

IMPLEMENTACIÓN EN ABAQUS DE LA MINIMIZACIÓN DE LA ENERGÍA TOTAL BAJO UNA CONDICIÓN DE TENSIÓN PARA PREDECIR EL INICIO Y LA PROPAGACIÓN DE GRIETAS EN MATERIALES HOMOGÉNEOS FRÁGILES

K. Ambikakumari Sanalkumar, V. Mantič*, M. Muñoz-Reja, L. Távora

Grupo de Elasticidad y Resistencia de Materiales, Escuela Técnica Superior de Ingeniería

Universidad de Sevilla, Camino de los Descubrimientos s/n, 41092 Sevilla, España

Persona de contacto: mantic@us.es

RESUMEN

Para la predicción del inicio y del crecimiento de grietas en materiales frágiles se utiliza el criterio acoplado de la Mecánica de Fractura Finita, que considera que las grietas pueden avanzar por pasos finitos, y requiere que además del criterio de energía se cumpla también un criterio tensional. En el procedimiento numérico implementado mediante una rutina de usuario UINTER en ABAQUS, los avances finitos de la grieta, que cumplen el criterio tensional, se puentean mediante una distribución continua de muelles elástico-lineales, que permite definir una variable de daño a lo largo de estos potenciales avances finitos de grietas. Así, la energía total (suma de la energía potencial y la energía disipada) es convexa por separado respecto al campo de los desplazamientos y a la variable de daño, que permite aplicar el algoritmo de minimización alternante para la minimización de la energía total. Este enfoque, que considera los pasos de carga, es más versátil que la formulación clásica del criterio acoplado, proporcionando una herramienta que en el futuro pueda permitir resolver problemas complejos de relevancia industrial. Se presenta un ejemplo numérico, que muestra que el procedimiento numérico implementado proporciona predicciones precisas para el crecimiento de grietas.

PALABRAS CLAVE: CCFFM, PMTE-SC, FEM, UINTER en ABAQUS

ABSTRACT

The coupled criterion of Finite Fracture Mechanics is used for the prediction of crack initiation and propagation in brittle materials. It is considered that cracks propagate by finite steps, requiring that both an energy and a stress criterion must be fulfilled. In the numerical procedure, implemented by means of a UINTER user subroutine in ABAQUS, the finite crack advances that fulfil the stress criterion are bridged by a continuous distribution of linear-elastic springs, which allows defining a damage variable along these potential finite crack advances. Thus, the total energy (sum of potential and dissipated energy) is separately convex with respect to the field of displacements and the damage variable, which allows the alternating minimisation algorithm to be applied for the minimisation of the total energy. This approach, which considers loading steps, is more versatile than the classical formulation of the coupled criterion, providing a tool that in the future may allow solving complex problems of industrial relevance. A numerical example is presented, showing that the implemented numerical procedure provides accurate predictions for the crack propagation.

KEYWORDS: CCFFM, PMTE-SC, FEM, UINTER in ABAQUS

1. INTRODUCCIÓN

La presencia de grietas en materiales frágiles puede reducir drásticamente la vida útil de una estructura o provocar fallos catastróficos. A pesar que en el pasado se han realizado muchas investigaciones para estudiar este tipo de fractura, la iniciación de grietas bajo cargas cuasi-estáticas es aún hoy en día un tema controvertido. La Mecánica de Fractura Elástica Lineal (LEFM por sus siglas en inglés) no puede predecir el inicio de la grieta en un concentrador de tensiones o en una singularidad débil, ni la desviación de la trayectoria de la grieta en el interior de un material cuando alcanza una interfase. En las últimas dos décadas, los investigadores se han centrado en desarrollar modelos de la mecánica de la fractura eficientes y precisos para la predicción numérica de iniciación de

grietas utilizando nuevos enfoques.

El modelo de zona cohesiva (CZM por sus siglas en inglés) [1, 2] es el más utilizado entre los modelos no clásicos de la mecánica de la fractura. Aplica hipótesis diferentes a las utilizadas en el LEFM para evitar la singularidad de tensiones en el vértice de la grieta y no requiere una grieta inicial para predecir el origen de la fractura. Además, puede predecir varias trayectorias del daño a la vez cuando se introducen varios elementos cohesivos [3, 4].

Por otro lado, en el denominado modelado de la fractura por “Phase Field”, desarrollado a partir del trabajo de Francfort y Marigo [5], se considera un modelo de gradiente de daño que predice el inicio y la propagación de la grieta cuando un parámetro de longitud se define

adecuadamente como una longitud característica del material. Este modelo ha ganado una gran popularidad recientemente, pero desde la comunidad científica se han expresado preocupaciones acerca de las posibilidades de las funciones de degradación y de la energía de fractura y del parámetro de longitud para representar adecuadamente situaciones complejas que involucran, por ejemplo, a compresiones, contacto, anisotropía, iniciación de grietas, etc.

Por otro lado, en los últimos años, se ha hecho popular la Mecánica de la Fractura Finita (FFM por sus siglas en inglés), la cual permite considerar el inicio o el avance de la fractura como un incremento finito de la longitud de la grieta. Por tanto, no mantiene la hipótesis de Griffith, que establece que el crecimiento de grietas es infinitesimal. En el marco de la FFM, Leguillon [6] introdujo el criterio acoplado de la FFM (CCFFM) que es la base de este trabajo. En el criterio acoplado, los criterios de tensión y de energía son dos condiciones necesarias pero no suficientes separadamente para permitir el inicio o el avance instantáneo de una grieta. El criterio acoplado se ha utilizado de manera efectiva para predecir el daño en diferentes materiales, incluidos los materiales compuestos [7, 8, 9, 10, 11, 12, 13]. En este marco, Mantič [14] desarrolló una nueva formulación del criterio acoplado, donde se investigaron varios aspectos y aplicaciones de la minimización de la energía total para el inicio y la propagación de grietas en materiales frágiles, asumiendo la evolución de la grieta de forma cuasi-estática. El Principio de Energía Total Mínima bajo una Condición de Tensión (PMTE-SC por sus siglas en inglés), introducido en [14], es más versátil debido a su capacidad para ser utilizado en una implementación computacional genérica con una técnica de paso de tiempo. Además, el funcional de la energía total es convexo por separado respecto a las variables de daño y de desplazamientos, lo que permite que las técnicas de optimización sean eficientes y robustas para minimizar la energía total.

2. PMTE-SC - PRINCIPIO DE ENERGÍA TOTAL MÍNIMA BAJO UNA CONDICIÓN DE TENSIÓN

La hipótesis de Leguillon [6] postula que la combinación de los dos criterios de tensión y de energía puede predecir el inicio de una nueva grieta que tiene una longitud (cuando estamos estudiando un problema 2D) o un área (cuando estamos estudiando un problema 3D) finita. El criterio de tensión usado en este trabajo requiere que la tensión normal al plano de la posible grieta finita ΔS_c supere un valor crítico σ_c . Este criterio debe cumplirse en cada punto x de la nueva superficie del material ΔS_c . Siguiendo la formulación en [14, 15, 16], se puede escribir una expresión bastante general del criterio tensional mediante un funcional homogéneo de grado 1 respecto al

campo tensional, $f(\sigma_{ij}, \Delta S_c)$:

$$f(\sigma_{ij}, \Delta S_c) \geq \sigma_c. \quad (1)$$

Se debe tener en cuenta que este criterio es evaluado antes del inicio de la fractura en todo el dominio, Ω , y permite obtener todas las posibles superficies de grieta, $\Delta S_c \subset \Omega$.

Posteriormente el criterio energético es evaluado basándose en el balance energético incremental, ya que se evalúa considerando el estado previo y posterior a la fractura finita definida por ΔS_c :

$$\Delta \Pi(\Delta S_c) + \Delta E_k + \Delta R(\Delta S_c) = 0, \quad (2)$$

donde $\Delta \Pi(\Delta S_c)$ es la variación de la energía potencial, $\Delta R(\Delta S_c)$ es la energía disipada en la formación de la nueva superficie de grieta, ΔS_c , y ΔE_k es el incremento de energía cinética involucrada en el proceso, que siempre será mayor que cero. Por tanto, al igual que [6], que desprecia el intercambio de calor en el balance energético, se puede expresar el balance energético como:

$$\Delta \Pi(\Delta S_c) + \Delta R(\Delta S_c) \leq 0, \quad (3)$$

que indica que la suma del incremento de energía potencial y disipada debe permanecer constante o disminuir para que se produzca la grieta finita. Alternativamente y de forma básicamente equivalente a la formulación tradicional del CCFFM de Leguillon, el PMTE-SC, introducido en [14], también predice el inicio y/o el crecimiento de grietas por incrementos finitos. En este trabajo, al igual que en el CCFFM clásico, el PMTE-SC también asume la evolución del problema de forma cuasiestática sin tener en cuenta las fuerzas inerciales. Por tanto, el PMTE-SC se puede escribir como la siguiente minimización bajo una condición de tensión:

$$\min_{\Delta S_c} [\Delta \Pi(\Delta S_c) + \Delta R(\Delta S_c)], \quad (4)$$

donde la condición de tensión significa que la minimización de energía total sólo es considerada en aquellas nuevas superficies de grietas para las que se verifica el criterio tensional para unas condiciones de contorno dadas. El concepto clave que subyace en esta formulación es que una nueva superficie de grieta puede aparecer solo en aquellas regiones donde aparecen tensiones suficientemente altas antes de la fractura, lo que representa que la formación de grietas se inhibe si las tensiones son demasiado pequeñas, aunque haya una cantidad suficiente de energía disponible para liberarse.

La Eq. (4) es una formulación (incremental) del principio de máxima disminución de la energía total del sistema, el cual puede dar lugar a un problema de minimización no convexo que es muy difícil de resolver usando un algoritmo de optimización de la energía total. En consecuencia, se ha utilizado un algoritmo de minimización alterna (AMA) que separa el problema de minimización del funcional de energía en dos términos independientes: la

variable daño y el campo de desplazamientos, basándose en que este funcional sea convexo respecto a cada una de estas variables por separado. Esta técnica de optimización ha mostrado ser eficiente y robusta para minimizar la energía total.

Por otro lado, en este trabajo se ha utilizado un enfoque simplificado para modelar las discontinuidades de tensiones que aparecen al producirse la fractura del material. Para ello una vez que se ha definido la posible superficie de la grieta que satisface el criterio tensional, ΔS_c , se define una distribución continua de muelles lineales con espesor cero, que se conoce como Interfaz de Muelles Elástica Lineal (LESI por sus siglas en inglés). A diferencia de los elementos con espesor finito, en los elementos de espesor cero no existe una distancia entre las superficies y, por lo tanto, la rigidez de contacto de estos elementos no depende de su espesor. Es por ello que se ha determinado que esta técnica es la más adecuada para simular grietas en un medio homogéneo cuando se usa el Método de Elementos Finitos (FEM por sus siglas en inglés).

3. RESULTADOS

Para analizar la capacidad de predicción del PMTE-SC se ha utilizado un problema clásico de Griffith, donde se modela una placa con altura $2L = 80$ mm, anchura $2W = 60$ mm y una grieta inicial de longitud $2a$ centrada en el eje x . Como se muestra en la Fig. 1, debido a la naturaleza simétrica del problema y en aras de la eficiencia computacional, solo se modela la mitad derecha del espécimen. Además de las condiciones de contorno ilustradas en la figura, se asumen las condiciones de deformación plana y se usa un sistema de coordenadas cartesiano (x, y) . La placa analizada esta hecha de Zirconia con las siguientes propiedades mecánicas: el módulo de Young $E = 210$ GPa, el coeficiente de Poisson $\nu = 0.22$, la resistencia a tracción del material $\sigma_c = 564.19$ MPa y la energía de fractura $G_c = 476$ Jm⁻².

Para realizar el mallado de la placa se ha utilizado la longitud característica del material que se puede determinar a partir de la siguiente relación, $l_c = \frac{1}{\pi} \left(\frac{K_{Ic}}{\sigma_c} \right)^2$ que da como resultado 0.1 mm para el material estudiado. Cabe destacar que el avance finito de la grieta obtenido usando el criterio acoplado suele ser en torno a esta longitud característica o su fracción, por lo que se debe definir una malla (suficientemente fina) que pueda capturar con precisión esta longitud de avance de la grieta. En este trabajo se ha usado una malla uniforme de 300 elementos a lo largo del avance potencial de la grieta Δa_s , determinado por el criterio tensional. Cabe mencionar que se ha comprobado que con una malla mucho mas basta se obtienen resultados similares. Se ha utilizado el elemento cuadrático CPE8 de la librería de ABAQUS.

Para simular el inicio de la fractura con una longitud finita, ABAQUS realiza un análisis FEM en el primer módulo del algoritmo, es decir, el módulo del criterio tensional, lo que da como resultado la máxima longitud inicial de la grieta Δa_s propagando desde la grieta inicial a , tal y como muestra la Fig. 1. Posteriormente, se incluye una Interfaz de Muelles Elástica Lineal (LESI) a lo largo de las superficies producidas por la presencia de Δa_s . El comportamiento de estos muelles se incluye a través del módulo UINTER de ABAQUS.

Posteriormente, el módulo que representa el criterio energético predice la longitud de grieta resultante, Δa_c , utilizando el algoritmo AMA. Como consecuencia del modelado de la posible grieta como una distribución de muelles entre las dos superficies nuevas, las mallas usadas en los módulos de los criterios tensional y energético son diferentes. Sin embargo, dentro del modulo del criterio energético no existen diferencias en las mallas de las diferentes configuraciones de avance de grieta, ya que las longitudes de las grietas en las iteraciones de AMA se pueden alterar «activando» y «desactivando» los muelles presentes a lo largo de las superficies de la grieta. En consecuencia, mantener la misma topología de malla permite la reducción de errores numéricos en los cálculos de incremento de energía potencial.

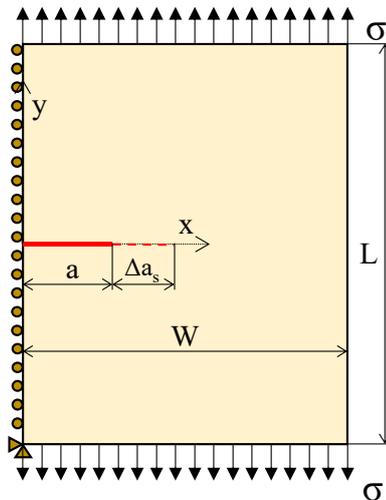


Figura 1: Ilustración del un modelo de grieta en el centro con las dimensiones y las condiciones de contorno utilizadas para la simulación numérica.

En la Fig. 2 se analizan los resultados obtenidos con el algoritmo descrito. En el eje de abscisas se representa la longitud de la grieta a medida que esta propaga desde su longitud inicial, y en el eje de ordenadas se representa la tensión remota que produce un incremento de grieta. En las iteraciones del algoritmo que implementa el PMTE-SC se analizan varios avances potenciales de grietas que satisfacen el criterio tensional para una carga remota determinada σ , pero que no satisfacen el criterio energético. Algunos ejemplos de estos casos están representados

por las cruces rojas en la Fig. 2, el algoritmo no admite los correspondientes avances potenciales de grietas como aceptables, si no que aumenta la carga en el siguiente paso para que el sistema pueda almacenar más energía potencial y así llegar a satisfacer ambos criterios, tal y como se señala en la Fig. 2 como puntos verdes.

Los resultados numéricos obtenidos con el PMTE-SC son comparados con una curva analítica obtenida a partir del CCFM clásico (basado en la formulación presentada en [6]), se observa una muy buena coincidencia. El algoritmo puede predecir que la grieta crecerá inestablemente bajo un control de carga remota fija, tal y como se observa en los experimentos.

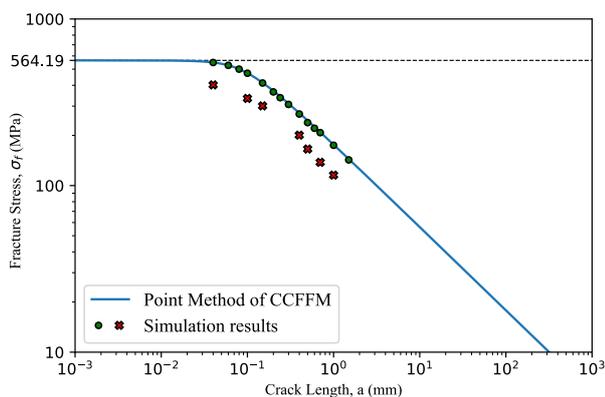


Figura 2: Comparación entre las soluciones analíticas a través del método clásico del CCFM y los resultados numéricos del nuevo método del PMTE-SC.

4. CONCLUSIONES

En este trabajo, se ha implementado un nuevo método, propuesto en [14], para caracterizar el inicio y la propagación de grietas basado en el Criterio Acoplado de la Mecánica de Fractura Finita (CCFFM), para el crecimiento de grietas en un medio homogéneo. Este nuevo método permite modelar la aparición simultánea de varias grietas en un mismo problema. El algoritmo computacional implementado permite simular un proceso de fractura en problemas planos basado en la nueva formulación del PMTE-SC, utilizando la subrutina UINTER de ABAQUS y controlada a partir de unos scripts en Python. Además, se introdujo un modelo de grieta a través de una distribución continua de muelles lineales entre las superficies de las posibles grietas, el cual permite que la minimización de la energía total se simplifique sustancialmente, ya que el funcional de energía total (a priori no convexo) se puede considerar como un funcional convexo por separado en términos de las variables de desplazamiento y de daño.

Para evaluar la fiabilidad del algoritmo se ha analizado

el problema clásico de una grieta centrada en una placa infinita sometida a tracción, desde un punto de vista numérico (con el nuevo enfoque del PMTE-SC) y analítico (con el enfoque clásico del CCFM), arrojando resultados idénticos considerando también tamaños muy pequeños de la grieta inicial. Estos resultados abren una nueva vía para estudiar problemas más complejos de iniciación y crecimiento de múltiples grietas. Sin embargo, se necesita una investigación más profunda para optimizar el algoritmo, ya que es necesaria la mejora del módulo del criterio tensional para poder ser utilizado en casos de múltiples grietas potenciales.

AGRADECIMIENTOS

Este proyecto ha recibido financiación del Programa de Investigación e Innovación Horizonte 2020 de la Unión Europea bajo el Acuerdo de Subvención Marie Skłodowska Curie No. 861061. – Proyecto NewFrac ITN. Además, también ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2021-123325OB-I00), Consejería de Economía y Conocimiento de la Junta de Andalucía (Proyecto P18-FR-1928 y Contrato US-1266016-Programa Operativo FEDER Andalucía 2014-2020), Junta de Andalucía y Fondo Social Europeo (Acciones de transferencia del conocimiento AT17-5908-USE).

REFERENCIAS

- [1] G.I. Barenblatt. The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture. *Advances in applied mechanics*, 7:55–129, 1962.
- [2] D.S. Dugdale. Yielding of steel sheets containing slits. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 8(2):100–104, 1960.
- [3] A. Needleman and V. Tvergaard. *Finite element analysis of localization in plasticity*, In: *Finite Elements: Special Problems in Solid Mechanics* (Eds. J.T. Oden and G.F. Carey), pages 94–267. Prentice-Hall, 1984.
- [4] A. Needleman. Some issues in cohesive surface modeling. *Procedia IUTAM*, 10:221–246, 2014.
- [5] G.A. Francfort and J.-J. Marigo. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46(8):1319–1342, 1998.
- [6] D. Leguillon. Strength or toughness? a criterion for crack onset at a notch. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 21(1):61–72, 2002.
- [7] D. Leguillon, E. Martin, O. Ševeček, and R. Bermejo. Application of the coupled stress-energy criterion to predict the fracture behaviour of layered ceramics designed with internal compressive stresses. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 54:94–104, 2015.

- [8] I.G. García, B.J. Carter, A.R. Ingraffea, and V. Mantič. A numerical study of transverse cracking in cross-ply laminates by 3d finite fracture mechanics. *Composites Part B: Engineering*, 95:475–487, 2016.
- [9] A. Doitrand, C. Fagiano, N. Carrere, V. Chiaruttini, and M. Hirsekorn. Damage onset modeling in woven composites based on a coupled stress and energy criterion. *Engineering Fracture Mechanics*, 169:189–200, 2017.
- [10] J. Reinoso, A. Arteiro, M. Paggi, and P.P. Camanho. Strength prediction of notched thin ply laminates using finite fracture mechanics and the phase field approach. *Composites Science and Technology*, 150:205–216, 2017.
- [11] J. Li and D. Leguillon. Finite element implementation of the coupled criterion for numerical simulations of crack initiation and propagation in brittle materials. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 93:105–115, 2018.
- [12] D. Leguillon, E. Martin, O. Ševeček, and R. Bermejo. What is the tensile strength of a ceramic to be used in numerical models for predicting crack initiation? *International Journal of Fracture*, 212:89–103, 2018.
- [13] E. Martin, D. Leguillon, O. Ševeček, and R. Bermejo. Understanding the tensile strength of ceramics in the presence of small critical flaws. *Engineering Fracture Mechanics*, 201:167–175, 2018.
- [14] V. Mantič. Prediction of initiation and growth of cracks in composites. coupled stress and energy criterion of the finite fracture mechanics (Keynote lecture). In *ECCM-16th Europ. Conf. on Composite Mater*, pages 1–16, 2014.
- [15] V. Mantič. Interface crack onset at a circular cylindrical inclusion under a remote transverse tension. application of a coupled stress and energy criterion. *International journal of Solids and Structures*, 46(6):1287–1304, 2009.
- [16] I.G. García, M. Paggi, and V. Mantič. Fiber-size effects on the onset of fiber–matrix debonding under transverse tension: A comparison between cohesive zone and finite fracture mechanics models. *Engineering Fracture Mechanics*, 115:96–110, 2014.

