directamente proporcional al tiempo de computo  $\Delta t \propto T$ , mientras que el tamaño de elemento  $h_e$  por ser un problema bidimensional, en  $\mathbb{R}^2$ , disminuir el tamaño de elemento tiene una relación cuadrática en el tiempo de computo  $h_e \propto T^2$ .

Como conclusión general de esta serie de estudios realizados sobre diferentes parámetros. Mejorar la precisión de las simulaciones de fracturas pasa por tener un incremento de desplazamiento  $\Delta u$  pequeño, sobretodo si se utiliza un esquema de resolución escalonado, que impone los incrementos de desplazamiento en la resolución del problema. En caso de usar un esquema monolítico esto también aplicaría dado que, si no, existen problemas de convergencia, aunque en este caso no afectaría a la precisión. Por otro lado, también es importante que la longitud carácterística de Phase Field sea lo menor posible, debido a los grandes efectos que tiene en los resultados. Esta disminución de  $\ell$  debe ir acompañada de un tamaño de elemento acorde, sabiendo que el efecto de seguir bajando el tamaño de elemento una vez se cumple una relación de  $\ell/h_e > 5$  son cada vez más bajos. Por otro lado, parece también que no definir explicitamente la entalla mejora los resultados, no haciendo la fractura del material de forma suave.

#### Análisis de descomposción energética

En el ensayo de coratadura pura, se analiza el comportamiento de la fractura bajo diferentes descomposiciones energéticas.

Los resultados muestran claramente como al no usar descomposición energética alguna se forma una doble grieta, una producida por la energía asociada a las tracciones y otra producida por la energía asociada a las compresiones. Al aplicar las descomposiciones energéticas efectivamente la grieta asociada a tensiones de compresión desaparece. Ambas descomposiciones tienen resultados muy similares, la descomposición de Miehe produce un camino de grieta algo más vertical. La descomposición de Amor, en cambio, produce un efecto extraño cuando está a punto de desarrollarse por completo, apareciendo una segunda grieta desde el vertice inferior derecho. Este efecto se retrata así en la bibliografía



#### disponible.

La gráfica comparativa de las curvas F/u muestra como en la simulación sin descomposición energética no se llega a desarrollar la grieta por completo, esto se debe a la pérdida de rigidez del sistema que hace que el proceso de fractura se alargue respecto al desplazamiento. Es llamativo también, que con la descomposición de Miehe la placa es significativamente más resistente que con la de Amor. Mientras que la descomposición de Amor tiene un comportamiento más similar al que tiene el caso sin descomposición alguna.

En el ensayo de flexión simple, por ser un caso en el que no hay tensiones de compresión alrededor de la grieta, se observa un comportamiento muy parecido entre las tres simulaciones. Aunque vuelve a repetirse que la descomposición de Miehe sobrestima la resistencia del sistema. En este ensayo, la descomposición de Amor tiene un comportamiento casi idéntico respecto a no utilizar descomposición.

#### Análisis de descomposción energética en materiales Ortótropos

Los resultados del **ensayo de tracción** muestran el primer efecto natural que surge al incorporar propiedades ortótropas al material. Al modificar la dirección de la fibra, se modifica la dirección de propagación de la grieta. Con la combinación elegida de modulos de rigidez y tasa crítica de liberación de energía, la grieta tiende a propagarse en la dirección de la fibra. Además, se observa el efecto sobre la longitud característica  $\ell$ . Cuando la grieta se propaga en una dirección similar a la de la fibra, entra en juego  $\ell_f$ , mientras que cuando la dirección de propagación es similar a la de la matriz, entra en juego  $\ell_m$ .

La gráfica comparativa de las curvas F/u del ensayo de tracción exponen las diferencias, tanto en rigidez como en resistencia, de las direferentes direcciones de la lámina. Con  $\theta = 90^{\circ}$ , la dirección de la fibra se alinea con la dirección la carga, resultado en una rigidez y resitencia muy superior. Con  $\theta = 0^{\circ}$ , el sistema es más elástico y es capaz de soportar un mayor desplazamiento impuesto sin alcanzar la fractura. El resultado de  $\theta = 45^{\circ}$  y  $\theta = -45^{\circ}$  es una rigidez y resistencia entra los dos casos anteriores.

Comparando ambas descomposiciones, se observa que consiguen resultados muy similares, aunque se vuelve a ver como la descomposición de Miehe alcanza una mayor fuerza pico.

Los resultados del **ensayo de cortante** simple son menos ilustrativos. Primeramente, llaman la atención las grietas secundarias que surgen en la descomposición de Amor, tanto con  $\theta = 0^{\circ}$  como con  $\theta = -45^{\circ}$ . Este efecto ocurre en la literatura, donde aparece una grieta secundaria en dirección ascendente, pero poco después vuelve a fusionarse con la grieta principal. En el ensayo realizado, al estar empleando un incremento de desplazamiento relativamente alto, el efecto se ve acentuado y la grieta secundaria se propaga significativamente. Otro efecto llamativo en las simulaciones con la descomposción de Amor es la aparición de grietas en el vertice inferior derecho, especialmente visible con  $\theta = -45^{\circ}$ . Pero que también ocurre con  $\theta = 45^{\circ}$ , apareciendo una grieta secundaria desde el contorno derecho cuando la fractura se aproxima a este.

La descomposición de Miehe, por el contrario, genera fracturas únicas. En los caso de  $\theta = 0^{\circ}$  y  $\theta = 45^{\circ}$ , la grieta tiene un trazado mucho más recto hasta el vértice inferior derecho, mientras que en los casos de  $\theta = 90^{\circ}$  y  $\theta = -45^{\circ}$ , la grieta tiene un trazado más curvo sesgado hacia la dirección vertical.

La gráfica comparativa de las curvas F/u muestran para la descomposición de Amor que la fuerza pico en los cuatro casos es muy parecida. Cabria esperar que la fibra con  $\theta = -45^{\circ}$  tuviera una rigidez y resistencia superiores al resto, por estar alineada con dirección de fractura. Pero esto no ocurre por la grieta que se forma en el vértice inferior derecho. Los casos con  $\theta = -45^{\circ}$  y  $\theta = 45^{\circ}$  tienen resultados relativamente similares, mientras que los casos de  $\theta = 0^{\circ}$  y  $\theta = 90^{\circ}$  tienen rigideces inferiores.



En la descomposición de Miehe, es llamativo el resultado de fibra  $\theta = -45^{\circ}$ , que tiene una fuerza pico muy superior al resto. Tras iniciarse la grieta el sistema pierde rigidez, pero es capaz de seguir soportanto carga hasta que tiene un fractura veloz. Con  $\theta = 90^{\circ}$ , la fractura es capaz de soportar un mayor desplazamiento antes de desarrollarse por completo, respecto al resultado obtenido con la descomposición de Amor. El resto de curvas son similares a las obtenidas con la descomposición volumétrica-desviadora de Amor.

Los resultados del **ensayo de flexión** muestran los mismos efectos que el ensayo de tracción. Cuando la fractura se propaga en la dirección de la fibra, el ancho de banda es inferior, cuando se propaga perpendicular a la fibra, el ancho de banda en superior. Y en los caso de  $\theta = 45^{\circ}$  y  $\theta = -45^{\circ}$ , la dirección de la grieta tiende a alinearse con la dirección de la fibra.

La gráfica comparativa de las curvas F/u muestran como con  $\theta = 0^{\circ}$  se obtiene la mayor rigidez y resistencia. Debido a que la fibra en esta dirección soporta las cargas de tracción que se producen en torno a la grieta, que está situada debajo de la fibra neutra. Con  $\theta = 90^{\circ}$  se obtiene la menor rigidez y resistencia, y con  $\theta = 45^{\circ}$  y  $\theta = -45^{\circ}$  casos intermedios. Todos los casos tienen su pico de fuerza aproximadamente en el mismo desplazamiento impuesto (u) y cuanto más rígido es el sistema, más rápido se propaga la grieta. Comparando la descomposición de Amor con la de Miehe, los resultados son muy similares, ocurriendo de nuevo que la descomposición de Miehe consigue una mayor resistencia.

## Bibliografía

- M. Ambati, T. Gerasimov y L. De Lorenzis, «A review on phase-field models of brittle fracture and a new fast hybrid formulation,» *Computational Mechanics*, vol. 55, dic. de 2014. DOI: 10. 1007/s00466-014-1109-y.
- [2] H. Amor, J.-J. Marigo y C. Maurini, «Regularized formulation of the variational brittle fracture with unilateral contact: Numerical experiments,» *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 57, págs. 1209-1229, ago. de 2009. DOI: 10.1016/j.jmps.2009.04.011.
- [3] M. J. Borden, T. J. Hughes, C. M. Landis, A. Anvari e I. J. Lee, «A phase-field formulation for fracture in ductile materials: Finite deformation balance law derivation, plastic degradation, and stress triaxiality effects,» *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 312, págs. 130-166, 2016, Phase Field Approaches to Fracture, ISSN: 0045-7825. DOI: 10.1016/j.cma. 2016.09.005.
- [4] B. Bourdin, G. A. Francfort y J.-J. Marigo, «Numerical experiments in revisited brittle fracture,» Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 48, n.º 4, págs. 797-826, 2000.
- [5] B. Bourdin, G. A. Francfort y J.-J. Marigo, «A variational approach to fracture,» Journal of Elasticity, vol. 91, págs. 5-148, 2007.
- [6] T. Q. Bui y X. F. Hu, «A review of phase-field models, fundamentals and their applications to composite laminates,» *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 248, pág. 107 705, 2021.
- [7] N. van Dijk, J. J. Espadas Escalante y P. Isaksson, «Strain energy density decompositions in phase-field fracture theories for orthotropy and anisotropy,» *International Journal of Solids and Structures*, vol. 196-197, abr. de 2020. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2020.04.022.
- [8] G. A. Francfort y J.-J. Marigo, «Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem,» Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 46, n.º 8, págs. 1319-1342, 1998.
- [9] A. A. Griffith, «The phenomena of rupture and flow in solids,» Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character, vol. 221, págs. 163-198, 1921.
- [10] G. R. Irwin, «Elasticity and Plasticity: Fracture,» en Encyclopedia of Physics, S. Flugge, ed., vol. 6, Springer, 1958, págs. 551-590.
- [11] A. Karma, D. A. Kessler y H. Levine, «Phase-Field Model of Mode III Dynamic Fracture,» Phys. Rev. Lett., vol. 87, pág. 045 501, 4 jul. de 2001. DOI: 10.1103/PhysRevLett.87.045501.
- [12] P. Kristensen y E. Martínez Pañeda, «Phase field fracture modelling using quasi-Newton methods and a new adaptive step scheme,» *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, vol. 107, pág. 102 446, jun. de 2020. DOI: 10.1016/j.tafmec.2019.102446.



- [13] C. Kuhn, A. Schlüter y R. Müller, «On degradation functions in phase field fracture models,» Computational Materials Science, vol. 108, págs. 374-384, 2015, Selected Articles from Phase-field Method 2014 International Seminar, ISSN: 0927-0256. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.05.034.
- [14] C. Miehe, F. Welschinger y M. Hofacker, «Thermodynamically consistent phase-field models of fracture: Variational principles and multi-field FE implementations,» *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 83, págs. 1273-1311, sep. de 2010. DOI: 10.1002/nme. 2861.
- [15] Y. Navidtehrani, C. Betegón y E. Martínez-Pañeda, «A simple and robust Abaqus implementation of the phase field fracture method,» *Applications in Engineering Science*, vol. 6, pág. 100 050, 2021, ISSN: 2666-4968. DOI: 10.1016/j.apples.2021.100050.
- [16] E. Orowan, «Fracture and strength of solids,» Reports on Progress in Physics, vol. 12, págs. 185-232, 1948.
- [17] K. Pham, H. Amor, J.-J. Marigo y C. Maurini, «Gradient Damage Models and Their Use to Approximate Brittle Fracture,» *International Journal of Damage Mechanics*, vol. 20, n.º 4, págs. 618-652, 2011. DOI: 10.1177/1056789510386852.
- [18] J.-Y. Wu, «A unified phase-field theory for the mechanics of damage and quasi-brittle failure,» Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 103, págs. 72-99, 2017, ISSN: 0022-5096. DOI: 10.1016/j.jmps.2017.03.015.
- [19] J.-Y. Wu, V. P. Nguyen, C. Thanh Nguyen, D. Sutula, S. Bordas y S. Sinaie, "Phase field modelling of fracture," Advances in Applied Mechanics, vol. 53, págs. 1-183, sep. de 2019.

## Parte II

## ANEXOS

## Modelado en Abaqus

La creación de modelos de simulación de fracturas sigue las mismas pautas que cualquier modelo de elementos finitos. Se define la geometría del modelo, se establecen las propiedades mecanicas del material, se discretiza el problema mallando y definiendo el tipo de elemento. Se definen las condiciones de contorno del problema y cualquier otra característica adicional que pueda tener, como ecuaciones de restricción entre nodos o elementos.

Aunque es cierto, que modelar problemas de fractura tiene algunas implicaciones particulares. En este caso, al hacer uso de subrutinas de usuario, las propiedades del material no se definen con normalidad en el software. Sino que se hace, a traves de un "Material de Usuario", definiendo cada propiedad según lo requiera el código de la subrutina.

La peculiaridad más relevante es el uso de la analogía térmica para resolver el problema de Phase Field. El problema térmico tiene una naturaleza asimilable al problema de Phase Field, Ecuación A-0.1. De forma que tomando la variable de temperatura como variable de Phase Field ( $\phi = T$ ) y definiendo la densidad de flujo de calor (r) y su derivada de forma adecuada, se resuelve el problema de fractura de una forma ya implementada en Abaqus.

$$\mathcal{K}\nabla^2 T - \rho \frac{\partial \mathcal{I}}{\partial t} = -r, \quad \longrightarrow \quad g'(\phi)\psi_0(\epsilon) + \frac{\mathcal{G}_c}{c_0\,\ell}\left(\alpha'(\phi) - 2\,\ell^2\,\nabla^2\phi\right) = 0 \tag{A-0.1}$$

Siendo,  $\mathcal{K}$  la conductividad térmica, T la temperatura, y r la densidad de flujo de calor.

Por tanto, el modelo se genera teniendo en cuenta que se trata de un problema elástico y térmico de forma acoplada. por ello hay que definir en las propiedades del material que sean conductores térmicos y por tanto, que tengan una conductividad definida.

En el problema isótropo la conductividad será la unidad ( $\mathcal{K} = 1$ ), pero en materiales ortótropos se utiliza una conductividad, también ortótropa, que hace referencia al **Tensor Estructural** (M). De forma que la conductividad toma la siguiente forma ( $\mathcal{K} = M$ ).

$$\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{M}_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \boldsymbol{M}_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \boldsymbol{M}_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{G_{c2}}{G_{c1}}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{G_{c2}}{G_{c1}}} \end{bmatrix}$$
(A-0.2)

Siendo el Tensor Estructural un tensor que se define por las direcciones principales del material, y establece las direcciones preferentes para la propagación de la grieta.



### A-1 Modelado en Abaqus (CAE)

#### A-1-1. Part

Definición de la geometría de la pieza.

#### Create part

- Modeling space/2D Planar
- Type/Deformable
- Base feature/Shell



Figura A-1.1: Geometrías de pieza utilizadas en los modelos: (a) Ensayos de placa con grieta lateral Modo I y Modo II, (b) Ensayo de viga a flexión simple.

Definición de la geometría de la grieta

• Partition Face: Sketch



Figura A-1.2: Geometrías de grieta utilizadas en los modelos: (a) Ensayos de placa con grieta lateral Modo I y Modo II, (b) Ensayo de viga a flexión simple.



#### A-1-2. Property

Definición de las propiedades del material.

#### Caso Isótropo

#### Create Material

- $\bullet \ {\rm General}/{\rm User \ material}$ 
  - User material type: Mechanical
  - Mechanical Constants [Tabla A-1.1]
- General/Depvar
  - $\circ\,$  Number of solution-dependent state variable: 7
  - $\circ~$  Variable number controlling element deletion: 0
- $\bullet \ {\rm Thermal}/{\rm Heat} \ {\rm Generation}$
- Thermal/Conductivity
  - Type: Isotropic
  - $\circ~$  Number of field variables: 0
  - $\circ\,$  Conductivity:  ${\bf 1}$

	Denominación	E. Trac/Cor	E. Flexión	Mechanical Constants
E	Módulo de Young	210000MPa	20800MPa	PROPS(1)
ν	Coeficiente de Poisson	0,3	0,3	PROPS(2)
l	Longitud caracteristica Phase Field	0,024mm	0,024mm	PROPS(3)
$G_c$	Tasa de liberación de energía	2,7N/mm	0,5N/mm	PROPS(4)
-	Indicador de Esquema de Resolución (0:Monolítico, 1:Escalonado)	1 : Escalonado	1 : Escalonado	PROPS(5)
-	Indicador de Modelo $(0:AT2, 1:AT1)$	1 : AT1	1 : AT1	PROPS(6)
-	Indicador de Descomposición Energética (0:Sin descomposición, 1:Amor, 2:Miehe)	_	_	PROPS(7)
_	Indicador de Momento Lineal (1:Hibrido, 2:Anisotrópico)	1 : Hibrido	1 : Hibrido	PROPS(8)
$S_t$	Resistencia a tracción	1MPa	1MPa	PROPS(9)

Tabla A-1.1: Propiedades de usuario para material Isótropo [14] [1].



#### Caso Ortótropo

#### Create Material

- General/User material
  - $\circ~$  User material type: Mechanical
  - Mechanical Constants [Tabla A-1.2]
- $\bullet \ {\rm General}/{\rm Depvar}$ 
  - $\circ\,$  Number of solution-dependent state variable: 11
  - $\circ\,$  Variable number controlling element deletion: 0
- $\bullet \ {\rm Thermal}/{\rm Heat} \ {\rm Generation}$
- Thermal/Conductivity
  - Type: Orthotropic
  - $\circ~$  Number of field variables: 0

• Conductivity	$k_{11}$	$k_{22}$	$k_{33}$
	1	$\begin{array}{c ccc} \kappa_{22} & \kappa_{33} \\ \hline 0,53 & 0,53 \end{array}$	0,53

Cálculo de la conductividad térmica, (Tensor Estructural).

$$\mathcal{K} = \begin{bmatrix} \mathcal{K}_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{K}_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \mathcal{K}_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{G_{c2}}{G_{c1}}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{G_{c2}}{G_{c1}}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0,53 & 0 \\ 0 & 0 & 0,53 \end{bmatrix}$$
(A-1.1)



Parámetro	Denominación	Valor	Mechanical Constants
$E_1$	Módulo de Young (Dirección 1)	230000MPa	PROPS(1)
$E_2$	Módulo de Young (Dirección 2)	13000MPa	PROPS(2)
$\nu_1$	Coeficiente de Poisson (Dirección 1)	0,3	PROPS(3)
$\nu_2$	Coeficiente de Poisson (Dirección 2)	0,35	PROPS(4)
G <sub>12</sub>	Módulo de Cortadura	11000MPa	PROPS(5)
l	Longitud caracteristica Phase Field	0,024mm	PROPS(6)
$G_{c1}$	Tasa de liberación de energía (Dirección 1)	0,250N/mm	PROPS(7)
$G_{c2}$	Tasa de liberación de energía (Dirección 2)	0,070N/mm	PROPS(8)
-	Indicador de Esquema de Resolución (0:Monolítico, 1:Escalonado)	1 : Escalonado	PROPS(9)
-	Indicador de Modelo (0:AT2, 1:AT1)	1 : AT1	PROPS(10)
-	Indicador de Descomposición Energética (0:Sin descomposición, 1:Amor, 2:Miehe)	_	PROPS(11)
-	Indicador de Momento Lineal (1:Hibrido, 2:Anisotrópico)	1 : Hibrido	PROPS(12)
_	Indicador Dirección de Fibra $(0:0^{\varrho}, 1:90^{\varrho})$	$0:0^{\mathbf{O}}$	PROPS(13)
$S_t$	Resistencia a tracción	2000MPa	PROPS(14)

Tabla A-1.2: Propiedades de usuario [1-14] para material Ortótropo.



 $\label{eq:calculo} \begin{array}{l} C \acute{a} l culo \ de \ la \ matriz \ \sqrt{C}, y \ definición \ de \ las \ propiedades \ del \ material \ empleadas \ en \ la \ des composición \\ energética \ de \ Amor. \end{array}$ 

	483,831	10,1609	11,003	0	0	0
	0	0	0	74, 162	0	0
	0	0	0	0	74,162	0
	0	0	0	74, 162	0	0
$\sqrt{C} =$	10,1609	120,021	21,9102	0	0	0
	0	0	0	0	0	74, 162
	0	0	0	0	74, 162	0
	0	0	0	0	0	74, 162
	11,003	21,9102	120,062	0	0	0

Parámetro	Denominación	Valor	Mechanical Constants
$[\sqrt{C}]_{11}$	Elemento (1,1) de la matriz $\sqrt{C}$	483,831	PROPS(15)
$[\sqrt{C}]_{12}$	Elemento (1,2) de la matriz $\sqrt{C}$	10,1609	PROPS(16)
$[\sqrt{C}]_{13}$	Elemento (1,3) de la matriz $\sqrt{C}$	11,003	PROPS(17)
$[\sqrt{C}]_{52}$	Elemento (5,2) de la matriz $\sqrt{C}$	120,021	PROPS(18)
$[\sqrt{C}]_{53}$	Elemento (5,3) de la matriz $\sqrt{C}$	21,9102	PROPS(19)
$[\sqrt{C}]_{93}$	Elemento (9,3) de la matriz $\sqrt{C}$	120,062	PROPS(20)
$[\sqrt{C}]_{24}$	Elemento (2,4) de la matriz $\sqrt{C}$	$74,\!162$	PROPS(21)
$[\sqrt{C}]_{35}$	Elemento (3,5) de la matriz $\sqrt{C}$	$74,\!162$	PROPS(22)
$[\sqrt{C}]_{66}$	Elemento (6,6) de la matriz $\sqrt{C}$	74,162	PROPS(23)

Tabla A-1.3: Propiedades de usuario [15-23] para material Ortótropo con descomposición Amor.



Cálculo de las matrices  $\varphi_{\lambda} y \varphi_{\mu}$ , y definición de las propiedades del material empleadas en la descomposición energética de Miehe.

$$\varphi_{\lambda} = \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_{11}}\epsilon_{11} & \sqrt{\lambda_{12}}\epsilon_{12} & \sqrt{\lambda_{31}}\epsilon_{31} \\ \sqrt{\lambda_{12}}\epsilon_{12} & \sqrt{\lambda_{22}}\epsilon_{22} & \sqrt{\lambda_{23}}\epsilon_{23} \\ \sqrt{\lambda_{31}}\epsilon_{31} & \sqrt{\lambda_{23}}\epsilon_{23} & \sqrt{\lambda_{33}}\epsilon_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 90, 2858 & 79, 8544 & 82, 8689 \\ 79, 8544 & 70, 6283 & 73, 2944 \\ 82, 8689 & 73, 2944 & 76, 0612 \end{bmatrix}$$
(A-1.2)

$$\varphi_{\mu} = \begin{bmatrix} \sqrt{\mu_{11}}\epsilon_{11} & \sqrt{\mu_{12}}\epsilon_{12} & \sqrt{\mu_{31}}\epsilon_{31} \\ \sqrt{\mu_{12}}\epsilon_{12} & \sqrt{\mu_{22}}\epsilon_{22} & \sqrt{\mu_{23}}\epsilon_{23} \\ \sqrt{\mu_{31}}\epsilon_{31} & \sqrt{\mu_{23}}\epsilon_{23} & \sqrt{\mu_{33}}\epsilon_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 336, 277 & 104, 881 & 104, 881 \\ 104, 881 & 70, 7107 & 104, 881 \\ 104, 881 & 104, 881 & 67, 9366 \end{bmatrix}$$
(A-1.3)

Parámetro	Denominación	Valor	Mechanical Constants
$[arphi_{\lambda}]_{11}$	Elemento (1,1) de la matriz $\varphi_{\lambda}$	90,2858	PROPS(15)
$[arphi_{\lambda}]_{22}$	Elemento (2,2) de la matriz $\varphi_\lambda$	70,6283	PROPS(16)
$[arphi_\lambda]_{33}$	Elemento (3,3) de la matriz $\varphi_\lambda$	76,0612	PROPS(17)
$[arphi_{\mu}]_{11}$	Elemento (1,1) de la matriz $\varphi_{\mu}$	336,277	PROPS(18)
$[arphi_{\mu}]_{22}$	Elemento (2,2) de la matriz $\varphi_{\mu}$	70,7107	PROPS(19)
$[arphi_{\mu}]_{33}$	Elemento (3,3) de la matriz $\varphi_{\mu}$	67,9366	PROPS(20)
$[arphi_{\mu}]_{12}$	Elemento (1,2) de la matriz $\varphi_{\mu}$	104,881	PROPS(21)
$[arphi_{\mu}]_{13}$	Elemento (1,3) de la matriz $\varphi_{\mu}$	104,881	PROPS(22)
$[\varphi_{\mu}]_{23}$	Elemento (2,3) de la matriz $\varphi_{\mu}$	104,881	PROPS(23)

Tabla A-1.4: Propiedades de usuario [15-23] para material Ortótropo con descomposición Miehe.



Definición de la sección del material.

#### Create Section

- Category/Solid
- Type/Homogeneous
- Material: Material\*
- Assign Section
  - Section: Sección\*

Definición de la orientación de los elementos.

#### Assign Material Orientation

- Orientation/Definition/Coordinate system
- Aditional Rotation Direction/Axis 3
- Additional Rotation: Ángulo\*
- Stacking Direction/Element isoparametric direction 3

#### A-1-3. Assembly

Inserción de la parte en el ensamblaje del modelo.

#### Instance Part

- Parts: **Parte**\*
- Instance Type/Independent



#### A-1-4. Step

Definición de los pasos de tiempo del modelo.

#### Create step

- Procedure type: General
- Coupled temp-displacement
  - Basic/Response: **Steady-state**
  - Basic/Time period: 1
  - Basic/Nlgeom: Off
  - Basic/Automatic stabilization: None
  - Incrementation/Type: Automatic
  - Incrementation/Maximum number of increments: 10000000
  - Incrementation/Increment size: [Initial: 0,005] [Minimum: 1e-7] [Maximum: 0,005]
  - Other/Matrix storage: **Symmetric**
  - $\circ~{\rm Other/Solution}$  technique: Separated
  - $\circ~$  Other/Convert severe discontinuity iterations: Propagate from previous step
  - $\circ~$  Default load variation with time/Ramp linearly over step
  - Other/Extrapolation of previous state at start of each increment: None

Definición de campos de resultado.

#### • Create Field Output

- Domain: Whole model
- Frequency: Every x units of time/x: 0,01
- Timing: Output at exact times
- Output variables/Edit variables: [S, MISES, E, U, RF, NT]
- Output at shell, beam, and layered section points: Use default
- Include local coordinate directions when available

#### • Create History Output

- Domain: Whole model
- Frequency: Every x units of time/x: 0,01
- Timing: Output at exact times
- Output variables/Edit variables: [ETOTAL]
- Output at shell, beam, and layered section points: Use default

#### A-1-5. Interaction

Definición de la grieta.

Interaction/Special/Crack/Asign seams



### A-1-6. Load

Definición de las condiciones de contorno del modelo.

#### Create Boundary Condition

- Step: Initial
- Category: Mechanical
- Types for Selected Step/Displacement/Rotation
  - $\circ$  CSYS: (Global)
  - $\circ$  Dirección\*

#### • Create Boundary Condition

- Step: Paso\*
- Category: Mechanical
- Types for Selected Step/Displacement/Rotation
  - CSYS: (Global)
  - Distribution: Uniform
  - Dirección\*: Magnitud\*
  - $\circ\,$  Amplitud: Ramp

#### • Create Predefined Field

- Step: Initial
- Category: **Other**
- Types for Selected Step/Temperature
  - Distribution: Direct specification
  - $\circ~$  Section variation: Constant through region
  - $\circ\,$  Magnitude:  $\mathbf{0}$

#### • Create Amplitude

- Type: Tabular
  - $\circ\,$  Time span: Step time
  - Smothing: Use solver default

	Time/Frecuency	Amplitud
<ul> <li>Amplitud Data/</li> </ul>	0	1
	1	1

#### Create Boundary Condition

- Step: Paso\*
- Category: **Other**
- Types for Selected Step/Temperature
  - $\circ\,$  Distribution: Uniform
  - $\circ\,$  Magnitude: 1
  - $\circ \ {\rm Amplitud} {:} \ {\rm Amplitud} {*}$



Figura A-1.3: Condiciones de contorno utilizadas en los modelos: (a) Ensayos de placa con grieta lateral Modo I y Modo II, (b) Ensayo de viga a flexión simple.



Figura A-1.4: Mallas utilizadas en los modelos: (a) Malla regular de 10000 elementos,  $h_e = 0,01mm$  utilizada en los ensayos de placa con grieta lateral Modo I y Modo II, (b) Malla de 26090 elementos,  $h_e = [0,01-0,1]mm$  utilizada en el ensayo de viga a flexión simple.



### A-1-7. Mesh

Definición de la malla del modelo.

#### Seed Part Instance

- Aproximate global size: Tamaño de elemento\*
- Curvature control
- Maximum deviation factor: 0,1
- Minimum size control/By fraction of global size: 0,1
- Mesh Part Instance

Definición del tipo de elemento del modelo.

#### • Assign Element Type

- Element Library/Standard
- Geometric Order/Linear
- Family/Couple Temperature-Displacement
- Quad/Analysis type/Plane strain

CPE4T: A 4-node plane strain thermally coupled quadrilateral, bilinear displacement and temperature.

#### A-1-8. Job

Definición del trabajo de análisis.

#### • Create job

- Source: Model
- Modelo\*
  - Submission/Job Type/Full Analysis
  - Submission/Run Mode/Background
  - Submission/Submit Time/Immediately

#### Write Input