



industriales
etsii

Escuela Técnica
Superior
de Ingeniería
Industrial

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería
Industrial

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE PROPAGACIÓN DE FRACTURA FRÁGIL EN SÓLIDOS A TRAVÉS DEL MÉTODO PHASE-FIELD

TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN INGENIERIA EN TECNOLOGÍAS
INDUSTRIALES

Autor: Fernando Cuello Calvo

Director: Rogelio Ortigosa Martínez

Codirector: Jesús Martínez Frutos



Universidad
Politécnica
de Cartagena

Cartagena, 15 de junio

ÍNDICE

RESUMEN	6
1. CAPÍTULO I: INTRODUCCIÓN	7
1.1. Motivación.....	7
1.2. Objetivos	8
1.3. Estructura del proyecto	8
2. CAPÍTULO II: MECÁNICA DE CONTINUO	10
2.1. Cinemática	10
2.2. Gradiente de deformaciones	11
2.3. Deformación o “Strain”	13
2.4. Campo de desplazamientos.....	15
2.5. Descomposición espectral de ε	17
3. CAPÍTULO III: LEY CONSTITUTIVA EN ELASTICIDAD LINEAL ISÓTROPA	19
3.1. Energía elástica	19
3.2. Tensor de tensiones de Cauchy	19
Ejemplo 4	21
3.3. Tensor de elasticidad	22
4. CAPÍTULO IV: MECÁNICA DE FRACTURA	23
4.1. Problema unidimensional de fractura	23
4.2. Extensión multidimensional	26
4.3. El problema de fractura acoplado.....	28
5. CAPÍTULO V: IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA	31
5.1. Formulación monolítica.....	31
5.2. Formulación staggered.....	32
6. CAPÍTULO VI: IMPLEMENTACIÓN ELEMENTOS FINITOS	34
6.1. Tipos de elementos finitos	34
6.1.1. Elementos cuadriláteros / hexaedros.....	34
6.1.2. Elementos triangulares / tetraedros	35
6.2. Discretización del problema de fractura: formulación staggered	36
7. CAPÍTULO VII: SIMULACIÓN PROBLEMA FRACTURA	40
7.1. Ejemplo 1. Cuerpo rectangular	40
7.1.1. Estudio de la influencia de la malla (O1.1)	41
7.1.2. Estudio de la influencia de los incrementos del desplazamiento impuesto (O1.2).....	44
7.2. Ejemplo 2. Cuerpo rectangular con fractura inicializada.	46
7.3. Ejemplo 3. Cuerpo cuadrangular con fractura inicializada.....	50
7.4. Aplicación a un modelo 3D.....	53
8. CONCLUSIONES	56

9. BIBLIOGRAFÍA	57
ANEXOS.....	58
ANEXO I: Código FreeFem+ para resolución ejemplo 1.....	58
ANEXO II: Código FreeFem+ para resolución de ejemplo 2.....	60
ANEXO III: Código FreeFem+ para resolución ejemplo 3.....	62
ANEXO IV: Código FreeFem+ para resolución ejemplo 4	64
ANEXO V: Código de la geometría de la biela realizada con GMSH.....	66

Tabla de Figuras

Figura 1.1 Diversos ejemplos fractura: a) fractura en la fachada de un edificio; b) fractura en el bloque motor de un motor de cuatro cilindros; c) fractura en un puente; d) fractura en el asfalto de una carretera; e) fractura en el casco de un buque de carga; f) fractura en el cúbito de un brazo humano.....	7
Figura 2.1. Configuraciones material y espacial.	10
Figura 2.2. Enfoque Euleriano y Lagrangiano	11
Figura 2.3. Vectores $d\mathbf{X}$ y $d\mathbf{x}$ del ejemplo 1	13
Figura 2.4. Vector de desplazamiento \mathbf{u}	15
Figura 3.1. Direcciones principales Tensor Cauchy ejemplo 4.....	22
Figura 4.1. Barra expandida infinitamente eje x	23
Figura 4.2. Modelo fractura unidimensional	23
Figura 4.3. Modelo regularizado fractura unidimensional	24
Figura 4.4. Extensión multidimensional fractura	26
Figura 4.5. Función de degradación $g(s)$	28
Figura 6.1. Espacio isoparamétrico funciones forma cuadriláteros y hexaedros	34
Figura 6.2. Funciones de forma cuadrangulares para elemento Q1.	34
Figura 6.3. Funciones de forma parametrizadas en coordenadas de área triangulares y tetraédricas para elemento Q1.	35
Figura 6.4. Funciones de forma triangulares	35
Figura 6.5. Coordenadas físicas y de área de un elemento triangular	37
Figura 7.1. Geometría ejemplo 1	40
Figura 7.2. Mallas de distintos grosores ejemplo 1	41
Figura 7.3. Propagación fractura Malla 1.1	42
Figura 7.4. Propagación fractura Malla 1.2	42
Figura 7.5. Propagación fractura Malla 1.3	42
Figura 7.6. Curvas de fuerza fractura con $n=200$ para cada malla	43
Figura 7.7. Tensión de Von Misses ejemplo 1	43
Figura 7.8. Tensión de Von Misses después de rotura ejemplo 1	44
Figura 7.9. Fuerza de fractura para cada número de incrementos Malla 1.1.....	44
Figura 7.10. Fuerza de fractura para cada número de incrementos Malla 1.1.....	45
Figura 7.11. Fuerza de fractura para cada número de incrementos Malla 1.1.....	45
Figura 7.12. Geometría ejemplo 2	46
Figura 7.13. Malla ejemplo 2.....	47
Figura 7.14. Propagación fractura ejemplo 2	48
Figura 7.15. Evolución Tensión de Von Misses ejemplo 2.....	48

Figura 7.16. Tensión de Von Misses después de rotura ejemplo 2	49
Figura 7.17. Curva de fuerza de reacción de fractura ejemplo 2.....	49
Figura 7.18. Geometría ejemplo 3	50
Figura 7.19. Malla ejemplo 3.....	51
Figura 7.20. Propagación fractura ejemplo 3	51
Figura 7.21. Evolución Tensión de Von Misses ejemplo 3.....	52
Figura 7.22. Tensión de Von Misses después de rotura ejemplo 3	52
Figura 7.23. Curva de fuerza de reacción fractura ejemplo 3.....	52
Figura 7.24. Biela de acero AISI 1020	53
Figura 7.25. Geometría biela ejemplo 4	53
Figura 7.26. Malla ejemplo 4.....	54
Figura 7.27. Propagación fractura ejemplo 4	55
Figura 7.28. Evolución Von Misses ejemplo 4	55

RESUMEN

La simulación numérica con el objetivo de predecir mecanismos de fallo asociados a la iniciación y propagación de fractura es de extrema importancia en el sector industrial. Los métodos numéricos actuales empleados en la mecánica de fractura se pueden clasificar en dos grupos principales: métodos discretos y métodos regularizados. En el enfoque discreto cabe destacar el método llamado *eXtended Finite Element Method* (XFEM), donde la fractura es tratada como una discontinuidad fuerte que se propaga a través de los elementos de la malla de elementos finitos. Esto se consigue con un enriquecimiento del campo de desplazamientos en dichos elementos, añadiendo grados de libertad extra y funciones de forma enriquecida que satisfacen la partición de unidad. Las principales desventajas de los métodos discretos son: **(i)** necesitan un criterio ad-hoc para la nucleación y propagación de fractura; **(ii)** la dificultad intrínseca para la simulación de patrones geométricos complejos de fractura.

En este TFG se va a emplear el método llamado *phase-field*, perteneciente al grupo de los métodos regularizados. En este método, la fractura es aproximada por un parámetro escalar llamado *phase-field*, que suaviza (regulariza) discontinuidades sobre una región pequeña. La implementación computacional de este método es considerablemente más sencilla que la del método XFEM. Además, el método *phase-field* no presenta las dos desventajas comentadas anteriormente y asociadas al XFEM.

1. CAPÍTULO I: INTRODUCCIÓN

En este primer apartado presentaremos el proyecto, comentando la importancia de la fractura dentro del ámbito industrial, la presentación de los principales objetivos del trabajo y la estructura del mismo.

1.1. Motivación

La fractura dentro del ámbito industrial siempre ha tenido una gran importancia desde que desde que se comenzaron a utilizar maquinaria y estructuras en gran escala, cuyo objetivo principal es soportar y poder transmitir una carga o una presión. La fabricación de estas estructuras y maquinarias con materiales metálicos, como es el caso de aviones, barcos, puentes, edificios, etc., ha provocado que exista un riesgo de fractura que pueda producir fallos catastróficos causando pérdidas materiales, económicas y humanas como puede ser el caso de un accidente aeronáutico, en conductos de combustibles o en reactores nucleares.

A lo largo del tiempo se ha comprobado que los criterios tradicionales para el diseño de estructuras mediante la hipótesis inicial de ausencia de defectos, para después considerar sus efectos mediante factores de seguridad, son arriesgados ya que no son métodos para nada precisos. Pueden aparecer pequeñas grietas en los cuerpos mecánicos y estructurales en su fabricación, construcción o durante su etapa de servicio, por lo que se hace primordial analizar su efecto en el comportamiento en servicio. Sin embargo, la simulación numérica de fractura es un área de investigación en constante desarrollo y en continua evolución dada la complejidad del fenómeno de fractura en sí.

Las aplicaciones más útiles para la mecánica de fractura se centran en el diseño de maquinaria y estructuras para obtener una mayor seguridad y economía en la operación, inspección y mantenimiento de los mismos. Véase algunos ejemplos de fractura en el sector industrial, construcción, etc.

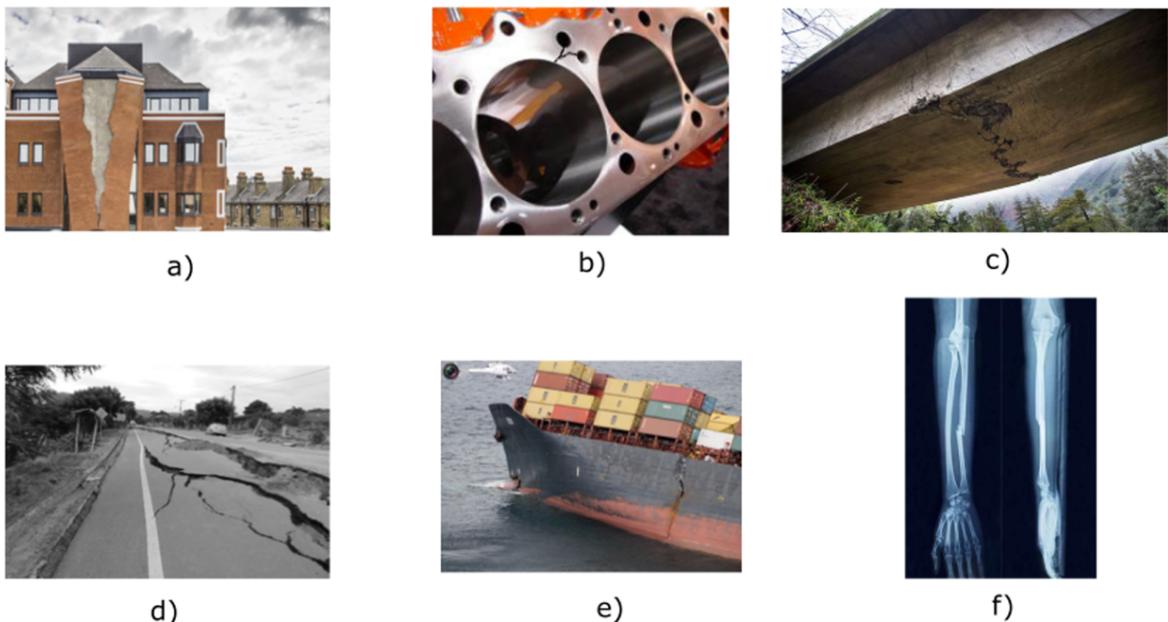


Figura 1.1 Diversos ejemplos fractura: a) fractura en la fachada de un edificio; b) fractura en el bloque motor de un motor de cuatro cilindros; c) fractura en un puente; d) fractura en el asfalto de una carretera; e) fractura en el casco de un buque de carga; f) fractura en el cúbito de un brazo humano

El problema que se va a plantear en este proyecto se va a resolver a través del método *phase-field*, que es un método regularizado para el problema de fractura. Este método nos permite obtener una expresión regularizada del parámetro *phase-field*, que suaviza discontinuidades sobre una región pequeña. La resolución de este problema hubiese sido considerablemente más compleja si hubiésemos escogido un método discreto, como es el XFEM, donde la fractura es tratada como una discontinuidad fuerte que se propaga a través de los elementos de la malla de elementos finitos.

1.2. Objetivos

A continuación, se plantearán los principales objetivos del proyecto:

- **O1.** Adquisición de conocimientos sobre cinemática y mecánica de continuo.
- **O2.** Adquisición de conocimientos sobre el método *phase-field*.
- **O3.** Adquisición de conocimientos sobre las metodologías para la resolución del sistema de ecuaciones en derivadas parciales para su implementación numérica.
- **O4.** Adquisición de conocimientos sobre la implementación de elementos finitos y familiarización de los conceptos de funciones de forma.
- **O5.** Simulación de varios ejemplos tipo de fractura y comparación cualitativa de los resultados obtenidos con los referenciados en la bibliografía.
- **O6.** Aplicación del problema de fractura a un modelo 3D.

1.3. Estructura del proyecto

Con el propósito de cumplir los objetivos descritos en la sección anterior, este Trabajo de Fin de Grado se ha estructurado de la siguiente forma:

- **Capítulo II: Mecánica de continuo.** En este capítulo se tratarán los dos enfoques principales para la mecánica de continuo (enfoque *Lagrangiano* y *Euleriano*). Se presentará el tensor gradiente de deformaciones, que permite transformar vectores infinitesimales de la configuración material a la espacial. Además se expondrá el concepto de deformación a través del tensor de deformación de Green-Lagrange.
- **Capítulo III: Ley Constitutiva en Elasticidad Lineal Isótropa.** En este capítulo se introducirá el concepto de energía de deformación en elasticidad isótropa. También se presentará el tensor de tensiones de Cauchy y el tensor de elasticidad.
- **Capítulo IV: Mecánica de fractura.** En este capítulo se tratará el fenómeno de fractura, introduciendo en primer lugar el concepto del parámetro *phase-field* y su formulación regularizada para el caso unidimensional. Después se extenderá el problema de fractura al caso multidimensional y por último presentará el problema de fractura acoplado y su resolución mediante la minimización de un funcional de energía.
- **Capítulo V: Implementación Numérica.** En este capítulo se describirán posibles metodologías para la resolución del sistema de ecuaciones en derivadas parciales de la forma débil del problema de fractura, como son la formulación *monolítica* y la formulación *staggered*.
- **Capítulo VI: Implementación Elementos Finitos.** En este capítulo se introducirán las funciones de forma para elementos triangulares, tetraédricos, cuadrangulares y hexaédricos, y la discretización del problema de fractura mediante elementos finitos.

- **Capítulo VII: Simulación problema fractura.** En este capítulo se realizarán simulaciones de varios ejemplos típicos de fractura y comprobaremos que los resultados de propagación de fractura coinciden con los descritos en la bibliografía, y para uno de los casos, analizaremos la influencia del grosor de la malla y del número de incrementos, en los resultados obtenidos. Además, también realizaremos la simulación del problema de fractura para el caso de una geometría 3D.

2. CAPÍTULO II: MECÁNICA DE CONTINUO

2.1. Cinemática

Se considera el movimiento de un continuo definido (véase Figura 2.1) por una configuración inicial de dominio, Ω_0 , cuyo contorno es $\partial\Omega_0$, y vector normal exterior al contorno N . Después del movimiento, el continuo ocupa una configuración final definida por el dominio Ω , cuyo contorno es $\partial\Omega$ y vector normal exterior al contorno n .

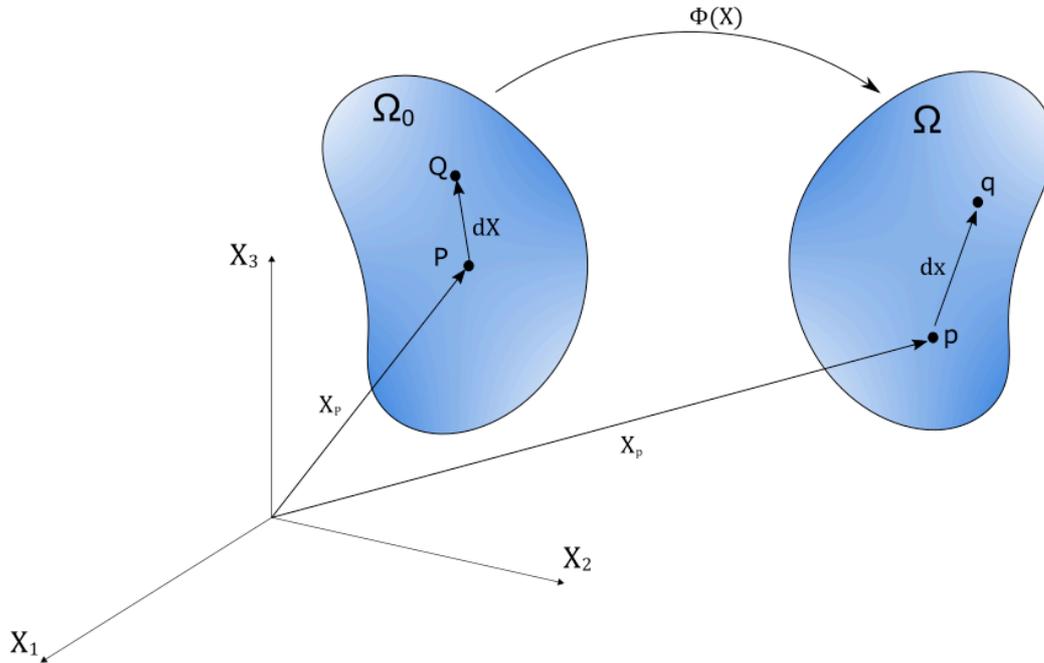


Figura 2.1. Configuraciones material y espacial.

Para describir el movimiento del continuo, introducimos el mapeo, o la función ϕ que relaciona una partícula material desde la configuración inicial, $\mathbf{X} \in \Omega_0$, a una configuración final, $\mathbf{x} \in \Omega$, de la siguiente forma:

$$\mathbf{x} = \phi(\mathbf{X}) \quad (2.1)$$

En la práctica, en elasticidad lineal se considera que las configuraciones Ω_0 y Ω están muy próximas, y por lo tanto no se hace distinción entre ellas, ni entre los vectores normales N y n .

Para estudiar el comportamiento de un continuo, es posible utilizar dos enfoques completamente distintos: *enfoque Lagrangiano* o *enfoque Euleriano*. En el primero, típico de mecánica de sólidos, se sigue el movimiento de cada partícula material $\mathbf{X} \in \Omega_0$ (véase Figura 2.2). En el segundo, más típico de mecánica de fluidos, la atención no se centra en las partículas materiales, si no en el paso del fluido a través de un recinto fijo, comúnmente denotado como *volumen de control*. Es decir, el interés se centra en estudiar una cantidad de interés (velocidad, temperatura, etc.) en cada punto (fijo) del volumen de control para un instante de tiempo determinado [5] (véase Figura 2.2).

En este trabajo, por tanto, se adopta un *enfoque Lagrangiano* como es típico de mecánica de sólidos.

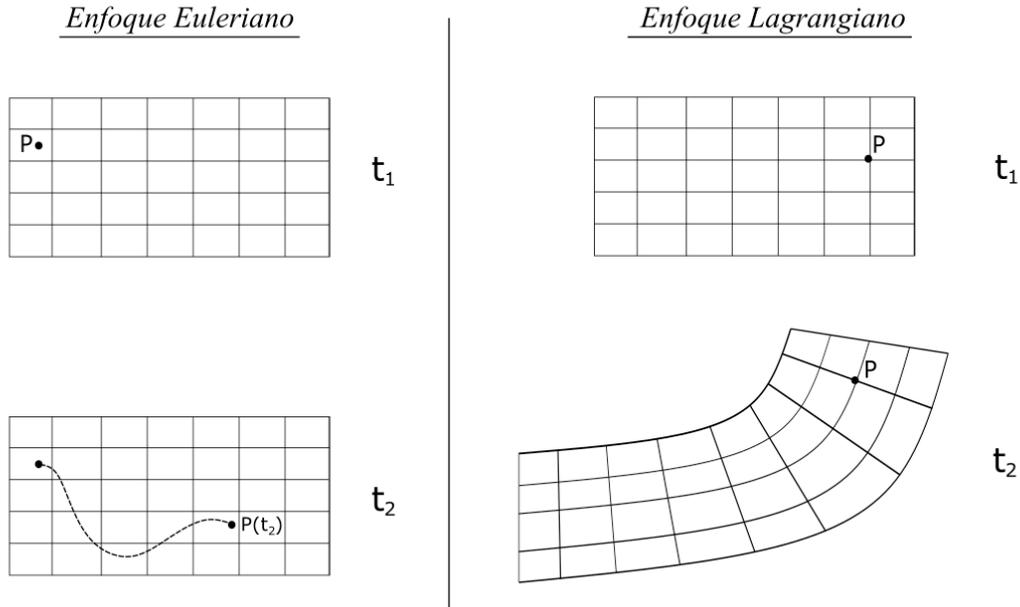


Figura 2.2. Enfoque Euleriano y Lagrangiano

2.2. Gradiente de deformaciones

Considérese dos partículas materiales P y Q en la configuración material Ω_0 . El vector que une ambas partículas $d\mathbf{X}$ es:

$$d\mathbf{X} = \mathbf{X}_P - \mathbf{X}_Q \quad (2.2)$$

Después del movimiento, ambas partículas se encuentran en la configuración espacial Ω . En dicha configuración denotamos a ambas partículas como p y q . El vector que une ambas partículas en la configuración deformada, es decir $d\mathbf{x}$ es:

$$d\mathbf{x} = \mathbf{x}_p - \mathbf{x}_q \quad (2.3)$$

Introduciendo la función *mapping* en ecuación 2.1 a la expresión anterior obtenemos,

$$d\mathbf{x} = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{X}_Q) - \boldsymbol{\phi}(\mathbf{X}_P) = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{X}_P + d\mathbf{X}) - \boldsymbol{\phi}(\mathbf{X}_P) \quad (2.4)$$

La posición de la partícula \mathbf{X}_Q puede expresarse utilizando un desarrollo de Taylor de primer orden, tal como:

$$\boldsymbol{\phi}_Q = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{X}_P + d\mathbf{X}) = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{X}_P) + \frac{\partial \boldsymbol{\phi}}{\partial \mathbf{X}} d\mathbf{X} + o(d\mathbf{X}^2) \quad (2.5)$$

Insertando ecuación (2.5) en ecuación (2.4) se obtiene:

$$d\mathbf{x} = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{X}_P) + \frac{\partial \boldsymbol{\phi}}{\partial \mathbf{X}} d\mathbf{X} + O(d\mathbf{X}^2) - \boldsymbol{\phi}(\mathbf{X}_P) \quad (2.6)$$

Y por tanto, el vector $d\mathbf{x}$ se puede expresar finalmente como:

$$d\mathbf{x} = \frac{\partial \boldsymbol{\phi}}{\partial \mathbf{X}} d\mathbf{X} + O(d\mathbf{X}^2) \quad (2.7)$$

En la anterior expresión podemos identificar el gradiente de deformaciones \mathbf{F} definido como:

$$\boxed{\mathbf{F} = \frac{\partial \boldsymbol{\phi}}{\partial \mathbf{X}} = \nabla_0 \boldsymbol{\phi} \quad F_{iI} = \frac{\partial \phi_i}{\partial X_I}} \quad (2.8)$$

Por lo tanto, para un $d\mathbf{X}$ infinitesimal, o en el caso de que la dependencia de $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{X})$ sea lineal, podemos escribir:

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{X} \quad (2.9)$$

Por tanto, el gradiente de deformaciones \mathbf{F} permite transformar los vectores infinitesimales $d\mathbf{X}$ del material sin deformar en los vectores $d\mathbf{x}$ de la configuración deformada.

Ejemplo 1

En este ejemplo dado una función *mapping* $\boldsymbol{\phi}$, vamos a calcular el gradiente de deformaciones \mathbf{F} . Consideramos la siguiente expresión lineal para $\boldsymbol{\phi}$:

$$\boldsymbol{\phi} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4}(18 + 4X_1 + 6X_2) \\ \frac{1}{4}(14 + 6X_2) \end{bmatrix}$$

Utilizando ecuación (2.8), el gradiente de deformaciones adopta la siguiente expresión:

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \boldsymbol{\phi}}{\partial \mathbf{X}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_1}{\partial X_1} & \frac{\partial \phi_1}{\partial X_2} \\ \frac{\partial \phi_2}{\partial X_1} & \frac{\partial \phi_2}{\partial X_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 3/2 \\ 0 & 3/2 \end{bmatrix}$$

Consideremos un vector $d\mathbf{X}$ en la configuración material tal que:

$$d\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

El valor del vector en su configuración deformada será:

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & 3/2 \\ 0 & 3/2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3/2 \end{bmatrix}$$

Vemos que el gradiente de deformaciones F actúa sobre el vector dX rotándolo y cambiando su módulo (véase Figura 2.3).

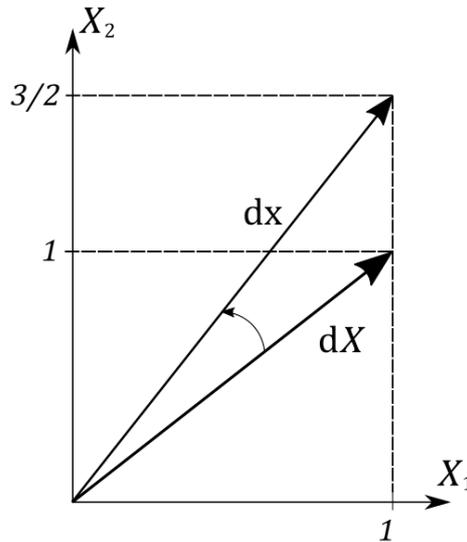


Figura 2.3. Vectores dX y dx del ejemplo 1

2.3. Deformación o “Strain”

Asociado al gradiente de deformaciones F , podemos definir un tensor simétrico llamado *Right Cauchy-Green deformation tensor*, y se define como sigue:

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} \quad (2.10)$$

Este tensor nos permite introducir una medida de deformación llamada *Green-Lagrange*, definida por la siguiente expresión:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{I}) \quad (2.11)$$

Donde \mathbf{I} es la matriz identidad. Este tensor tiene una gran relevancia desde el punto de vista físico que vamos a ilustrar con el siguiente ejemplo. Consideremos el vector dX en su configuración material y el vector dx en su configuración espacial, resultado de transformar el primero (dX) de acuerdo a la ecuación (2.8) [5]. El módulo de dichos vectores es dL y dl , respectivamente, y se calcula como sigue:

$$dx \cdot dx = dl^2 \quad dX \cdot dX = dL^2 \quad (2.12)$$

Entonces la diferencia del cuadrado de ambos módulos es:

$$\begin{aligned} dl^2 - dL^2 &= dx \cdot dx - dX \cdot dX \\ &= \mathbf{F}dX \cdot \mathbf{F}dX - dX \cdot dX \\ &= dX \cdot \mathbf{F}^T \mathbf{F}dX - dX \cdot \mathbf{I}dX \end{aligned} \quad (2.13)$$

Agrupando términos se llega a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} dl^2 - dL^2 &= d\mathbf{X} \cdot (\mathbf{C} - \mathbf{I})d\mathbf{X} \\ &= d\mathbf{X} \cdot 2\mathbf{E} \cdot d\mathbf{X} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Obteniendo el siguiente resultado:

$$\boxed{\frac{1}{2} \frac{dl^2 - dL^2}{dL^2} = \frac{d\mathbf{X} \cdot \mathbf{E}d\mathbf{X}}{dL^2}} \quad (2.15)$$

Por lo tanto, el tensor \mathbf{E} nos informa sobre *los cambios relativos en longitud de los vectores de la configuración deformada respecto a la configuración material*. Ahora consideremos los vectores en la configuración material, $d\mathbf{X}_1$ y $d\mathbf{X}_2$. Dichos vectores pueden transformarse a la configuración espacial utilizando la ecuación (2.9). Una medida de la distorsión viene dada por el cambio en la proyección en ambas configuraciones, es decir:

$$\begin{aligned} d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 - d\mathbf{X}_1 d\mathbf{X}_2 &= \mathbf{F}d\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{F}d\mathbf{X}_2 - d\mathbf{X}_1 \cdot d\mathbf{X}_2 \\ &= d\mathbf{X}_1 \cdot \mathbf{F}^T \mathbf{F}d\mathbf{X}_2 - d\mathbf{X}_1 \cdot d\mathbf{X}_2 \\ &= d\mathbf{X}_1 \cdot (\mathbf{C} - \mathbf{I})d\mathbf{X}_2 \\ &= d\mathbf{X}_1 \cdot 2\mathbf{E}d\mathbf{X}_2 \end{aligned} \quad (2.16)$$

Por lo tanto, el tensor \mathbf{E} no solo nos informa de cambios en las longitudes relativas entre ambas configuraciones, sino que también los cambios entre las proyecciones de los vectores, es decir, *su distorsión*.

Ejemplo 2

A partir de los resultados obtenidos en el ejemplo 1, calcularemos el tensor \mathbf{E} . Utilizando ecuación (2.9) se puede definir \mathbf{C} como:

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & 3/2 \\ 0 & 3/2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 & 3/2 \\ 0 & 3/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 3/2 \\ 3/2 & 9/2 \end{bmatrix}$$

Una vez hallado el tensor \mathbf{C} , podemos calcular el tensor \mathbf{E} utilizando ecuación (2.11):

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I}) = \begin{bmatrix} 0 & 3/4 \\ 3/4 & 7/4 \end{bmatrix}$$

Consideremos un vector $d\mathbf{x}$ en la configuración material tal que:

$$d\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Podemos calcular el cambio relativo de longitud con ecuación (2.13):

$$dl^2 - dL^2 = 2 d\mathbf{X} \cdot \mathbf{E}d\mathbf{X} = 2 \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 3/4 \\ 3/4 & 7/4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{7}{2}$$

Asimismo, los cambios entre las proyecciones de los vectores vienen dadas por la ecuación (2.16).

2.4. Campo de desplazamientos

Dada la configuración material $\mathbf{X} \in \Omega_0$ y su deformada $\mathbf{x} \in \Omega$, el vector de desplazamiento \mathbf{u} viene dado por:

$$\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X} \quad (2.17)$$

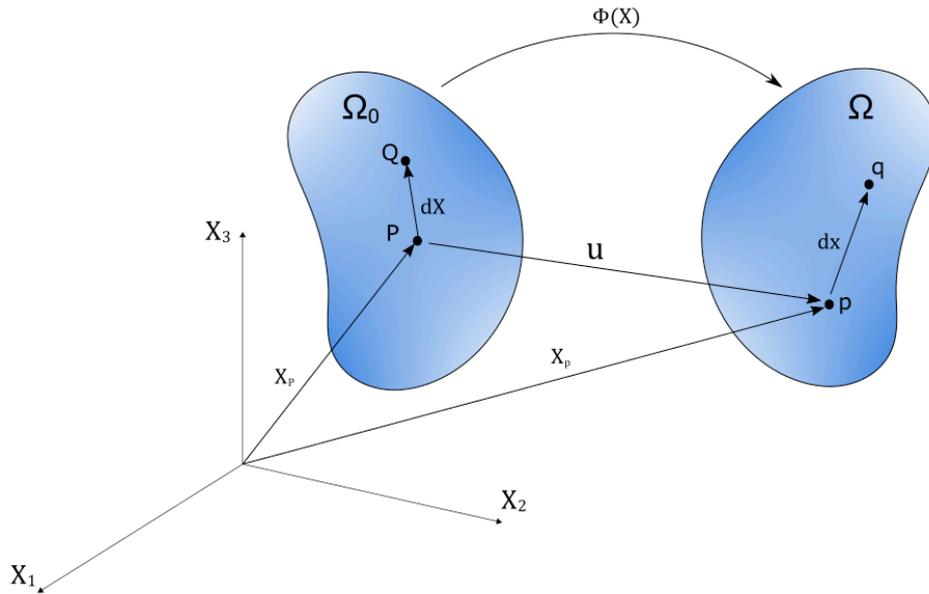


Figura 2.4. Vector de desplazamiento \mathbf{u}

Podemos definir el gradiente del vector desplazamiento como:

$$\nabla_0 \mathbf{u} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} (\mathbf{x} - \mathbf{X}) = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} - \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{X}} \quad (2.18)$$

Y por tanto, finalmente se obtiene:

$$\boxed{\nabla_0 \mathbf{u} = \mathbf{F} - \mathbf{I}} \quad (2.19)$$

Por lo que el vector de desplazamientos está relacionado con el tensor de gradiente de deformaciones \mathbf{F} . Esto nos permite expresar el tensor \mathbf{E} , haciendo uso de la ecuación (2.11) y la ecuación (2.19), en función del gradiente de \mathbf{u} , como sigue:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{I}) = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}) \\ &= \frac{1}{2} ((\mathbf{I} + \nabla_0 \mathbf{u})^T (\mathbf{I} + \nabla_0 \mathbf{u}) - \mathbf{I}) \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{I} + \nabla_0 \mathbf{u}^T + \nabla_0 \mathbf{u} + \nabla_0 \mathbf{u}^T \nabla_0 \mathbf{u} - \mathbf{I}) \end{aligned} \quad (2.20)$$

Finalmente se obtiene:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\nabla_0 \mathbf{u}^T + \nabla_0 \mathbf{u}) + \frac{1}{2} \nabla_0 \mathbf{u}^T \nabla_0 \mathbf{u} \quad (2.21)$$

En elasticidad lineal, despreciamos los términos no lineales, por lo que el tensor anterior recibe el nombre de tensor pequeñas deformaciones o *small strain tensor*, y se expresa finalmente como:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\nabla_0 \mathbf{u}^T + \nabla_0 \mathbf{u}) \quad (2.22)$$

Además, dada la proximidad entre las configuraciones material y espacial, podemos expresar $\boldsymbol{\varepsilon}$ en función del gradiente espacial de los desplazamientos, es decir:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u}^T + \nabla \mathbf{u}) \quad (2.23)$$

Por último, haciendo uso de la ecuación (2.18) puede obtenerse una expresión de $\boldsymbol{\varepsilon}$ en función de \mathbf{F} tal y como sigue:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} &= \frac{1}{2}((\mathbf{F} - \mathbf{I})^T + (\mathbf{F} - \mathbf{I})) \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{F} + \mathbf{F}^T) - \mathbf{I} \end{aligned} \quad (2.24)$$

Ejemplo 3

Consideremos los resultados obtenidos en los ejemplos 1 y 2. Recordemos que las expresiones para el gradiente de deformaciones \mathbf{F} y el *Green Lagrange Strain* tensor \mathbf{E} son:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & 3/2 \\ 0 & 3/2 \end{bmatrix} \quad \mathbf{E} = \begin{bmatrix} 0 & 3/4 \\ 3/4 & 7/4 \end{bmatrix}$$

Utilizando ecuación (2.24), se obtiene $\boldsymbol{\varepsilon}$ como sigue:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\mathbf{F} + \mathbf{F}^T) - \mathbf{I} = \frac{1}{2} \left(\begin{bmatrix} 1 & 3/2 \\ 0 & 3/2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 3/2 \\ 0 & 3/2 \end{bmatrix}^T - \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 0 & 3/4 \\ 3/4 & 1/2 \end{bmatrix}$$

Dado que $\boldsymbol{\varepsilon}$ es una aproximación del tensor \mathbf{E} vamos a proceder a comparar ambos y comparar el error relativo α de dicha aproximación para el término a_{22} de ambos tensores.

$$\alpha = \frac{\left| \frac{1}{2} - \frac{7}{4} \right|}{\frac{7}{4}} 100 = 71.43\%$$

Como podemos observar, obtenemos un error bastante alto. Esto se debe a que los desplazamientos asociados a la función *mapping* eran demasiado grandes. Consideremos una función ϕ que se ajuste más a la hipótesis de elasticidad lineal, definida por:

$$\boldsymbol{\phi} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4}(18 + 4X_1 + 10^{-3}X_2) \\ \frac{1}{4}(14 + 4.04X_2) \end{bmatrix}$$

Aplicando ecuación (2.8), obtenemos \mathbf{F} como sigue:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{10^{-3}}{4} \\ 0 & 1.01 \end{bmatrix}$$

Utilizando ecuación (2.10)

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & 2.5 \cdot 10^{-4} \\ 2.5 \cdot 10^{-4} & 1.02 \end{bmatrix}$$

Finalmente, aplicando ecuación (2.11) y (2.24) obtenemos \mathbf{E} y $\boldsymbol{\varepsilon}$ como sigue:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I}) = \begin{bmatrix} 0 & 1.25 \cdot 10^{-4} \\ 1.25 \cdot 10^{-4} & 1.005 \cdot 10^{-2} \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\mathbf{F} + \mathbf{F}^T) - \mathbf{I} = \begin{bmatrix} 0 & 1.25 \cdot 10^{-4} \\ 1.25 \cdot 10^{-4} & 1 \cdot 10^{-2} \end{bmatrix}$$

A continuación, procedemos a comparar el error relativo α en el término a_{22} de ambas matrices:

$$\alpha = \frac{|1 \cdot 10^{-2} - 1.005 \cdot 10^{-2}|}{1.005 \cdot 10^{-2}} 100 = 0.497\%$$

Por lo tanto, se puede ver que el *small strain tensor* $\boldsymbol{\varepsilon}$ es una buena aproximación del tensor *Green Langrange Strain Tensor* \mathbf{E} en el contexto de pequeñas deformaciones.

2.5. Descomposición espectral de $\boldsymbol{\varepsilon}$

Dado el tensor $\boldsymbol{\varepsilon}$ definido en ecuación (2.22) es posible obtener información útil de sus autovalores y direcciones principales. Antes de calcularlos, realizaríamos el siguiente desarrollo. En primer lugar, es fácil ver que $\boldsymbol{\varepsilon}$ es simétrico:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}^T &= \left(\frac{1}{2}(\nabla_0 \mathbf{u} + \nabla_0 \mathbf{u}^T) \right)^T \\ &= \frac{1}{2}(\nabla_0 \mathbf{u}^T + (\nabla_0 \mathbf{u}^T)^T) \\ &= \frac{1}{2}(\nabla_0 \mathbf{u}^T + \nabla_0 \mathbf{u}) \end{aligned} \quad (2.25)$$

Como la traspuesta del tensor de pequeñas deformaciones coincide con él mismo, podemos decir que $\boldsymbol{\varepsilon}$ es un tensor simétrico. Por lo tanto, al ser $\boldsymbol{\varepsilon}$ un tensor simétrico, admite una descomposición espectral de la siguiente forma:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{\alpha=1}^n \varepsilon_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \otimes \mathbf{n}_{\alpha} \quad (\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})_{ij} = a_i b_j \quad (2.26)$$

Donde ε_{α} representa los valores propios de $\boldsymbol{\varepsilon}$, y \mathbf{n}_{α} representa sus vectores propios, siendo \mathbf{n}_{α} unitarios y ortogonales entre ellos. Para el caso del ejemplo 3, recordemos la expresión de $\boldsymbol{\varepsilon}$:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} 0 & 1.25 \cdot 10^{-4} \\ 2.5 \cdot 10^{-4} & 1 \cdot 10^{-2} \end{bmatrix}$$

Los valores propios de ε son,

$$\varepsilon_1 = -1.56 \times 10^{-6} \quad \varepsilon_2 = 1.000156 \times 10^{-2}$$

Y los vectores propios,

$$\mathbf{n}_1 = \begin{bmatrix} -0.9921 \\ 0.0125 \end{bmatrix} \quad \mathbf{n}_2 = \begin{bmatrix} 0.0125 \\ 0.99992 \end{bmatrix}$$

Puede observarse que se obtiene un autovalor positivo y otro negativo, esto quiere decir que en la dirección principal 1 tenemos un cambio de longitud relativo positivo y para la dirección principal 2 un cambio negativo.

3. CAPÍTULO III: LEY CONSTITUTIVA EN ELASTICIDAD LINEAL ISÓTROPA

3.1. Energía elástica

Definimos la energía elástica de deformación por unidad de volumen sin deformar en el caso de elasticidad lineal isótropa por unidad de volumen como,

$$\Psi = \mu \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}) + \frac{\lambda}{2} (\operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon})^2 \quad (3.1)$$

Donde μ es el módulo de cizalladura, o segundo módulo de Lamé y λ el primer módulo de Lamé. Además, $\operatorname{tr}(\cdot)$ representa el operador traza, que se obtiene sumando las componentes de la diagonal de la matriz sobre la que se aplica [5]. Es decir,

$$\operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \operatorname{tr} \left(\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} \end{pmatrix} \right) = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} \quad (3.2)$$

Los parámetros de Lamé (μ, λ) pueden ser relacionados con otros parámetros físicos como el módulo de Young E y el coeficiente de Poisson ν :

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (3.3)$$

Por lo tanto, la ecuación (3.1) puede escribirse como:

$$\Psi = \frac{E}{2(1+\nu)} \cdot \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) + \frac{E\nu}{2(1+\nu)(1-2\nu)} (\operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon})^2 \quad (3.4)$$

3.2. Tensor de tensiones de Cauchy

Entendemos por ley constitutiva como la relación entre el tensor de tensiones de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ y el tensor de pequeñas deformaciones $\boldsymbol{\varepsilon}$, es decir,

$$\boxed{\boldsymbol{\sigma} = f(\boldsymbol{\varepsilon})} \quad (3.5)$$

Esa relación viene dada por la siguiente expresión:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \quad (3.6)$$

Utilizando ecuación (3.1), Cauchy se puede obtener como:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \left(\mu \cdot \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) + \frac{\lambda}{2} (\operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon})^2 \right) \\ &= \mu \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) + \frac{\lambda}{2} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} (\operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon})^2 \\ &= \mu \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) + \lambda (\operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon}) \frac{\partial (\operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \end{aligned} \quad (3.7)$$

A continuación, se detallará el cálculo de las derivadas de los invariantes $\operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon})$ y $\operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})$.

Empecemos con el término $\frac{\partial \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}$. Este término es una matriz, y toda matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ se puede escribir como:

$$\mathbf{A} = A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad (3.8)$$

Si $n=2$, entonces $\mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ y $\mathbf{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$. Por lo tanto:

$$\mathbf{A} = \frac{\partial tr(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad A_{ij} = \frac{\partial tr(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \varepsilon_{ij}} \quad (3.9)$$

Podemos concluir por tanto que:

$$tr \mathbf{A} = A_{11} + A_{22} = A_{ij} \delta_{ij} = A_{ii} \quad (3.10)$$

Además, el producto $(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon})$ se puede escribir como:

$$(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon})_{pq} = (\varepsilon_{pm}\varepsilon_{mq}) \quad (3.11)$$

Dado que $\boldsymbol{\varepsilon}$ es simétrico, podemos escribir la ecuación anterior (3.11):

$$(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon})_{pq} = \varepsilon_{pm}\varepsilon_{qm} \quad (3.12)$$

Finalmente,

$$tr(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon})_{pq} = (\varepsilon_{pm}\varepsilon_{qm})\delta_{pq} = \varepsilon_{pm}\varepsilon_{pm} = \varepsilon_{pm}^2 \quad (3.13)$$

Por lo que,

$$\frac{\partial tr(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \varepsilon_{ij}} = \frac{\partial (\varepsilon_{pm}^2)}{\partial \varepsilon_{ij}} = 2\varepsilon_{pm} \frac{\partial \varepsilon_{pm}}{\partial \varepsilon_{ij}} = 2\varepsilon_{pm} \delta_{pi} \delta_{mj}$$

$$\boxed{\frac{\partial tr(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \varepsilon_{ij}} = 2 \varepsilon_{ij}} \quad (3.14)$$

Es decir,

$$\frac{\partial tr(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\partial tr(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \varepsilon_{ij}} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j = 2(\varepsilon_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) = 2\boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.15)$$

A continuación, resolvemos el término $\frac{\partial (tr\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}$,

$$\frac{\partial (tr\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\partial (tr\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \varepsilon_{ij}} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad (3.16)$$

Siendo,

$$\frac{\partial (tr\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \varepsilon_{ij}} = \frac{\partial (\varepsilon_{pq}\delta_{pq})}{\partial \varepsilon_{ij}} = \frac{\partial (\varepsilon_{pp})}{\partial \varepsilon_{ij}} = \delta_{pi}\delta_{pj} = \delta_{ij} \quad (3.17)$$

Por lo tanto,

$$\frac{\partial (tr\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \delta_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j = \mathbf{I} \quad (3.18)$$

Una vez resueltos ambos términos, podemos establecer la ley constitutiva que relaciona el tensor de tensiones de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ y el tensor de pequeñas deformaciones $\boldsymbol{\varepsilon}$:

$$\boxed{\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\boldsymbol{\varepsilon} + \lambda(tr\boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{I}} \quad (3.19)$$

Ejemplo 4

Consideremos el resultado obtenido en el ejemplo 3. Recordemos que el tensor $\boldsymbol{\varepsilon}$ es:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} 0 & 1.25 \cdot 10^{-4} \\ 1.25 \cdot 10^{-4} & 10^{-2} \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

La traza de dicho tensor es:

$$\text{tr } \boldsymbol{\varepsilon} = 0 + 10^{-2} = 10^{-2} \quad (3.21)$$

Entonces,

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu \begin{bmatrix} 0 & 1.25 \cdot 10^{-4} \\ 1.25 \cdot 10^{-4} & 10^{-2} \end{bmatrix} + 10^{-2} \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.22)$$

Es decir:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} 10^{-2}\lambda & 2.5 \cdot 10^{-4}\mu \\ 2.5 \cdot 10^{-4}\mu & 2 \cdot 10^{-2}\mu + 10^{-2}\lambda \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

Para el caso de acero, su módulo de elasticidad y coeficiente de Poisson son:

$$E \approx 200 \text{ GPa} = 200 \times 10^9 \text{ Pa} \quad \nu = 0.3 \quad (3.24)$$

Por lo tanto, utilizando la ecuación (3.3) podemos calcular los coeficientes de Lamé a partir de estos valores:

$$\mu = 76.9 \text{ GPa} \quad \lambda = 115.4 \text{ GPa} \quad (3.25)$$

Sustituyendo en el tensor de tensiones de Cauchy anterior se obtiene:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} 1.154 & 0.0192 \\ 0.0192 & 2.692 \end{bmatrix} \quad (3.26)$$

Podríamos calcular también sus direcciones principales, resolviendo:

$$(\boldsymbol{\sigma} - \lambda \mathbf{I}) \mathbf{n} = \mathbf{0}$$

Y obteniendo como autovalores:

$$\sigma_1 = 2.692 \text{ GPa} \quad \sigma_2 = 1.153 \text{ GPa} \quad (3.27)$$

Y sus vectores principales:

$$\mathbf{n}_1 = \begin{bmatrix} -0.999 \\ 1.249 \cdot 10^{-2} \end{bmatrix} \quad \mathbf{n}_2 = \begin{bmatrix} 1.249 \cdot 10^{-2} \\ 0.999 \end{bmatrix} \quad (3.28)$$

Como cabría esperar, para el caso de un material isótropo como el que estamos considerando, las direcciones principales de tensión coinciden con las direcciones (ecuación (3.28)) principales de deformación obtenidas en el ejemplo 3. Asimismo, se

observa que la dirección principal 1 obtenemos una compresión, y en la 2 una tracción. Esto es consistente con los signos de los valores principales de ε (ecuación (3.27)).

Si representamos los vectores,

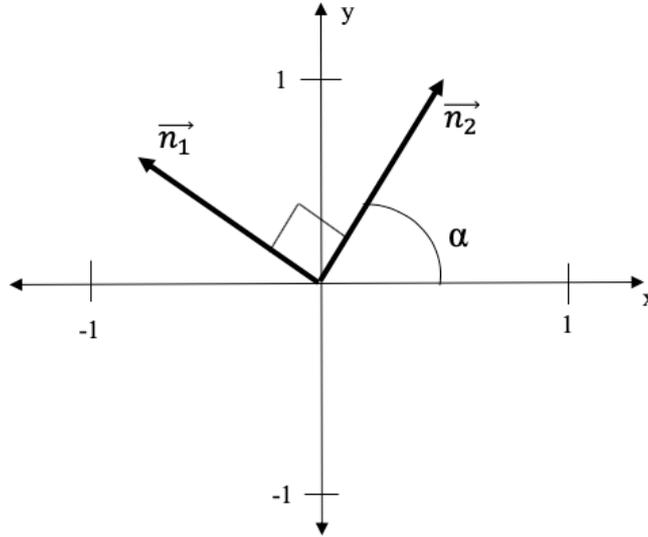


Figura 3.1. Direcciones principales Tensor Cauchy ejemplo 4

Para calcular el ángulo α ,

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_2 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= 0.5847 = |\mathbf{n}_2| \left| \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right| \cos\alpha \\ \alpha &= \arccos(0.5847) = 0.9463 \text{ rad} = 54.21^\circ \end{aligned} \quad (3.29)$$

3.3. Tensor de elasticidad

Un tensor de gran relevancia física que encapsula las propiedades materiales de un material es el llamado tensor de elasticidad \mathcal{C} . La expresión de dicho tensor es:

$$\mathcal{C} = \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon} \quad (3.30)$$

Es decir, \mathcal{C} , es un tensor de orden cuatro [5]. Utilizando la expresión de Cauchy para el caso de elasticidad lineal isótropa en ecuación (3.19) insertándola en la anterior ecuación obtenemos la clásica expresión para el tensor \mathcal{C} , como sigue:

$$\boxed{\mathcal{C} = 2\mu \mathfrak{T}^{sym} + \lambda \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \quad \mathfrak{T}^{sym} = \frac{1}{2}(\mathfrak{T} + \mathfrak{T}^T)} \quad (3.31)$$

Donde:

$$\mathfrak{T}_{ijkl} = \delta_{ik}\delta_{jl} \quad \mathfrak{T}_{ijkl}^T = \delta_{il}\delta_{ju} \quad (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})_{ijkl} = \delta_{ij}\delta_{ul} \quad (3.32)$$

4. CAPÍTULO IV: MECÁNICA DE FRACTURA

Para el estudio de la propagación de la fractura en este proyecto, vamos a realizar la aproximación de la fractura mediante el método *phase-field*. Para explicar esta formulación, inicialmente desarrollaremos el modelo unidimensional.

4.1. Problema unidimensional de fractura

Consideramos una barra Ω extendida infinitamente en la dirección del eje x (véase figura 4.1), a la que se le somete una fuerza suficiente para fracturar con un área de fractura Γ .

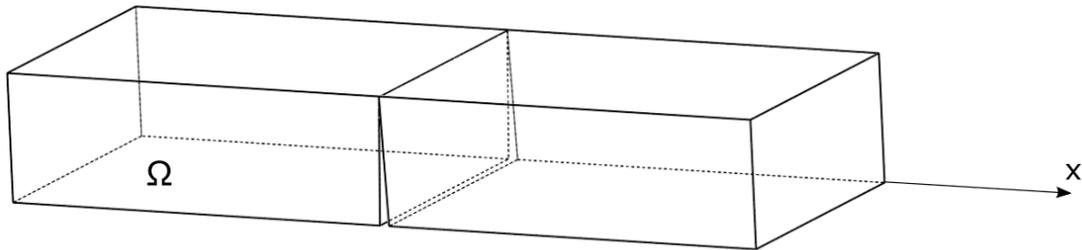


Figura 4.1. Barra extendida infinitamente eje x

Asumiendo que la barra rompe en la posición $x=0$, podemos definir un parámetro s que nos indique si el material está fracturado o no. El parámetro s viene definido de la siguiente forma:

$$s(x) = \begin{cases} 1 & x = 0 \\ 0 & x \neq 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

De forma que, si s adquiere el valor 1, diremos que el material está fracturado y si adquiere el valor de 0, el material no estará fracturado. Podemos representar este parámetro gráficamente como sigue:

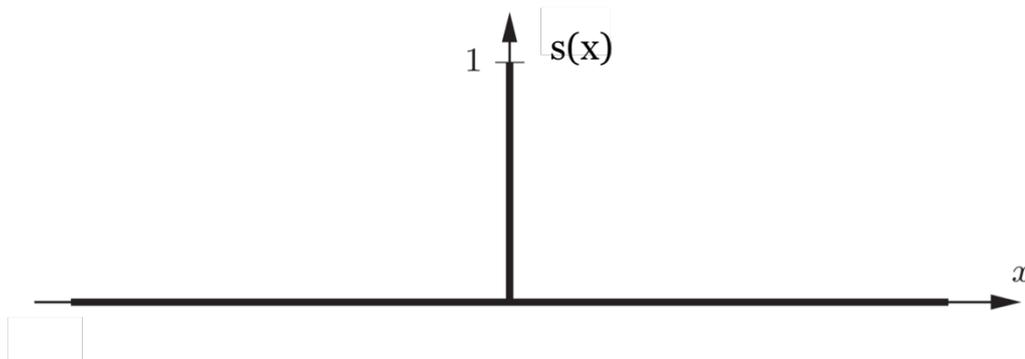


Figura 4.2. Modelo fractura unidimensional

Nótese que en la ecuación (4.1) y en la figura 4.2 el parámetro s no es derivable. En el método de *phase-field* [1] se propone una regularización del parámetro s dada con la siguiente expresión:

$$s(x) = e^{-\frac{|x|}{l}} \quad (4.2)$$

En esta expresión regularizada (4.2) se introduce un nuevo parámetro de escala l (véase figura 4.3).

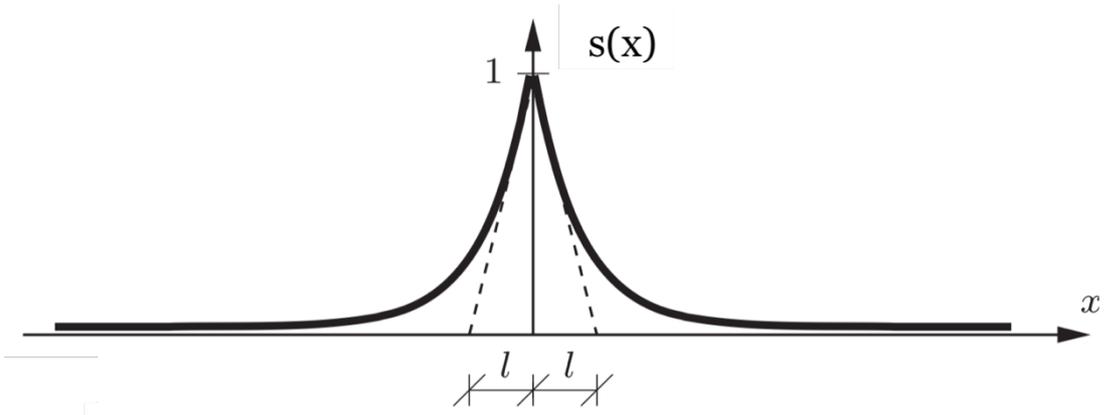


Figura 4.3. Modelo regularizado fractura unidimensional

Esta exponencial tiene las siguientes propiedades,

$$s(0) = 1 \quad y \quad s(\pm\infty) = 0 \quad (4.3)$$

Además de ser derivable en todo su dominio. Cuanto menor sea el parámetro de escala, mayor será la similitud entre la figura 4.2 y figura 4.3. No obstante, desde el punto de vista computacional un parámetro de escala cada vez más pequeño, supone un mayor coste.

La expresión regularizada del parámetro s en ecuación (4.2) permite la existencia de estados intermedios, entre 0 y 1, que se correspondería con un estado dañado. Es posible darse cuenta que la ecuación (4.2) es la solución de la ecuación diferencial ordinaria [1] siguiente:

$$\begin{cases} s(x) - l^2 s''(x) = 0 & \text{en } \Omega \\ s(0) = 1 \\ s(\pm\infty) = 0 \end{cases} \quad (4.4)$$

La última condición de contorno la podríamos escribir como que $s'(x)=0$ en $\partial\Omega$ (es decir, en $x=\pm\infty$). Es decir, la ODE puede escribirse como:

$$\begin{cases} s(x) - l^2 s''(x) = 0 & \text{en } \Omega \\ s(0) = 1 \\ s'(x) = 0 & \text{en } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.5)$$

En esta ecuación es el punto crítico del siguiente funcional,

$$I(s) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (s^2 + l^2 s'^2) dV \quad (4.6)$$

Para comprobarlo calculamos el punto crítico del funcional,

$$\begin{aligned} DI[\delta s] &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} 2s Ds[\delta s] + 2l^2 s' Ds'[\delta s] dV \\ &= \int_{\Omega} (s\delta s + l^2 s' \delta s') dV = 0 \end{aligned} \quad (4.7)$$

Donde $Df[\delta s]$, representa la derivada direccional de f en la dirección de δs . Es decir:

$$Df[\delta s] = \left. \frac{d}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} f(s + \varepsilon \delta s) \quad (4.8)$$

El producto $s' \delta s$ mostrado en la última ecuación, puede reescribirse como:

$$s' \delta s = \frac{ds}{dx} \frac{d\delta s}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\frac{ds}{dx} \delta s \right) - \frac{d^2 s}{dx^2} \delta s \quad (4.9)$$

Introduciendo este término en el funcional en ecuación (4.6):

$$DI[\delta s] = \int_{\Omega} s \delta s \, dV + \int_{\Omega} l^2 \frac{d}{dx} \left(\frac{ds}{dx} \delta s \right) \, dV - \int_{\Omega} l^2 \frac{d^2 s}{dx^2} \delta s \, dV = 0 \quad (4.10)$$

Aplicamos el teorema de la divergencia de Gauss en la anterior ecuación (4.10) obtenemos:

$$DI[\delta s] = \int_{\Omega} s \delta s \, dV + \int_{\partial\Omega} l^2 \frac{ds}{dx} \delta s \, da - \int_{\Omega} l^2 \frac{d^2 s}{dx^2} \delta s \, dV = 0 \quad (4.11)$$

El segundo término de la derecha se anula (véase condición de contorno ecuación (4.5) de forma que ecuación (4.11) se escribe como:

$$\begin{aligned} DI[\delta s] &= \int_{\Omega} s \delta s \, dV - \int_{\Omega} l^2 \left(\frac{d^2 s}{dx^2} \right) \delta s \, dV = 0 \\ &= \int_{\Omega} (s - l^2 s'') \delta s \, dV = 0 \end{aligned} \quad (4.12)$$

Por lo tanto, el punto crítico de este funcional I en ecuación (4.6) coincide con la EDO en ecuación (4.5), y por ello podemos plantear la fractura como un problema de minimización de la energía. Además, podemos ver que el funcional $I(s)$ tiene sentido físico. Si sustituimos la ecuación $s(x) = e^{-\frac{x}{l}}$ en $I(s)$ obtenemos:

$$\begin{aligned} I\left(s = e^{-\frac{x}{l}}\right) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} (s^2 + l^2 s'^2) \, dV \\ &= \frac{\Gamma}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (s^2 + l^2 s'^2) \, dx \\ &= \frac{\Gamma}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left(e^{-\frac{x}{l}} \right)^2 + \frac{l^2 \left(e^{-\frac{x}{l}} \right)^2}{l^2} \right) \, dx \\ &= \Gamma \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{-\frac{x}{l}} \right)^2 \, dx = \Gamma \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2x}{l}} \, dx \\ &= 2\Gamma \int_0^{\infty} e^{-\frac{2x}{l}} \, dx \\ &= 2\Gamma \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{-\frac{2x}{l}} \, dx \end{aligned} \quad (4.13)$$

Siendo,

$$\int e^{-\frac{2x}{l}} dx = -\frac{l}{2} e^{-\frac{2x}{l}} \quad (4.14)$$

Por lo tanto,

$$I(s = e^{-\frac{x}{l}}) = 2\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right) \lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{\infty} - 1\right) = \Gamma l \quad (4.15)$$

Crucialmente, podemos observar que $I(s = e^{-\frac{x}{l}})$ está relacionado con el área de fractura Γ . De hecho, podemos introducir el funcional $\Gamma_s(s)$, definido como:

$$\Gamma(s) = \frac{I(s)}{l} = \frac{1}{2l} \int_{\Omega} (s^2 + l^2 s'^2) dV \quad (4.16)$$

Evidentemente, para $s = e^{-\frac{x}{l}}$ se tiene que,

$$\Gamma_s(s = e^{-\frac{x}{l}}) = \Gamma \quad (4.17)$$

Es decir, el nuevo funcional Γ_s evaluado en $s = e^{-\frac{x}{l}}$, coincide con el área de fractura.

4.2. Extensión multidimensional

Ahora procedemos a extender la formulación explicada anteriormente en el caso unidimensional, al caso multidimensional (véase figura 4.4).

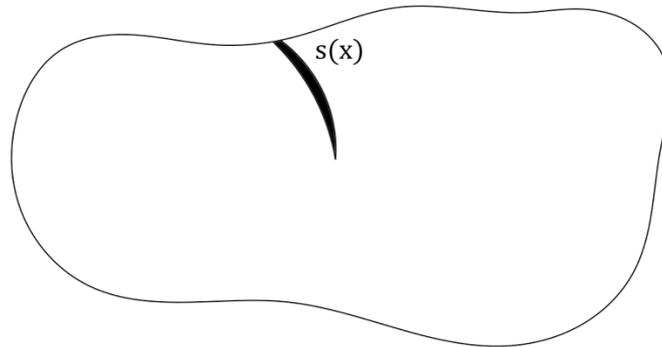


Figura 4.4. Extensión multidimensional fractura

La extensión del funcional Γ_s en ecuación (4.16) al caso multidimensional es:

$$\Gamma_s(s) = \frac{1}{2l} \int_{\Omega} s^2 + l^2 \nabla s \cdot \nabla s dV \quad (4.18)$$

Donde ∇s se define como el gradiente de s , es decir:

$$\nabla s = \left(\frac{\partial s}{\partial x}, \frac{\partial s}{\partial y}, \frac{\partial s}{\partial z} \right) \quad (3D) \quad (4.19)$$

$$\nabla s = \left(\frac{\partial s}{\partial x}, \frac{\partial s}{\partial y} \right) \quad (2D) \quad (4.20)$$

Al igual que hemos hecho para el caso de fractura unidimensional, podríamos calcular el punto crítico del funcional $\Gamma_s(s)$,

$$\begin{aligned}
 D\Gamma_s(s)[\delta s] &= \frac{1}{2l} \int_{\Omega} D(s^2 + l^2 \nabla s \cdot \nabla s) (\delta s) dV \\
 &= \frac{1}{2l} \int_{\Omega} (2s \delta s + 2l^2 \nabla s \cdot \nabla \delta s) dV \\
 &= \frac{1}{l} \int_{\Omega} s \delta s + l^2 (\nabla s \cdot \nabla \delta s) dV
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

Donde $\nabla s \cdot \nabla \delta s$ se puede expresar como:

$$\nabla s \cdot \nabla \delta s = \frac{\partial s}{\partial x_i} \frac{\partial \delta s}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial s}{\partial x_i} \delta s \right) - \frac{\partial^2 s}{\partial x_i^2} \delta s \tag{4.22}$$

Por lo tanto,

$$\int_{\Omega} l^2 \nabla s \cdot \nabla \delta s dV = \int_{\Omega} l^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial s}{\partial x_i} \delta s \right) dV - \int_{\Omega} l^2 \frac{\partial^2 s}{\partial x_i^2} \delta s dV \tag{4.23}$$

Aplicando el teorema de divergencia de Gauss,

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} l^2 \nabla s \cdot \nabla \delta s dV &= \int_{\partial\Omega} l^2 \frac{\partial s}{\partial x_i} \delta s n_i dA - \int_{\Omega} l^2 \frac{\partial^2 s}{\partial x_i^2} \delta s dV \\
 &= \int_{\partial\Omega} l^2 (\nabla s \cdot \vec{n}) \delta s dA - \int_{\Omega} l^2 \Delta s \delta s dV
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

Es decir,

$$\begin{aligned}
 D\Gamma_s(s)|\delta s| &= \frac{1}{l} \int_{\Omega} s \delta s dV + \frac{1}{l} \int_{\partial\Omega} l^2 (\nabla s \cdot \vec{n}) \delta s dA - \frac{1}{l} \int_{\Omega} l^2 \Delta s \delta s dV \\
 &= \frac{1}{l} \int_{\Omega} (s - l^2 \Delta s) \delta s dV - l \int_{\partial\Omega} \nabla s \cdot \vec{n} \delta s dA
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

Por lo tanto, la ecuación en derivadas parciales (forma fuerte) que gobierna la fractura en el caso multidimensional es:

$$\boxed{
 \begin{cases}
 s - l^2 \Delta s = 0 & \text{en } \Omega \\
 \nabla s \cdot \vec{n} = 0 & \text{en } \partial\Omega
 \end{cases}
 } \tag{4.26}$$

4.3. El problema de fractura acoplado

El problema que vamos a resolver en este proyecto es el problema de fractura. Este problema es el resultado de minimizar el siguiente funcional de energía [1]:

$$\Pi(x) = \int_{\Omega} \Psi(\varepsilon) dV + \int_{\Gamma(x)} G_c d\Gamma(x) \quad (4.27)$$

Siendo G_c la energía necesaria para que un material fracture, es decir, la energía de fractura, y $\Gamma(x)$ la superficie de fractura. Tenemos un funcional que aproxima la superficie de fractura, $\Gamma_s(s(x))$, por lo que para resolver el problema reemplazamos la integral de superficie por el funcional $\Gamma_s(s(x))$ de la siguiente forma,

$$\begin{aligned} \int G_c d\Gamma(x) &= G_c \int d\Gamma(x) \approx G_c \Gamma_s(s) \\ &= \frac{G_c}{2l} \int (s^2 + l^2 \nabla s \cdot \nabla s) dV \end{aligned} \quad (4.28)$$

Cuando sustituimos la fractura exacta por su versión regularizada, se introducen valores intermedios para el parámetro auxiliar s . Es decir, este parámetro puede adoptar valores comprendidos entre 0 y 1, de forma que, aunque el material no esté totalmente fracturado, sí que pueda presentar un estado dañado. Por lo tanto, al enfocar el problema de esta forma, deberemos debilitar el material que esté dañado, donde el parámetro s tome valores entre 0 y 1. Para ello penalizamos la energía elástica con una función de degradación $g(s)$ que satisfaga las siguientes condiciones:

$$g(s = 0) = 1 \quad g(s = 1) = 0 \quad g'(s = 1) = 0 \quad (4.29)$$

Una función de $g(s)$ que cumple las condiciones anteriores es la siguiente:

$$g(s) = (1 - s)^2 \quad (4.30)$$

Gráficamente podemos ver la función de degradación de la ecuación anterior:

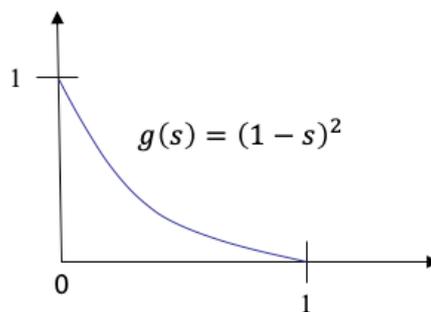


Figura 4.5. Función de degradación $g(s)$

Entonces, la energía elástica degradada es:

$$\Psi(\varepsilon, s) = (g(s) + k)\Psi_0(\varepsilon) \quad (4.31)$$

Donde k es un parámetro de un valor muy pequeño para evitar que el material tenga una rigidez nula en el caso totalmente fracturado (y por tanto problemas de condicionamiento en el sistema de ecuaciones) [3]. Además, $\Psi_0(\boldsymbol{\varepsilon})$ es la energía elástica en su estado inicial sin haber sido dañado el material, es decir (véase capítulo 3):

$$\Psi_0(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mu \operatorname{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}) + \frac{\lambda}{2} (\operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon})^2 \quad (4.32)$$

Por lo tanto, el problema de fractura se puede plantear como la minimización con respecto \mathbf{u} y s del siguiente funcional:

$$\Pi(\mathbf{u}, s) = \underbrace{\int_{\Omega} (g(s) + k)\Psi_0(\boldsymbol{\varepsilon}) dV}_{\text{Energía interna}} + \underbrace{\frac{G_c}{2l} \int_{\Omega} (s^2 + l^2 \nabla s \cdot \nabla s) dV}_{\text{Energía de fractura}} - \underbrace{\int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} dV - \int_{\partial\Omega} \mathbf{t} \cdot \mathbf{u} dA}_{\text{Energía fuerzas externas}} \quad (4.33)$$

Donde \mathbf{f} y \mathbf{t} representan fuerzas por unidad de volumen y unidad de superficie respectivamente actuando sobre el sólido. Los puntos críticos de este funcional son:

$$\begin{aligned} D\Pi(\mathbf{u}, s)[\delta\mathbf{u}] &= \int_{\Omega} (g(s) + k) \frac{\partial \Psi_0}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : D\boldsymbol{\varepsilon} |\delta\mathbf{u}| dV - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot D\mathbf{u} |\delta\mathbf{u}| dV - \int_{\partial\Omega} \mathbf{t} \cdot D\mathbf{u} |\delta\mathbf{u}| dA \\ &= \int_{\Omega} (g(s) + k) \sigma_0 : \nabla \delta\mathbf{u} dV - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta\mathbf{u} dV - \int_{\partial\Omega} \mathbf{t} \cdot \delta\mathbf{u} dA = 0 \end{aligned} \quad (4.34)$$

La expresión obtenida es el principio de los trabajos virtuales en fractura. De manera que la forma débil de la evolución del parámetro s y por lo tanto de la fractura queda:

$$D\Pi(\mathbf{u}, s)[\delta s] = \int_{\Omega} g'(s) \Psi_0(\boldsymbol{\varepsilon}) \delta s dV + \frac{G_c}{l} \int_{\Omega} (s \delta s + l^2 \nabla s \cdot \nabla \delta s) dV = 0 \quad (4.35)$$

Es decir, las dos formas débiles asociadas al problema de fractura son:

$$\boxed{\begin{aligned} D\Pi(\mathbf{u}, s)[\delta\mathbf{u}] &= \int_{\Omega} (g(s) + k) \sigma_0 : \nabla \delta\mathbf{u} dV - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta\mathbf{u} dV - \int_{\partial\Omega} \mathbf{t} \cdot \delta\mathbf{u} dA = 0 \\ D\Pi(\mathbf{u}, s)[\delta s] &= \int_{\Omega} g'(s) \Psi_0(\boldsymbol{\varepsilon}) \delta s dV + \frac{G_c}{l} \int_{\Omega} (s \delta s + l^2 \nabla s \cdot \nabla \delta s) dV = 0 \end{aligned}} \quad (4.36)$$

Aplicando integración por partes y el teorema de la divergencia en ambas formas débiles se obtienen las ecuaciones en derivadas parciales acopladas del problema de fractura:

$$\begin{aligned} \nabla_0((g(s) + k)\boldsymbol{\sigma}_0) + \mathbf{f} &= 0 & \text{en } \Omega \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{t} & \text{en } \partial\Omega_N \\ \mathbf{u} &= \mathbf{u}^* & \text{en } \partial\Omega_D \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} s - l^2\Delta s &= 0 & \text{en } \Omega \\ \nabla s \cdot \mathbf{n} &= 0 & \text{en } \Omega \end{aligned}$$

(4.37)

Donde $\partial\Omega_N$ se refiere a la parte del contorno $\partial\Omega$ donde se aplican condiciones de contorno Neumann y donde $\partial\Omega_D$ se refiere a la parte del contorno donde se aplica un desplazamiento impuesto \mathbf{u}^* (condiciones de contorno Dirichlet).

5. CAPÍTULO V: IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA

En este capítulo se describirán posibles metodologías para la resolución del sistema de ecuaciones en derivadas parciales acoplado (en realidad resolveremos sus respectivas formas débiles acopladas) descritos en ecuación (4.37) (más en concreto a sus respectivas formas débiles acopladas en ecuación (4.36) para el problema de fractura descrito en el anterior capítulo.

Tradicionalmente, la resolución de ambas formas débiles acopladas del problema de fractura se lleva a cabo a través de dos metodologías: **(a)** *formulación monolítica*; **(b)** *formulación staggered*.

5.1. Formulación monolítica

En esta formulación se resuelven la variable de desplazamiento como el *phase-field* s de manera simultánea. Este es un problema no lineal para el cual debe emplearse la técnica de *Newton-Raphson* para su resolución. En este método dado una iteración de *Newton-Raphson* $k+1$, los valores del desplazamiento y del *phase-field*, es decir, \mathbf{u}^{k+1} y s^{k+1} , se obtienen a través del siguiente proceso iterativo:

$$\begin{bmatrix} D\Pi(\mathbf{u}^k, s^k)[\delta\mathbf{u}] + D^2\Pi(\mathbf{u}^k, s^k)[\delta\mathbf{u}; \Delta\mathbf{u}^{k+1}] + D^2\Pi(\mathbf{u}^k, s^k)[\delta\mathbf{u}; \Delta s^{k+1}] \\ D\Pi(\mathbf{u}^k, s^k)[\delta s] + D^2\Pi(\mathbf{u}^k, s^k)[\delta s; \Delta\mathbf{u}^{k+1}] + D^2\Pi(\mathbf{u}^k, s^k)[\delta s; \Delta s^{k+1}] \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (5.1)$$

Donde:

$$\Delta\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^{k+1} - \mathbf{u}^k \quad \Delta s^{k+1} = s^{k+1} - s^k \quad (5.2)$$

Siendo \mathbf{u}^{k+1} y s^{k+1} las variables a determinar. En la anterior ecuación $D\Pi(\mathbf{u}^k, s^k)[\delta\mathbf{u}]$ y $D\Pi(\mathbf{u}^k, s^k)[\delta s]$ denotan que las derivadas direccionales de Π en ecuación (4.36) son evaluadas en la iteración de *Newton-Raphson* k . Los cuatro términos restantes se obtendrán a continuación:

$$\begin{aligned} D^2\Pi[\delta\mathbf{u}; \Delta\mathbf{u}] &= \int_{\Omega} (g(s) + k) D\sigma_0[\Delta\mathbf{u}]: \delta\boldsymbol{\varepsilon} \, dV \\ &= \int_{\Omega} (g(s) + k) \left(\frac{\partial\sigma_0}{\partial\boldsymbol{\varepsilon}} : \Delta\boldsymbol{\varepsilon} \right) : \delta\boldsymbol{\varepsilon} \, dV \\ &= \int_{\Omega} (g(s) + k) (\delta\boldsymbol{\varepsilon}: \mathbf{C}: \Delta\boldsymbol{\varepsilon}) \, dV \end{aligned} \quad (5.3)$$

Donde \mathbf{C} representa el tensor de elasticidad cuya expresión ha sido calculada en ecuación (3.31). Donde $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$ es:

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^{k+1} - \boldsymbol{\varepsilon}^k = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^{k+1}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^k) \quad (5.4)$$

El segundo término se calcula de la siguiente forma:

$$D^2\Pi = [\delta\mathbf{u}, \Delta s] = \int_{\Omega} g'(s) \Delta s (\sigma_0: \delta\boldsymbol{\varepsilon}) \, dV \quad (5.5)$$

Donde $\Delta s = s^{k+1} - s^k$. El tercer término se calcula de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 D^2 \Pi[\delta s; \Delta \mathbf{u}^{k+1}] &= \int_{\Omega} g'(s) D\Psi_0[\Delta \mathbf{u}] \delta s \, dV \\
 &= \int_{\Omega} g'(s) \left(\frac{\partial \Psi_0}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : \Delta \boldsymbol{\varepsilon} \right) \delta s \, dV \\
 &= \int_{\Omega} g'(s) (\boldsymbol{\sigma}_0 : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}) \delta s \, dV \quad (5.6)
 \end{aligned}$$

Y finalmente:

$$D^2 \Pi[\delta s; \Delta s] = \int_{\Omega} g''(s) \Delta s \Psi_0(\boldsymbol{\varepsilon}) \delta s \, dV + \frac{G_c}{l} \int_{\Omega} (\Delta s \delta s + l^2 \nabla s \nabla s \nabla \delta s) \, dV = 0 \quad (5.7)$$

Aunque se da descrito con más detalle en el capítulo siguiente, la discretización mediante elementos finitos de la ecuación (5.1) da lugar a un sistema de ecuaciones de la forma:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{us} \\ \mathbf{K}_{su} & \mathbf{K}_{ss} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta s \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{R}_u \\ \mathbf{R}_s \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

Donde \mathbf{K}_{uu} , \mathbf{K}_{us} , \mathbf{K}_{su} , \mathbf{K}_{ss} representan las distintas componentes de la matriz de rigidez asociadas al problema y \mathbf{R}_u y \mathbf{R}_s las distintas componentes del residuo. Es muy sabido en el campo de la simulación numérica de fractura que cuando la fractura se desarrolla, el anterior sistema de ecuaciones se vuelve mal condicionado ya que la matriz de rigidez global se hace singular (algunos autovalores son cero). Este problema puede resolverse cuando la formulación monolítica es resuelta a través de un método de *Arc-Length* y no un *Newton-Raphson*. No obstante, este método (*Arc-Length*) requiere una cierta complejidad para su implementación. Este es uno de los motivos por los que la mayor parte de los investigadores prefieren recurrir a una *formulación staggered*.

5.2. Formulación staggered

Antes de introducir esta formulación es preciso proporcionar ciertos detalles respecto al tipo de condiciones de contorno que se aplican para la simulación numérica de fractura. Por cuestiones de estabilidad son condiciones de tipo Dirichlet (imposición de desplazamientos) las que se consideran en este problema. Es decir, además de una zona del contorno donde los desplazamientos están fijos prescribiremos desplazamientos distintos de cero en otra parte del contorno. Además, los desplazamientos impuestos distintos de cero, se aplicarán de manera incremental, es decir, dado un desplazamiento dado máximo \mathbf{u}^* y escogido un número de incrementos N , el desplazamiento impuesto correspondiente al incremento de desplazamiento i (llamado \mathbf{u}_i), se calcula mediante la siguiente fórmula:

$$\mathbf{u}_i = \frac{i}{N} \mathbf{u}^* \quad (5.9)$$

Todo lo expuesto en el anterior párrafo es común para la formulación monolítica como para la *formulación staggered*. No obstante, hemos preferido exponer en esta sección puesto que esta formulación (*staggered*) es la que hemos perseguido en este trabajo. A continuación, procedemos a describir las características intrínsecas del método *staggered*.

Al contrario que la formulación monolítica, en la *formulación staggered*, para cada incremento i de desplazamiento impuesto, las formas débiles en ecuaciones (4.36) se resuelven de manera secuencial. En concreto, en primer lugar, se fija el valor del parámetro *phase-field* y se calcula en el campo de desplazamiento asociado a la forma débil puramente mecánica. A continuación, fijado el nuevo valor de desplazamiento (todavía en el incremento i) se calcula el nuevo valor del parámetro de *phase-field* s asociado a la forma débil de fractura (ecuación (4.36)). Esencialmente, esto se traduce en que cada incremento i de desplazamiento impuesto desacoplamos las dos ecuaciones en derivadas parciales. Efectivamente, esto se traduce en que cada una de las ecuaciones en derivadas parciales son lineales en cada incremento (la ecuación en derivadas parciales puramente mecánica (ecuación (4.37)) si se fija el *phase-field* s y viceversa.

A continuación, procederemos a describir cómo se obtiene la solución de cada PDE fijada en la otra variable. Empezaremos con la ecuación en derivadas parciales puramente mecánica. Para un incremento $i+1$ y fijado el parámetro de *phase-field* s_i , el valor del campo de desplazamientos u_{i+1} , se obtiene de la siguiente forma:

$$D\Pi(\mathbf{u}^i, s^i)[\delta\mathbf{u}] + D^2\Pi(\mathbf{u}^i, s^i)[\delta\mathbf{u}; \Delta\mathbf{u}^{i+1}] = 0 \quad (5.10)$$

Donde $\Delta\mathbf{u}^{i+1} = \mathbf{u}^{i+1} - \mathbf{u}^i$. Y con:

$$D^2\Pi[\delta\mathbf{u}; \Delta\mathbf{u}^{i+1}] = \int_{\Omega} (g(s)+k)(\delta\boldsymbol{\varepsilon}: \mathbf{C}:\Delta\boldsymbol{\varepsilon}) dV \quad (5.11)$$

Donde $\Delta\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^{i+1}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^i)$. Para el mismo incremento $i+1$ y fijado el campo de desplazamientos u_{i+1} , el valor del parámetro *phase-field* s_{i+1} , se obtiene de la siguiente forma:

$$D\Pi(\mathbf{u}^{i+1}, s^i)[\delta s] + D^2\Pi(\mathbf{u}^{i+1}, s^i)[\delta s; \Delta s^{i+1}] \quad (5.12)$$

Donde $\Delta s^{i+1} = s^{i+1} - s^i$. A continuación, con el objetivo de clarificar el algoritmo *staggered* se presenta el siguiente extracto de pseudocódigo:

```

real u=0; //Inicialización del campo de desplazamientos
real s=0; //inicialización del parámetro phase-field s

real ui=0; //Inicialización del desplazamiento descrito con frontera Dirichlet
real N; //Número de incrementos

for(int i=0; i<N; i++) //Loop sobre incrementos de desplazamiento descrito
{
    ul=i*u/N; //Actualización del desplazamiento impuesto

    elasticidad; //Resolución del problema mecánico (obtenemos como solución du1 y du2)
    ul=ul+du1; //Actualización del campo de desplazamientos (componente x)
    u2=u2+du2; //Actualización del campo de desplazamientos (componente y)

    fractura; //Resolución del problema de fractura (obtenemos como solución ds)
    s=s+ds; //Actualización parámetro phase-field s
}

end;

```

6. CAPÍTULO VI: IMPLEMENTACIÓN ELEMENTOS FINITOS

6.1. Tipos de elementos finitos

En esta sección describiremos brevemente nociones elementales sobre elementos finitos. En particular describiremos el elemento Q1 y P1 tanto en su versión bidimensional como tridimensional, y además mostraremos la expresión de sus funciones de forma.

6.1.1. Elementos cuadriláteros / hexaedros

En esta sección se describirá de manera breve el elemento finito Q_1 . En el caso bidimensional este elemento es bilineal y en el caso tridimensional este elemento es trilineal. Las funciones de forma de estos elementos están definidas en el espacio isoparamétrico (véase figura 6.1) para una descripción del dominio isoparamétrico asociado a ambos elementos [7].

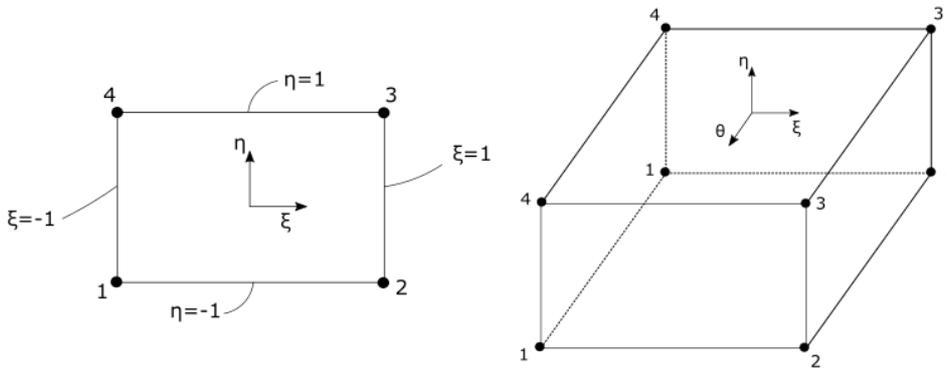


Figura 6.1. Espacio isoparamétrico funciones forma cuadriláteros y hexaedros

Las funciones de forma para el caso bidimensional adoptan la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
 N_1 &= \frac{(\xi - 1)(\eta - 1)}{4} & N_2 &= \frac{(\xi + 1)(1 - \eta)}{4} \\
 N_3 &= \frac{(\xi + 1)(\eta + 1)}{4} & N_4 &= \frac{(1 - \xi)(\eta + 1)}{4}
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

Dichas funciones de forma pueden verse representadas en la siguiente figura:

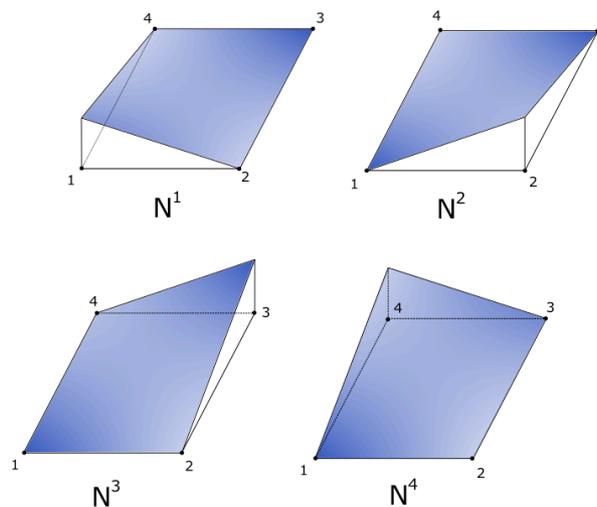


Figura 6.2. Funciones de forma cuadrangulares para elemento Q_1 .

Las funciones de forma para el caso tridimensional adoptan la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
 N_1 &= \frac{(\xi - 1)(\eta - 1)(1 - \theta)}{8} & N_2 &= \frac{(\xi + 1)(1 - \eta)(1 - \theta)}{8} \\
 N_3 &= \frac{(\xi + 1)(\eta + 1)(1 - \theta)}{8} & N_4 &= \frac{(1 - \xi)(\eta + 1)(1 - \theta)}{8} \\
 N_5 &= \frac{(\xi - 1)(\eta - 1)(1 + \theta)}{8} & N_6 &= \frac{(\xi + 1)(1 - \eta)(1 + \theta)}{8} \\
 N_7 &= \frac{(\xi + 1)(\eta + 1)(1 + \theta)}{8} & N_8 &= \frac{(1 - \xi)(\eta + 1)(1 + \theta)}{8}
 \end{aligned} \tag{6.2}$$

6.1.2. Elementos triangulares / tetraedros

En esta sección se describirá de manera breve el elemento finito P_1 . Las funciones de forma de estos elementos están parametrizadas respecto coordenadas de área [7] (véase Figura 6.2.).

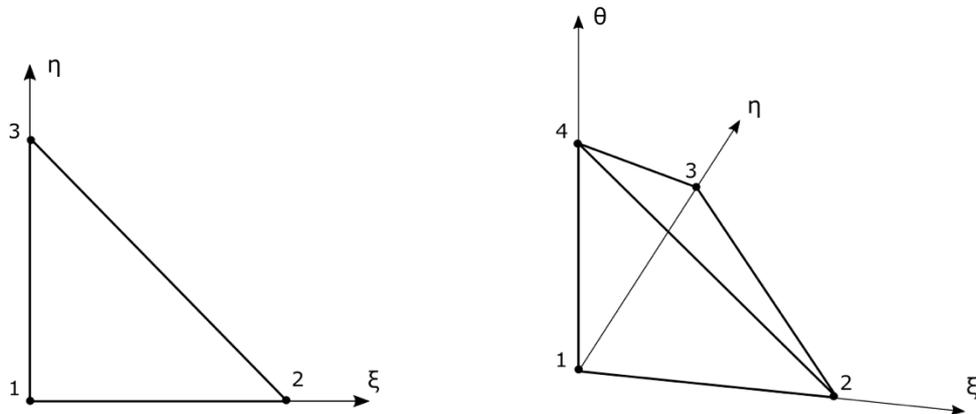


Figura 6.3. Funciones de forma parametrizadas en coordenadas de área triangulares y tetraédricas para elemento Q_1 .

Las funciones de forma para el caso bidimensional adoptan la siguiente expresión:

$$N_1 = 1 - \xi - \eta \quad N_2 = \xi \quad N_3 = \eta \tag{6.3}$$

Dichas funciones de forma pueden verse representadas en la siguiente figura:

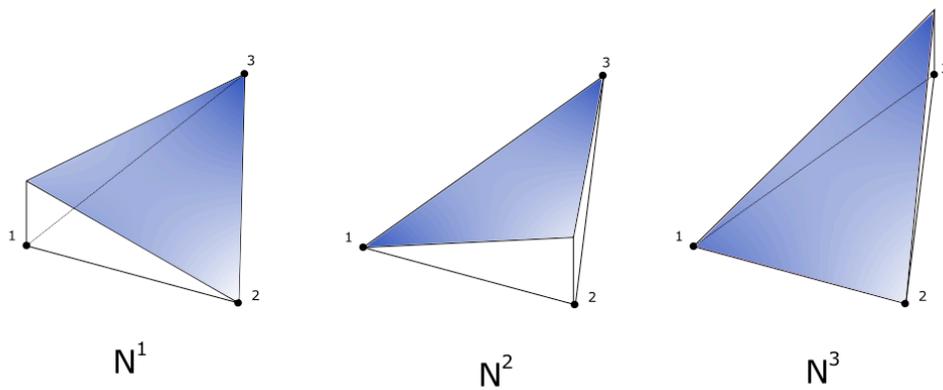


Figura 6.4. Funciones de forma triangulares

Las funciones de forma para el caso tridimensional adoptan la siguiente expresión:

$$N_1 = 1 - \xi - \eta - \theta \quad N_2 = \xi \quad N_3 = \eta \quad N_4 = \theta \quad (6.4)$$

6.2. Discretización del problema de fractura: formulación staggered

En esta sección se discretizarán las ecuaciones (5.11) y (5.12) por medio del método de los elementos finitos. Para ello, tanto los desplazamientos como el *phase-field* serán discretizados mediante el método de elementos finitos utilizando elementos P1 (triángulos / tetraedros) para problemas 2D/ 3D. Es decir, los desplazamientos y el *phase-field* dentro de un elemento cualquiera de la malla puede expresarse en función de sus valores nodales y de las funciones de forma características del elemento P1 como sigue:

$$\mathbf{u} = \sum_{a=1}^{N_n} \mathbf{u}^a N^a \quad s = \sum_{a=1}^{N_n} s^a N^a \quad (6.5)$$

Donde N_n se refiere al número de nodos del elemento P1 (3 en 2D y 4 en 3D). Además de \mathbf{u} y s es preciso obtener la expresión discretizada de sus gradientes (véase ecuaciones (5.11) y (5.12)).

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) = \sum_{a=1}^{N_n} \frac{1}{2} (\mathbf{u}^a \otimes \nabla N^a + \nabla N^a \otimes \mathbf{u}^a) \quad (6.6)$$

$$\nabla s = \sum_{a=1}^{N_n} s^a \nabla N^a \quad (6.7)$$

Donde ∇N^a representa el gradiente de la función de forma N^a asociada al nodo a , con respecto a la configuración espacial (coordenadas físicas). Nótese que las funciones de forma N^a están parametrizadas con respecto a las coordenadas del elemento (coordenadas de área para elementos triangulares / tetraedros o coordenadas isoparamétricas para elementos cuadriláteros / hexaédricos). Para obtener ∇N^a aplicamos la regla de la cadena y se llega a:

$$\nabla N^a = \frac{\partial N^a}{\partial \mathbf{x}} = \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \xi} \right)^{-T} \left(\frac{\partial N^a}{\partial \xi} \right) \quad (6.8)$$

Donde $\frac{\partial N^a}{\partial \xi}$ puede verse en ecuación (gradiente de funciones de forma). Además, el término $\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \xi}$ se calcula de manera estándar como sigue (véase cómo es posible relacionar las coordenadas físicas con las coordenadas de área en la siguiente figura 6.5):

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \xi} = \frac{\partial}{\partial \xi} (\mathbf{X}^b N^b) = \mathbf{X}^b \otimes \frac{\partial N^b}{\partial \xi} \quad (6.9)$$

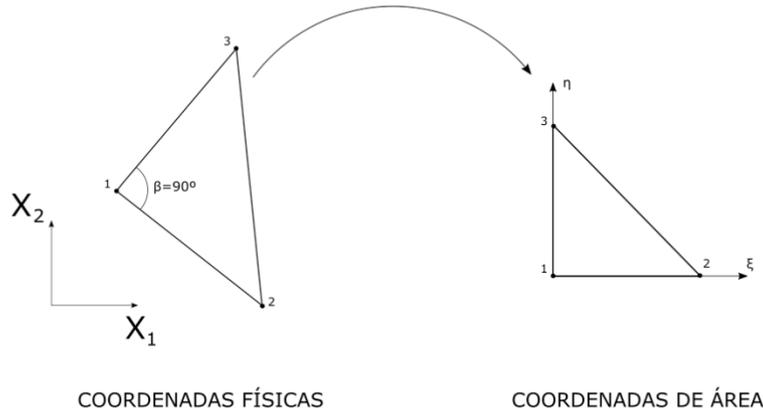


Figura 6.5. Coordenadas físicas y de área de un elemento triangular

En el método de Galerkin tanto las variables del problema (\mathbf{u} y s) como las funciones test ($\delta\mathbf{u}$ y δs) se discretizan de la misma forma, es decir:

$$\delta\mathbf{u} = \sum_{a=1}^{N_n} \delta\mathbf{u}^a N^a \quad \delta s = \sum_{a=1}^{N_n} \delta s^a N^a \quad (6.10)$$

De manera similar los gradientes de las funciones test, se obtendrían como:

$$\delta\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\nabla\delta\mathbf{u} + \nabla\delta\mathbf{u}^T) = \sum_{a=1}^{N_n} \frac{1}{2}(\delta\mathbf{u}^a \otimes \nabla N^a + \nabla N^a \otimes \delta\mathbf{u}^a) \quad (6.11)$$

$$\nabla\delta s = \sum_{a=1}^{N_n} \delta s^a \nabla N^a \quad (6.12)$$

Con estos ingredientes es posible discretizar las formas débiles de la formulación *staggered*. Para la forma débil mecánica (véase ecuación (5.11)) se tiene:

$$D\Pi(\mathbf{u}^i, s^i)[\delta\mathbf{u}^a N^a] + D^2\Pi(\mathbf{u}^i, s^i)[\delta\mathbf{u}^a N^a; \Delta\mathbf{u}^{i+1^a} N^a] = 0 \quad (6.13)$$

Con $\Delta\mathbf{u}^{i+1^a} = \mathbf{u}^{i+1^a} - \mathbf{u}^{i^a}$. Donde:

$$\begin{aligned} D\Pi[\delta\mathbf{u}^a N^a] &= \int_{\Omega} (g(s) + k)\boldsymbol{\sigma}_0 : \frac{1}{2}(\delta\mathbf{u}^a \otimes \nabla N^a + \nabla N^a \otimes \delta\mathbf{u}^a) dV \\ &\quad - \int_{\Omega} \mathbf{f} \delta\mathbf{u}^a N^a dV - \int_{\Omega} \mathbf{t} \delta\mathbf{u}^a N^a dV \\ &= \delta\mathbf{u}^a \left(\int_{\Omega} (g(s) + k)\boldsymbol{\sigma}_0 : \nabla N^a dV - \int_{\Omega} \mathbf{f} N^a dV - \int_{\Omega} \mathbf{t} N^a dA \right) \\ &= \delta\mathbf{u}^a \cdot \mathbf{R}_u^a \end{aligned} \quad (6.14)$$

Donde \mathbf{R}_u^a representa las componentes del residuo asociadas con los grados de libertad del desplazamiento para el nodo a de un elemento finito de la malla. Asimismo:

$$\begin{aligned}
D^2 \Pi \left[\delta \mathbf{u}^a N^a; \Delta \mathbf{u}^{i+1} N^b \right] &= \int_{\Omega} (g(s) + k) \frac{1}{2} (\delta \mathbf{u}^a \otimes \nabla N^a + \nabla N^a \otimes \delta \mathbf{u}^a) \\
&\quad \times \int_{\Omega} \mathbf{c}_{pqrs} \frac{1}{2} (\Delta \mathbf{u}^{i+1} \otimes \nabla N^b + \nabla N^b \otimes \Delta \mathbf{u}^{i+1})_{rs} dV \\
&= \delta \mathbf{u}_p^a \left(\int_{\Omega} (g(s) + k) \nabla N_q^a \nabla N_s^b \mathbf{c}_{pqrs} dV \right) \Delta \mathbf{u}_r^{i+1} \\
&= \delta \mathbf{u}_p^a \cdot \mathbf{K}_{uu}^{ab} \Delta \mathbf{u}^{i+1}
\end{aligned} \tag{6.15}$$

Donde \mathbf{K}_{uu}^{ab} representa la matriz de rigidez elemental asociado a los grados de libertad de desplazamiento para los nodos a, b de un elemento. En la práctica, es muy común adaptar una dotación matricial Voight donde \mathbf{K}_{uu}^{ab} se puede escribir de la siguiente forma:

$$\mathbf{K}_{uu}^{ab} = \int \mathbf{B}^{aT} \mathbf{D} \mathbf{B}^b dV \tag{6.16}$$

Donde \mathbf{B}^a y \mathbf{D} adoptan las siguientes expresiones para los casos de deformación plana (2D) y 3D:

$$\mathbf{B}^a = \begin{bmatrix} \frac{\partial N^a}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^a}{\partial y} \\ \frac{\partial N^a}{\partial y} & \frac{\partial N^a}{\partial x} \end{bmatrix} \quad \mathbf{D} = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{bmatrix} \tag{2D} \tag{6.17}$$

$$\mathbf{B}^a = \begin{bmatrix} \frac{\partial N^a}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^a}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N^a}{\partial z} \\ \frac{\partial N^a}{\partial y} & \frac{\partial N^a}{\partial x} & 0 \\ \frac{\partial N^a}{\partial x} & \frac{\partial N^a}{\partial y} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^a}{\partial z} & \frac{\partial N^a}{\partial y} \\ \frac{\partial N^a}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N^a}{\partial x} \end{bmatrix} \quad \mathbf{D} = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1 & \frac{\nu}{(1-\nu)} & \frac{\nu}{(1-\nu)} & 0 & 0 & 0 \\ & 1 & \frac{\nu}{(1-\nu)} & 0 & 0 & 0 \\ & & 1 & 0 & 0 & 0 \\ & & & \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} & 0 & 0 \\ & & & & \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} & 0 \\ & & & & & \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \end{bmatrix} \tag{3D} \tag{6.18}$$

Ensamblaje sobre todos los elementos de la malla de la matriz de rigidez \mathbf{K}_{uu}^{ab} y del residuo \mathbf{R}_u^a permiten escribir la forma débil equivalentemente como el siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$\mathbf{K}_{uu}^{ab} \Delta \mathbf{u}^{i+1} = \mathbf{R}_u \tag{6.19}$$

Donde \mathbf{K}_{uu} y \mathbf{R}_u son el resultado del ensamblaje sobre la matriz y el residuo respectivamente. Para la forma débil de fractura (véase ecuación (5.12)) se tiene:

$$D \Pi(\mathbf{u}^{i+1}, s^i) [\delta s^a N^a] + D^2 \Pi(\mathbf{u}^{i+1}, s^i) [\delta s^a; \Delta s^{i+1}{}^a] = 0 \tag{6.20}$$

Con $\Delta s^{i+1^a} = s^{i+1^a} - s^{i^a}$. Donde:

$$\begin{aligned} D\Pi[\delta s^a N^a] &= \left[\int g'(s) \Psi_0(\boldsymbol{\varepsilon}) N^a + \frac{G_c}{l} (s N^a + l^2 \nabla s \cdot \nabla N^a) dV \right] \delta s^a \\ &= \mathbf{R}_s^a \delta s^a \end{aligned} \quad (6.21)$$

Donde \mathbf{R}_s^a representa la componente del *phase-field* del residuo. Además,

$$\begin{aligned} D^2\Pi[\delta s^a N^a; \Delta s^{i+1^b} N^b] &= \delta s^a \left[\int g''(s) \Psi_0(\boldsymbol{\varepsilon}) N^a N^b + \frac{G_c}{l} (s N^b N^a + l^2 \nabla s \cdot \nabla N^a \cdot \nabla N^b) dV \right] \Delta s^{i+1^b} \\ &= \delta s^a \mathbf{K}_{ss}^{ab} \Delta s^{i+1^b} \end{aligned} \quad (6.22)$$

Donde \mathbf{K}_{ss}^{ab} representa la componente de *phase-field* de la matriz de rigidez asociada a los nodos a y b de un elemento. Ensamblaje sobre todos los elementos de la malla de la matriz de rigidez \mathbf{K}_{ss}^{ab} y del residuo \mathbf{R}_s^a permiten escribir la forma débil equivalentemente como el siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$\mathbf{K}_{ss}^{ab} \Delta s^{i+1} = -\mathbf{R}_s \quad (6.23)$$

Donde \mathbf{K}_{ss} y \mathbf{R}_s son el resultado del ensamblaje sobre la matriz y el residuo respectivamente.

7. CAPÍTULO VII: SIMULACIÓN PROBLEMA FRACTURA

En este apartado se simularán varios ejemplos típicos de fractura para verificar la validez de la implementación.

7.1. Ejemplo 1. Cuerpo rectangular

El primer ejemplo del estudio será un cuerpo rectangular, cuya base tiene el desplazamiento restringido y en su parte superior se le aplica un desplazamiento. La geometría y condiciones de contorno pueden apreciarse claramente en la siguiente figura:

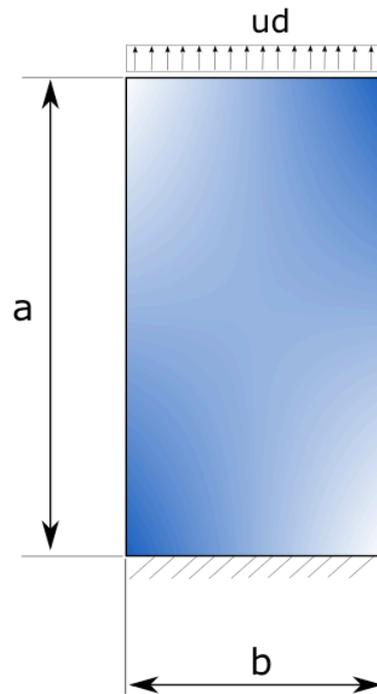


Figura 7.1. Geometría ejemplo 1

Los parámetros del problema son los siguientes:

Parámetro	Valor
Longitud a	1 m
Longitud b	3 m
Desplazamiento ud	0.5 m
Módulo de Young (E)	1 Pa
Coefficiente de Poisson	0.4
Rigidez residual (k)	1×10^{-5}
Energía de fractura (G_c)	5×10^{-4} J/m ²
Parámetro h	$0.1 / n_x$ m
Parámetro l	$2 \times h$ m

Tabla 7.1. Parámetros ejemplo 1

Los objetivos de este ejemplo son:

- **O1.1** Analizar la influencia de la malla en la propagación de la fractura.
- **O1.2** Analizar la influencia del número de incrementos en la propagación de fractura.

Las tres mallas consideradas en este ejemplo constan del siguiente número de elementos: **(a)** Malla 1.1 con $n_x=50$ y $n_y=150$ **(b)** Malla 1.2 con $n_x=100$ y $n_y=300$ **(c)** Malla 1.3 con $n_x=150$ y $n_y=450$. Las tres mallas pueden verse en la siguiente figura:

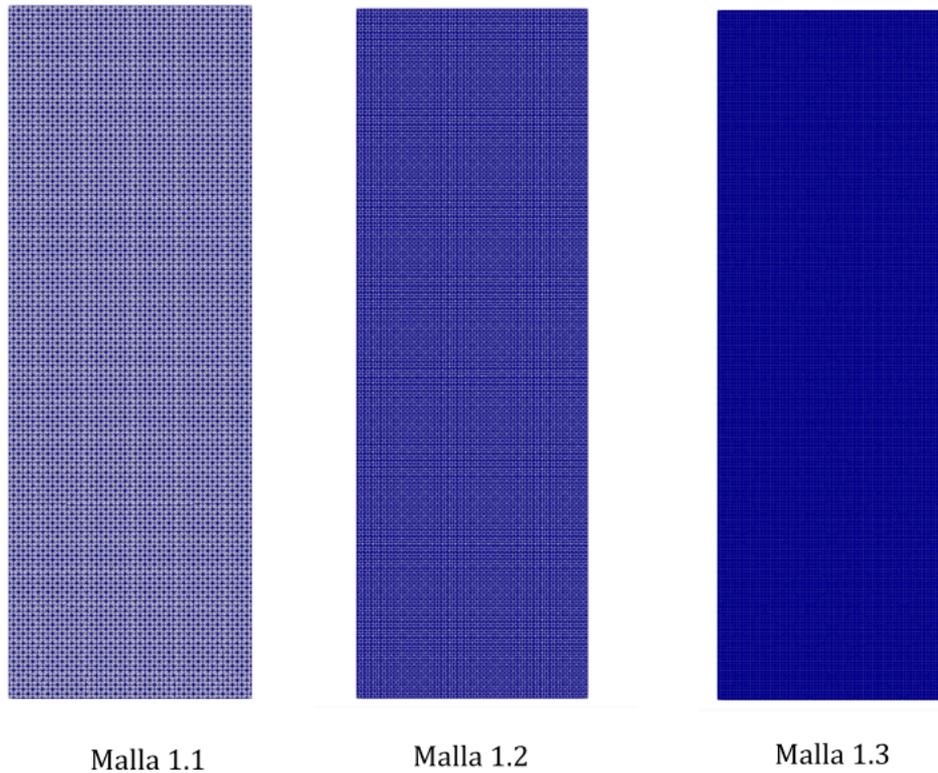


Figura 7.2. Mallas de distintos grosores ejemplo 1

7.1.1. Estudio de la influencia de la malla (O1.1)

En primer lugar, para analizar la influencia de la malla en los resultados obtenidos, realizaremos las simulaciones del problema de fractura en las mallas de la Figura 7.2 que cuentan con distintos grosores. El código de **FreeFem** utilizado para la simulación del ejemplo 1 se adjunta en el Anexo I.

Para la primera malla, la propagación de la fractura en el caso de mayor número de incrementos ($n=200$) es la siguiente:

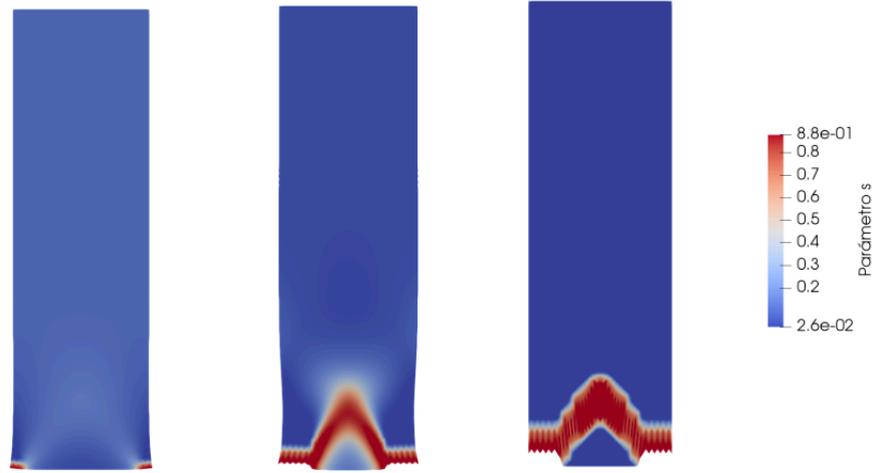


Figura 7.3. Propagación fractura Malla 1.1

Para la segunda malla:

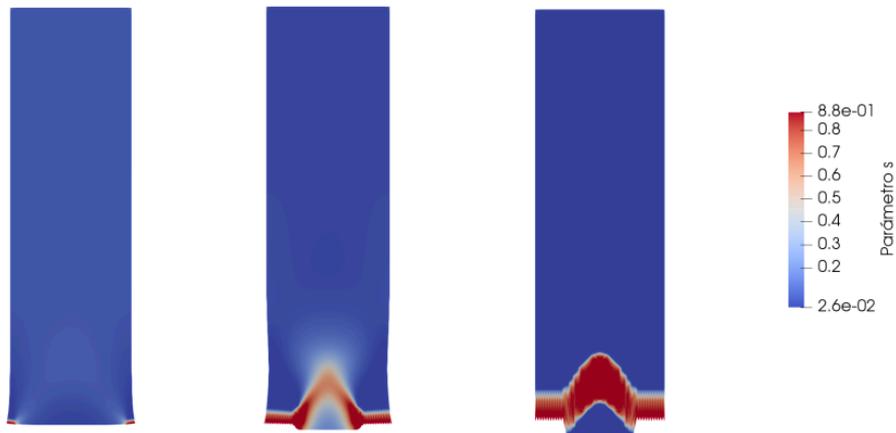


Figura 7.4. Propagación fractura Malla 1.2

Y para la tercera malla:

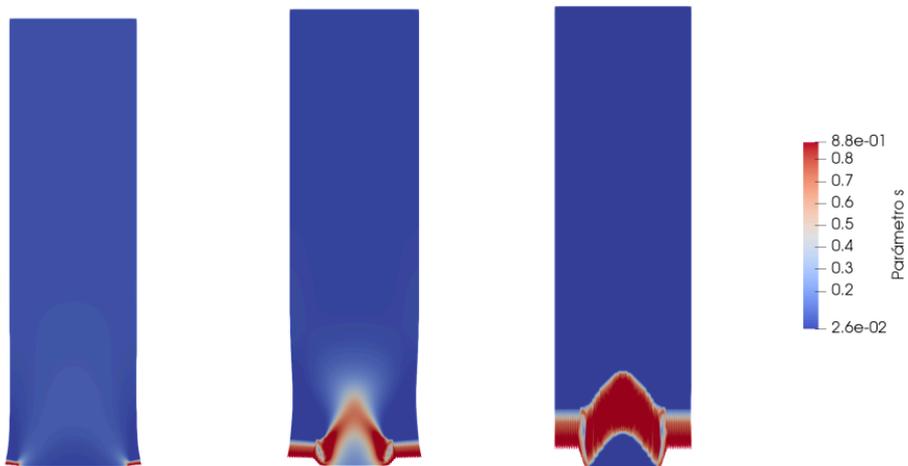


Figura 7.5. Propagación fractura Malla 1.3

Si representamos la fuerza de reacción de fractura para el caso con el número de incrementos más alto, obtenemos las siguientes curvas:

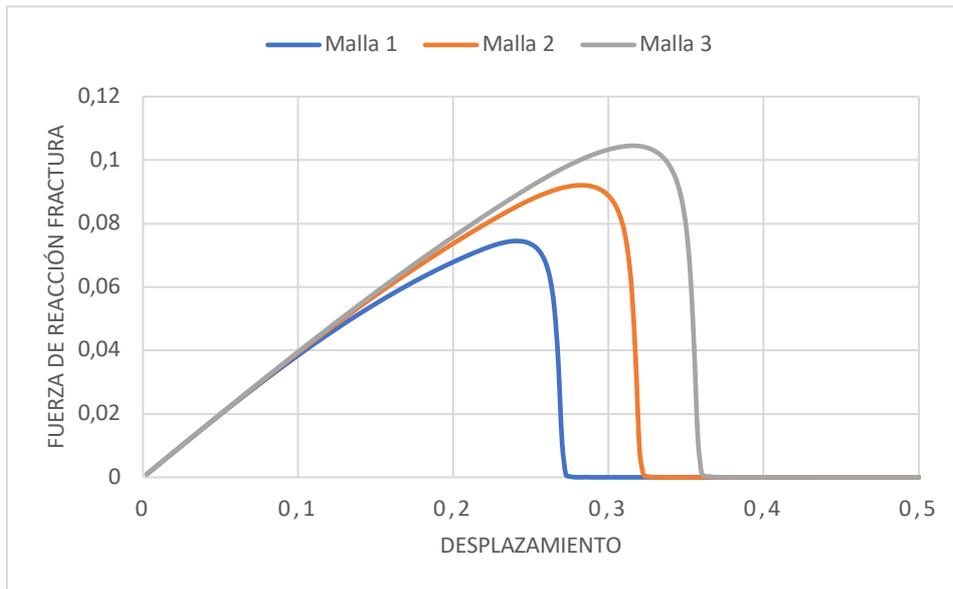


Figura 7.6. Curvas de fuerza fractura con $n=200$ para cada malla

Como se puede observar en el gráfico anterior, cuanto mayor es el refinamiento de la malla, mayor es la reacción de fractura. Esto se debe a que como en mallas más finas hay mayor número de elementos, la fuerza para la propagación de la fractura es mayor que para los casos con mallas más gruesas.

Por último, se muestran las tensiones de *Von Mises* obtenidas en distintos instantes de la simulación:

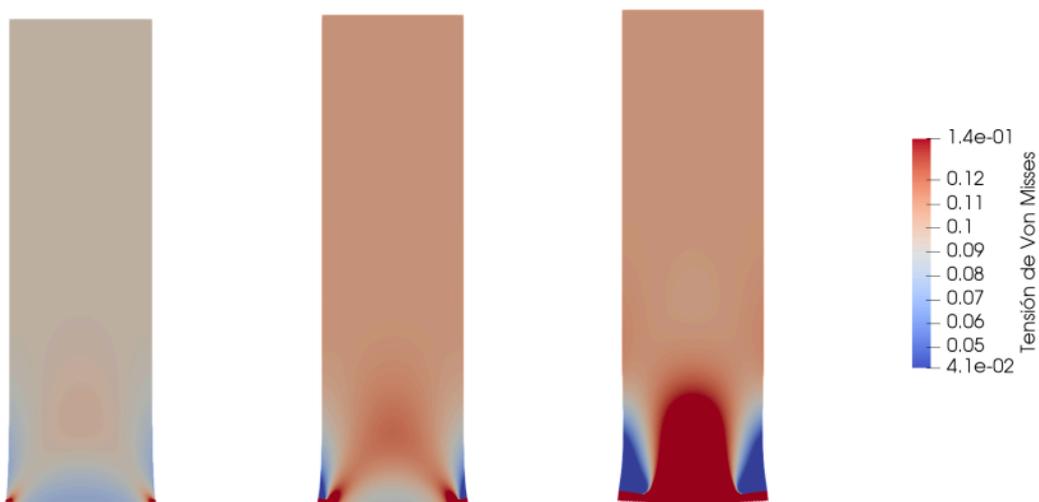


Figura 7.7. Tensión de *Von Mises* ejemplo 1

Vemos cómo el cuerpo se va tensionando poco a poco conforme aumenta el desplazamiento impuesto en la zona que va a fracturar. Resulta interesante mostrar que una vez que el material ha partido, éste se relaja y los valores de la tensión del sólido desaparece.

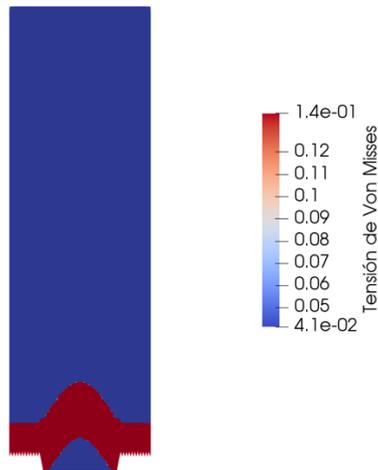


Figura 7.8. Tensión de Von Mises después de rotura ejemplo 1

7.1.2. Estudio de la influencia de los incrementos del desplazamiento impuesto (O1.2)

En este apartado, se realizará un análisis de la influencia de los incrementos del desplazamiento impuesto en los distintos resultados de la propagación de la fractura. Para ello vamos a ver las gráficas que representa la fuerza de reacción de fractura en función del desplazamiento impuesto.

Para el caso de la malla 1.1 obtenemos los siguientes resultados:

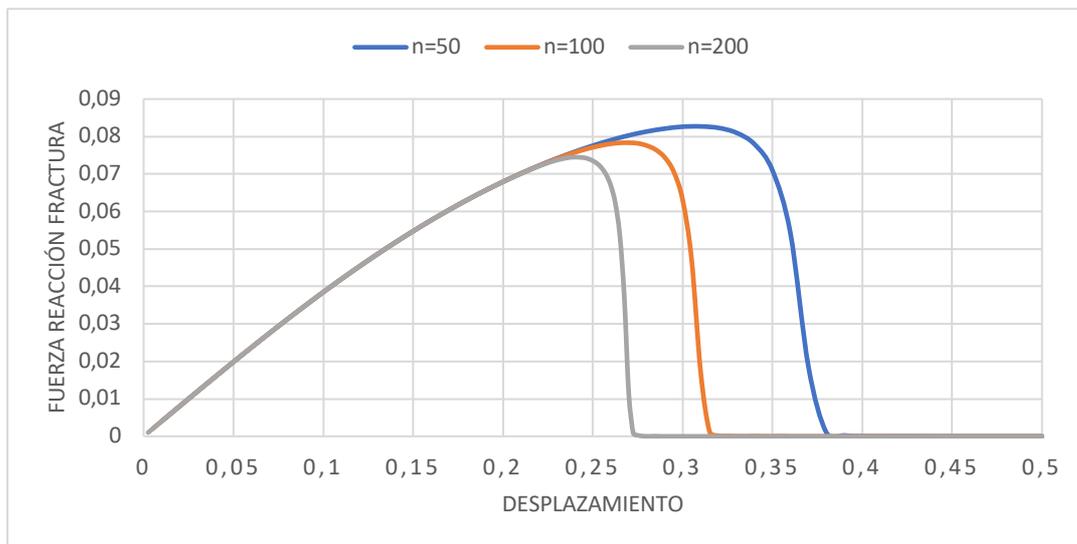


Figura 7.9. Fuerza de fractura para cada número de incrementos Malla 1.1

Como se puede observar en el anterior gráfico, cuanto mayor es el número de incrementos, la fuerza de reacción de fractura es menor, ya que al aplicar el desplazamiento más progresivamente, la fuerza necesaria para que fracture es menor. Esto quiere decir que, estamos aún lejos de converger al valor “exacto” de incrementos que debería utilizarse.

Para el caso de la malla 1.2. obtenemos las siguientes curvas:

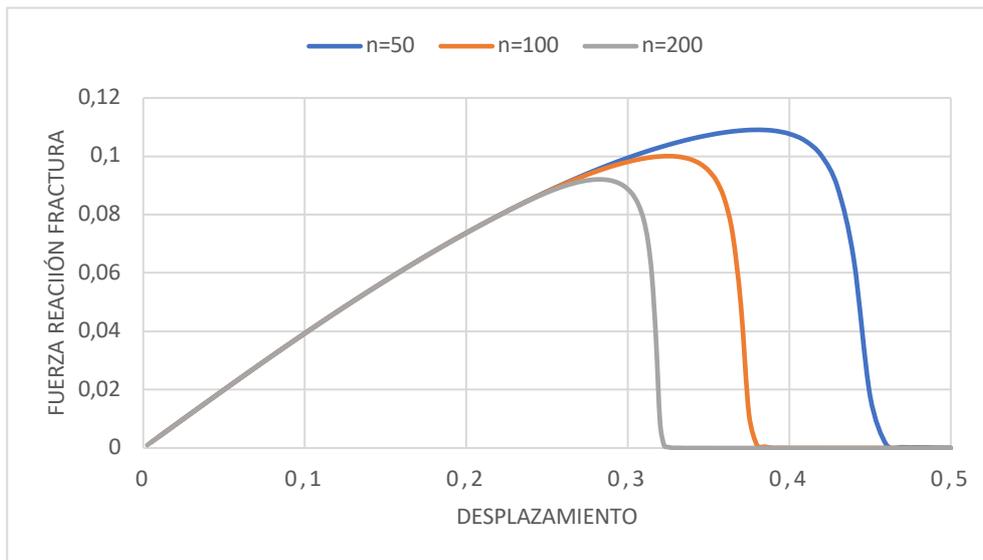


Figura 7.10. Fuerza de fractura para cada número de incrementos Malla 1.1

Para el caso de la malla 1.2 vemos que los resultados obtenidos son similares al caso de la malla anterior, y que además, la fuerza de reacción de la fractura alcanza un mayor valor debido a un mayor número de elementos.

Por último, vamos a representar las curvas obtenidas para la malla 1.3:

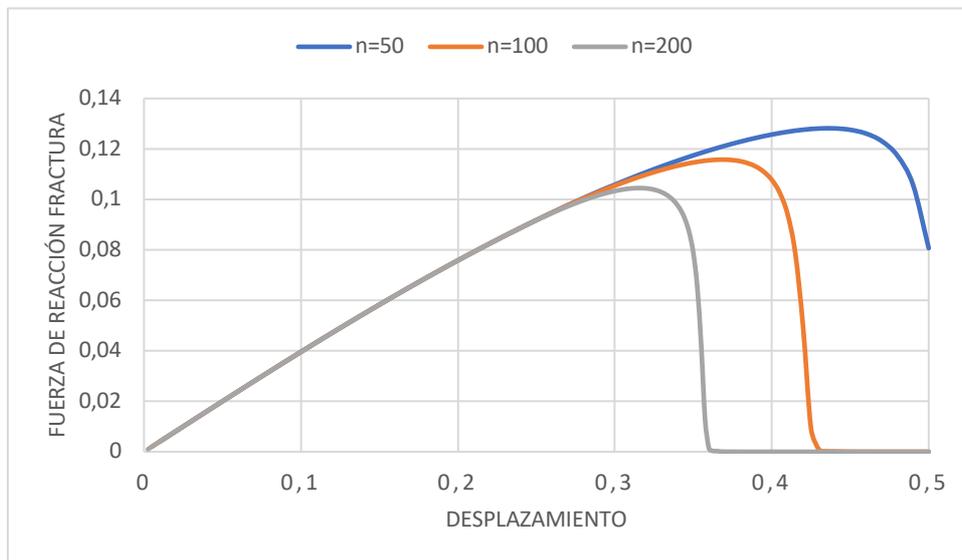


Figura 7.11. Fuerza de fractura para cada número de incrementos Malla 1.1

Como se puede ver en la gráfica, al tener una malla tan refinada, para el caso con menor número de incrementos el cuerpo no llega a fracturar del todo, para el mismo desplazamiento que las mallas anteriores. En cambio, si aumentamos el número de incrementos observamos que el sólido si que llega a romper. Además, también observamos que los valores máximos de la reacción de fractura son mayores respecto a las mallas más gruesas, ya que al tener mayor número de elementos, ésta reacción es mayor.

Por lo tanto, podemos concluir que hay una gran influencia en el número de incrementos del desplazamiento impuesto, ya que, a mayor número de incrementos, el valor máximo de la reacción de fractura disminuye y que además, si escogemos un número de incrementos muy bajo puede ser que el sólido no fracture y sea necesario aplicar un mayor desplazamiento.

Finalmente, se adjuntan los tiempos de ejecución de las simulaciones realizadas en este ejemplo.

Grosor de malla	nx=50	nx=100	nx=150
50 incrementos	58,781	238,411	667,904
100 incrementos	122,986	473,292	1317,82
200 incrementos	256,278	986,6	2897,2

Tabla 7.2. Tiempos de simulación para cada caso del estudio

Como se puede observar en la tabla (7.2), el tiempo de simulación es mayor cuanto mayor es el grosor de la malla y cuanto mayor es el número de incrementos.

7.2. Ejemplo 2. Cuerpo rectangular con fractura inicializada.

A continuación, vamos a analizar el caso de un cuerpo rectangular en el cual su lado menor se inicializa la fractura con una grieta. El cuerpo está apoyado en sus extremos inferiores impidiendo el desplazamiento vertical y apoyado en uno de sus lados menores para impedir el desplazamiento horizontal. A su vez, está sometido a un desplazamiento vertical en sus lados mayores. La geometría y condiciones de contorno pueden apreciarse claramente en la siguiente figura:

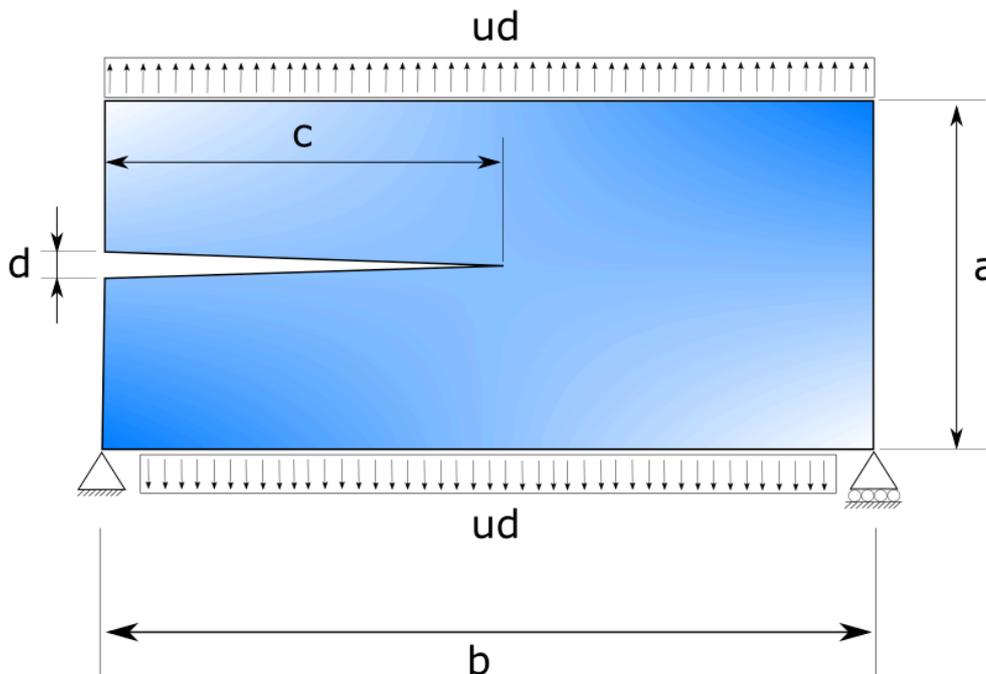


Figura 7.12. Geometría ejemplo 2

Los parámetros del problema son los siguientes:

Parámetro	Valor
Longitud a	1 m
Longitud b	0.4 m
Longitud c	0.5 m
Longitud d	0.005 m
Desplazamiento ud	0.5 m
Módulo de Young (E)	1 Pa
Coefficiente de Poisson	0.2
Parámetro de rigidez (k)	1×10^{-5}
Energía de fractura (G_c)	$2 \times 10^{-4} \text{ J/m}^2$
Parámetro l	$5 \times 10^{-3} \text{ m}$

Tabla 7.3. Parámetros ejemplo 2

El objetivo es:

- **O2** Comprobar que cualitativamente, los resultados de propagación de fractura obtenidos son comparables con los mostrados en la bibliografía.

La malla creada a través de *FreeFem* es la siguiente:

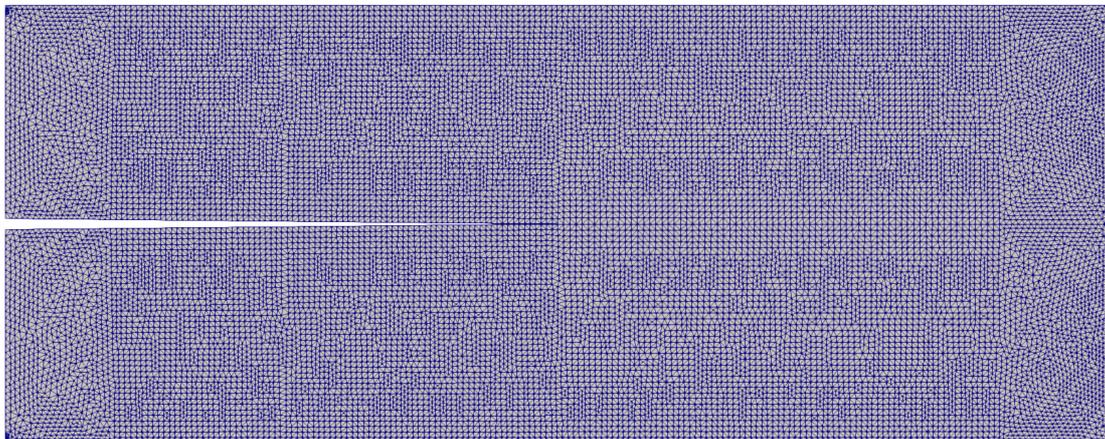


Figura 7.13. Malla ejemplo 2

El número de incrementos utilizados para este ejemplo ha sido de 50 incrementos. El código de *FreeFem* utilizado para la simulación del ejemplo 2 se adjunta en el Anexo II. A continuación, se muestran los resultados obtenidos en la simulación de la fractura:

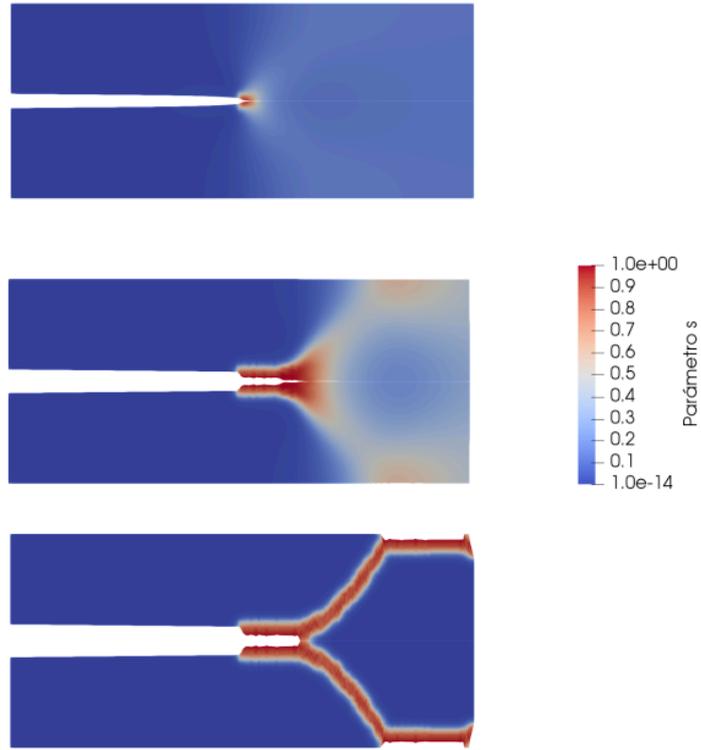


Figura 7.14. Propagación fractura ejemplo 2

La evolución de la tensión de *Von Mises* en este ejemplo se puede ver en la siguiente figura:

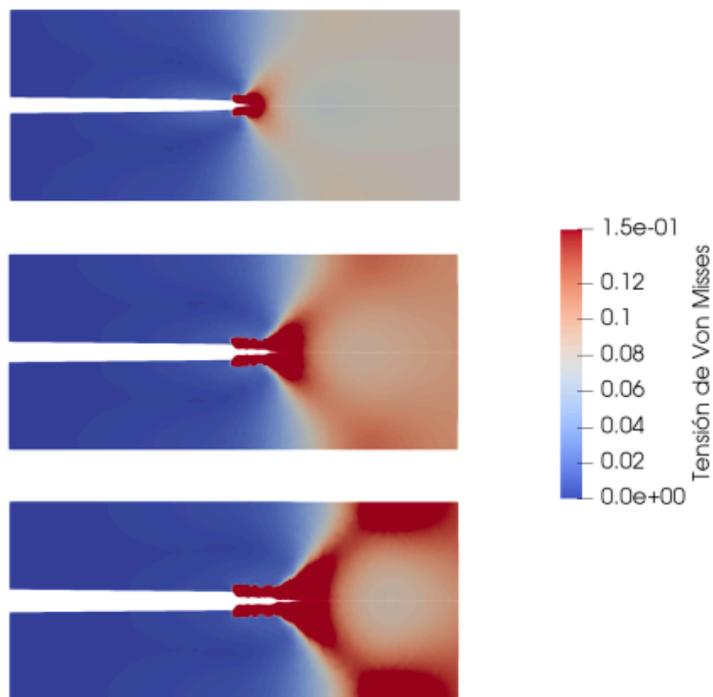


Figura 7.15. Evolución Tensión de Von Mises ejemplo 2

Una vez que el material ha partido, la tensión de *Von Mises* queda de la siguiente forma:

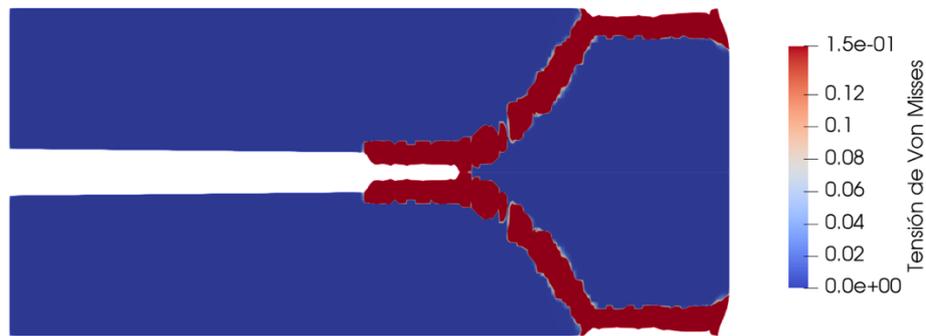


Figura 7.16. Tensión de *Von Mises* después de rotura ejemplo 2

Si representamos gráficamente la fuerza de reacción de fractura frente a los desplazamientos impuestos obtenemos la siguiente curva:

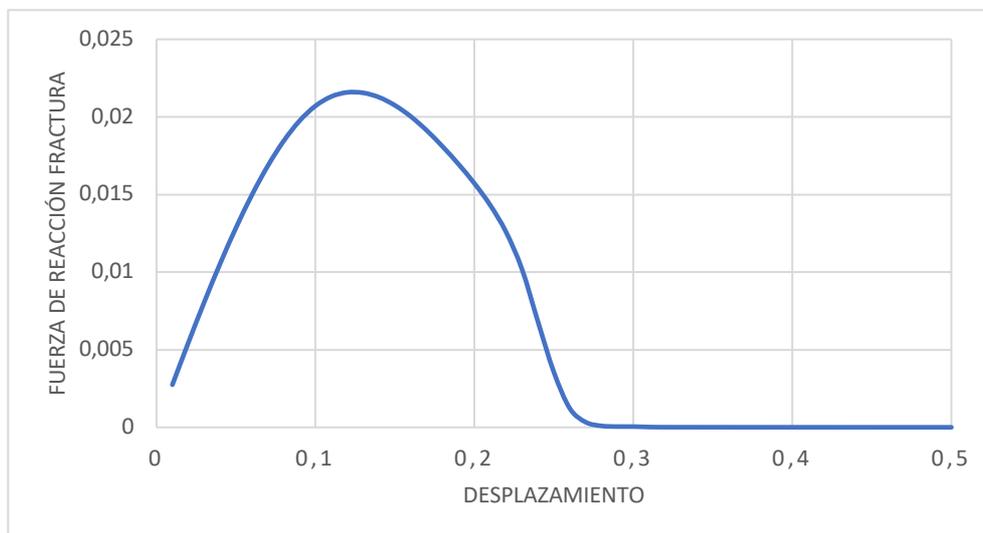


Figura 7.17. Curva de fuerza de reacción de fractura ejemplo 2

Como se puede observar en la gráfica, el cuerpo parte mucho antes de que se le llegue a aplicar el desplazamiento máximo, por lo podríamos reducir el desplazamiento impuesto para ajustar más la fractura del material.

7.3. Ejemplo 3. Cuerpo cuadrangular con fractura inicializada

El siguiente ejemplo es el de un cuerpo cuadrangular en el que en uno de sus lados se ha inicializado la fractura con una grieta. El cuerpo está sometido a un desplazamiento transversal en su parte superior, y a su vez tiene el desplazamiento limitado en su parte inferior. La geometría y condiciones de contorno pueden apreciarse claramente en la siguiente figura:

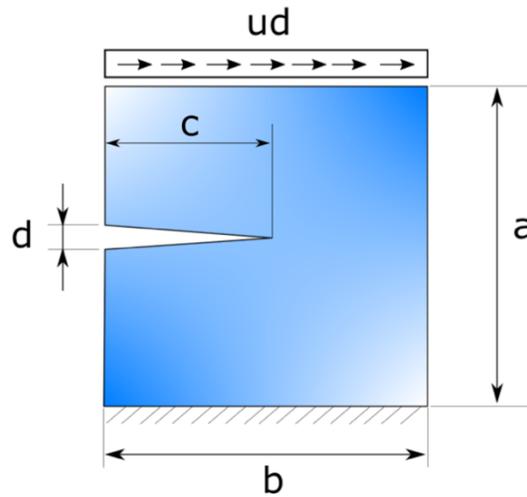


Figura 7.18. Geometría ejemplo 3

Los parámetros utilizados para la simulación del ejemplo son los siguientes:

Parámetro	Valor
Longitud a	1 m
Longitud b	1 m
Longitud c	0.5 m
Longitud d	0.01 m
Desplazamiento ud	0.5 m
Módulo de Young (E)	1 Pa
Coefficiente de Poisson	0.4
Parámetro de rigidez (k)	1×10^{-5}
Energía de fractura (G_c)	$5 \times 10^{-4} \text{ J/m}^2$
Parámetro l	$5 \times 10^{-3} \text{ m}$

Tabla 7.4. Parámetros ejemplo 3

El objetivo para este ejemplo es:

- **O3** Comprobar que cualitativamente, los resultados de propagación de fractura obtenidos son comparables con los mostrados en la bibliografía.

La malla creada a través de *FreeFEM* es la siguiente:

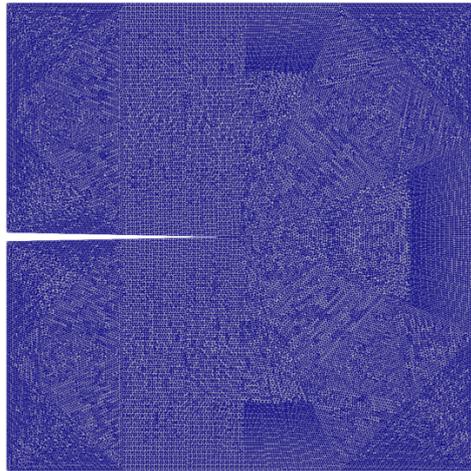


Figura 7.19. Malla ejemplo 3

Para este caso de estudio vamos a realizar la simulación con 100 incrementos. El código de *FreeFem* utilizado para la simulación del ejemplo 3 se adjunta en el Anexo III. El resultado que obtenemos en la simulación es el siguiente:

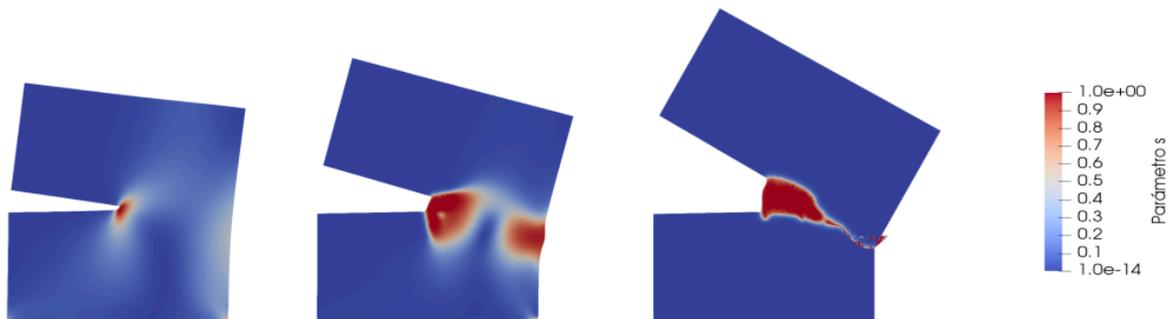


Figura 7.20. Propagación fractura ejemplo 3

La tensión de *Von Misses* en el instante anterior a la fractura total del cuerpo es la siguiente:

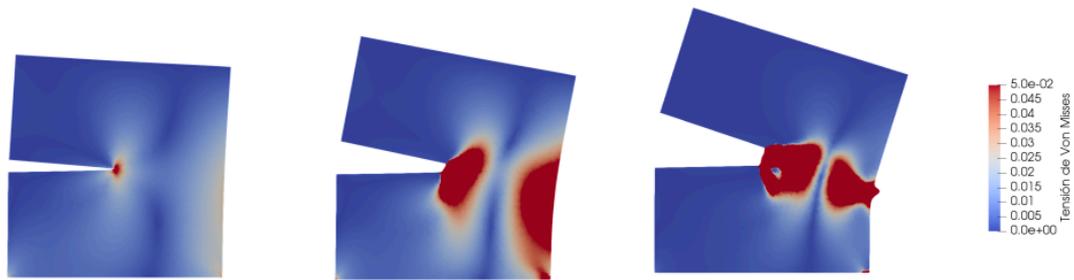


Figura 7.21. Evolución Tensión de Von Misses ejemplo 3

La tensión de *Von Misses* una vez fracturado el material tendría un valor muy bajo debido a que el material ya no está tensionado, como se puede ver en la siguiente figura:

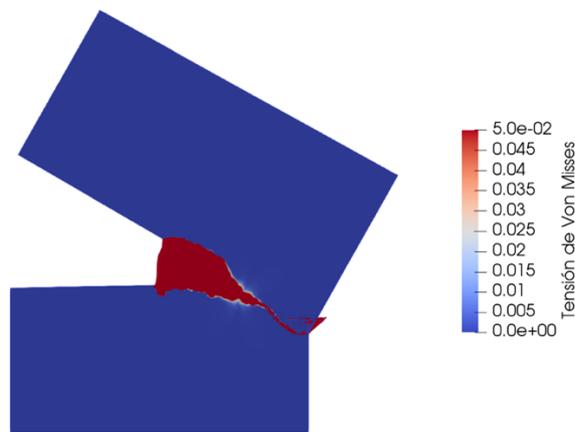


Figura 7.22. Tensión de Von Misses después de rotura ejemplo 3

Finalmente, si representamos la fuerza de reacción de la fractura frente al desplazamiento impuesto obtendríamos la siguiente curva:

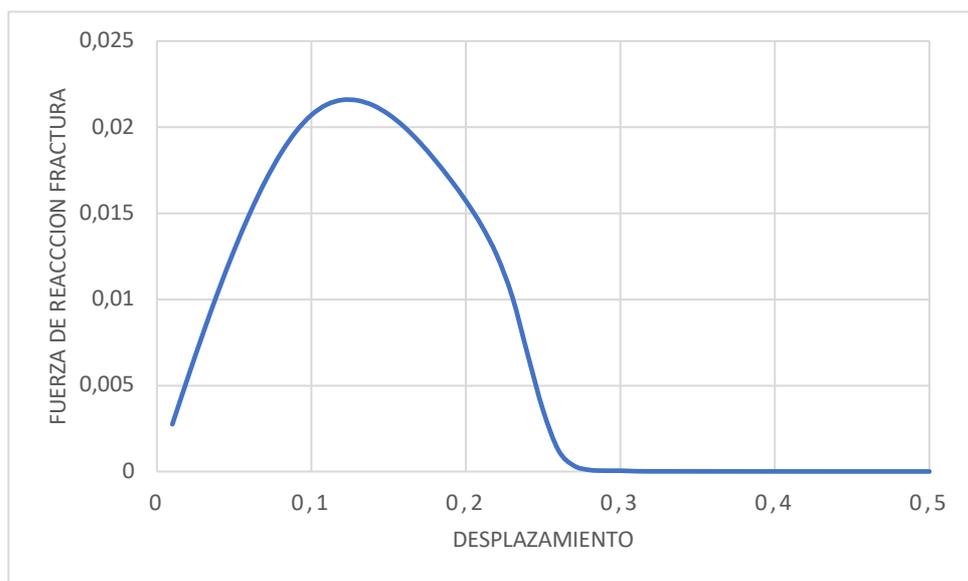


Figura 7.23. Curva de fuerza de reacción fractura ejemplo 3

7.4. Aplicación a un modelo 3D

Por último, vamos a aplicar el modelo de fractura y elasticidad a un caso 3D. Para ello, vamos a simular la fractura en una biela aplicando el método de elementos finitos.

La biela está fijada a un eje mediante el agujero del pie, y como resultado del giro del eje, la biela experimenta un desplazamiento en el extremo de la cabeza que tensiona el material pudiendo producir la fractura. El cuerpo se puede observar en la siguiente figura:



Figura 7.24. Biela de acero AISI 1020

El material de la biela es un acero AISI 1020 laminado en frío, con un módulo de elasticidad de 205 MPa y un coeficiente de Poisson de 0.29. Las dimensiones del modelo son las siguientes:

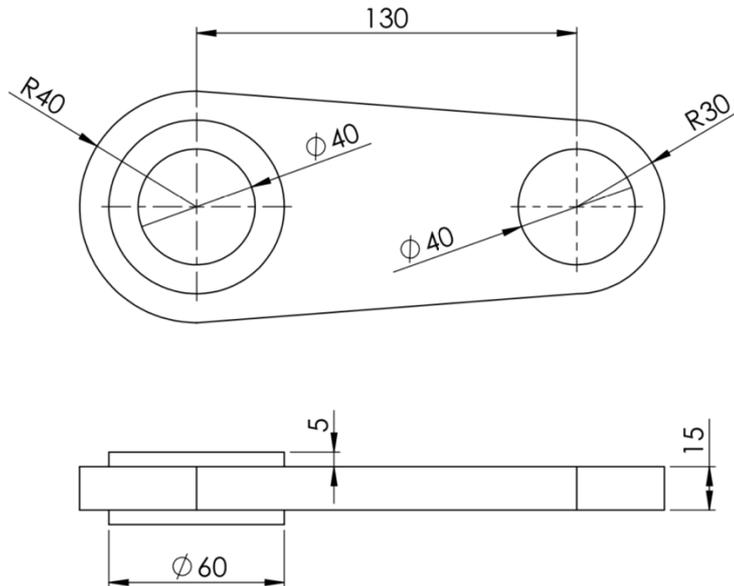


Figura 7.25. Geometría biela ejemplo 4

Los parámetros utilizados para este modelo son los siguientes:

Parámetro	Valor
Desplazamiento u_d	5 m
Módulo de Young (E)	210 MPa
Coefficiente de Poisson	0.29
Parámetro de rigidez (k)	1×10^{-5}
Energía de fractura (G_c)	$5 \times 10^{-4} \text{ J/m}^2$
Parámetro l	$1 \times 10^{-9} \text{ m}$

Tabla 7.5. Parámetros ejemplo 4

El objetivo para este caso es:

- **O3** Extensión de la formulación a un problema tridimensional.

Para realizar la malla de la biela, se ha utilizado un programa externo a **FreeFem** llamado **Gmsh**, que es un software libre de CAD que permite realizar mallado de objetos en 3D. El mallado de la biela se ha realizado de la forma que optimice los cálculos en FreeFem y que ofrezca resultados viables. Para ello se ha refinado la malla en las zonas donde se va a producir la fractura, como se puede observar en la siguiente imagen:

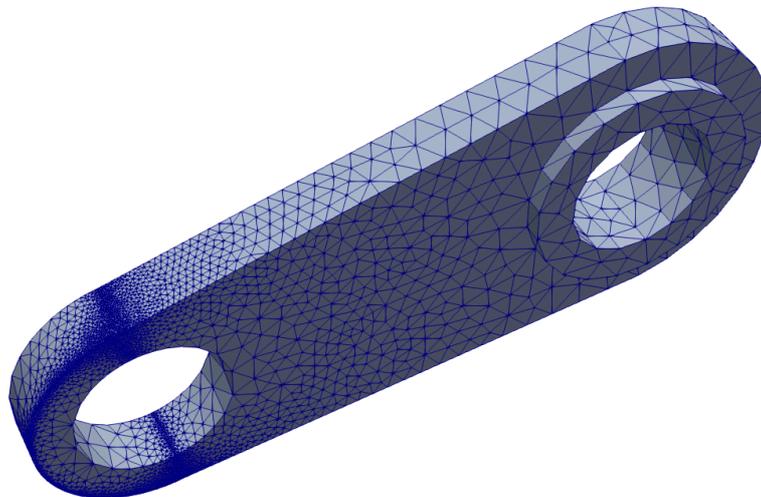


Figura 7.26. Malla ejemplo 4

Como se observa, la zona del pie de la biela tiene un refinamiento de malla mayor, ya que como se mostrará en la siguiente ilustración, la fractura tiene lugar en esa zona. El archivo. geo del mallado de la biela se adjunta en el anexo V.

El código de **FreeFem** utilizado para la simulación del ejemplo 4 se adjunta en el Anexo IV. Los resultados obtenidos en la simulación del modelo de la biela de la propagación de la fractura son los siguientes:



Figura 7.27. Propagación fractura ejemplo 4

Como cabría esperar, la biela rompe por la parte a la que se le aplica el desplazamiento, el cual se traduce como la resultante de esfuerzos de compresión y tracción mientras el eje gira. Finalmente, vamos a representar la evolución de la tensión de *Von Mises* de la biela en la siguiente figura:

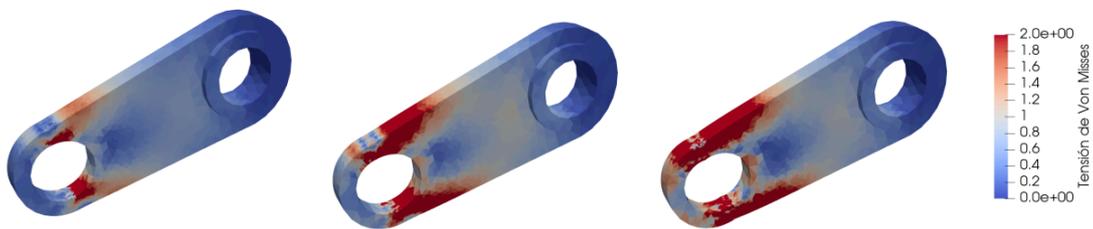


Figura 7.28. Evolución Von Mises ejemplo 4

Vemos que las partes más afectadas de la pieza son donde se aplica el desplazamiento, debido a que la otra parte de la biela está fija y no sufre tanto esfuerzo.

8. CONCLUSIONES

En este proyecto, se ha resuelto el problema de fractura de un sólido mediante el método regularizado *phase-field*, donde la fractura es aproximada por un parámetro escalar llamado *phase-field*, que suaviza (regulariza) discontinuidades sobre una región pequeña. La elección de este método ha hecho que se haya podido resolver el problema sin mucha complejidad, ya que, si hubiésemos escogido un método discreto para la resolución de la fractura, la complejidad de este proyecto hubiera sido mayor.

Los capítulos de teoría presentados en el trabajo, han permitido obtener un mayor conocimiento sobre la mecánica de continuo y la mecánica de fractura. Además, también se ha tratado la implementación numérica del problema de fractura y su implementación en elementos finitos, describiendo también los distintos tipos de funciones de forma.

Mediante el análisis realizado a los diferentes ejemplos planteados en el capítulo VII, sabemos que la influencia del grosor de la malla en los resultados de propagación de fractura es muy alta, ya que cuanto mayores son los elementos, la propagación de la fractura es menos fiable. También hemos observado que cuanto mayor número de incrementos de desplazamiento impuesto apliquemos a la simulación, los resultados de la propagación de fractura se corresponden en mayor medida a los expuestos en la bibliografía. En general, las simulaciones realizadas de los ejemplos 1, 2 y 3, han cumplido el objetivo de corresponder los resultados obtenidos de propagación de la fractura con los referenciados en la bibliografía.

Se ha conseguido implementar el problema de fractura al caso de un modelo 3D dentro del ámbito industrial, como es el caso de la biela de un motor. Esto nos permite analizar el comportamiento en servicio de un componente mecánico o estructural en el ámbito de la ingeniería para saber si el componente va a fracturar, y en tal caso, como se va a propagar la fractura por el sólido.

Por lo tanto, los objetivos planteados en la introducción de este trabajo se han conseguido satisfactoriamente, y además este proyecto me ha permitido introducirme dentro del campo de elementos finitos, que es un campo de gran importancia dentro del ámbito industrial ya que tienen diversas aplicaciones dentro de la aeronáutica, con la mecánica de fluidos, en la transmisión de calor de cualquier material, en el análisis de campos electromagnéticos y en el análisis estructural de maquinaria y estructuras dentro de la ingeniería.

9. BIBLIOGRAFÍA

- [1] G.A. Francfort, J.-J. Marigo, Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem, *J. Mech. Phys. Solids* 46 (1998) 1319–1342.
- [2] Pandolfi, K. Weinberg, A numerical approach to the analysis of failure modes in anisotropic plates, *Eng. Fract. Mech.* 78 (2011) 2052–2069.
- [3] C. Miehe, L.M. Schänzel, H. Ulmer, Phase field modeling of fracture in multi-physics problems. Part I. Balance of crack surface and failure criteria for brittle crack propagation in thermo-elastic solids, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 294 (2015) 449–485.
- [4] C. Hesch, S. Schuß, M. Dittmann, M. Franke, K. Weinberg, Isogeometric analysis and hierarchical refinement for higher-order phase-field models, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 303 (2016) 185–207.
- [5] J. Bonet, A.J. Gil, R.D. Wood, *Nonlinear Continuum Mechanics for Finite Element Analysis: Statics*, Cambridge University Press, 2016.
- [6] C. Hesch, K. Weinberg, Thermodynamically consistent algorithms for a finite-deformation phase-field approach to fracture, *Internat. J. Numer. Methods Engrg.* 99 (2014) 906–924.
- [7] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, *El método de los elementos finitos. Formulación básica y problemas lineales*
- [8] C. Miehe, M. Hofacker, F. Welschinger, A phase field model for rate-independent crack propagation: Robust algorithmic implementation based on operator splits, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 199 (2010) 2765–2778.
- [9] C.Hesch, A.J. Gil, R.Ortigosa, M.Dittmann, C. Bilgend, P.Betsch, M.Franke, A.Janz, K.Weinbergd, A framework for polyconvex large strain phase-field methods to fracture, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Volume 317, 2017, pages 649-683.

ANEXOS

ANEXO I: Código FreeFem+ para resolución ejemplo 1

////////////////////////////////// EJEMPLO 1 ////////////////////////////////////

```
load "iovtk"; //Paquete para poder procesar los datos en Paraview
```

```
//MALLA
```

```
int nx=150;
int ny=450;
real lx=1.0;//longitud eje x
real ly=3.0;//longitud eje y
mesh Th=square(nx,ny,[x*lx,y*ly],flags=1);
plot(Th);
```

```
//PARÁMETROS FISICOS DEL PROBLEMA
```

```
real E=1, nu=0.4;
real lambda = E*nu/((1+nu)*(1-2*nu)),mu=E/(2*(1+nu));
real sqrt2=sqrt(2.);
real k=1e-5*E;
real Gc=5.0e-4; //energía de fractura
real h=0.1/nx;
real l=2.0*h;
int n=50;
real ud=0.5;
real du=ud/n;
real [int] Fvec(n);
real w;
real F;
```

```
//ESPACIO DE ELEMENTOS FINITOS
```

```
fespace Vh(Th,P1);
Vh u1,u2,v1,v2,du1,du2;
```

```
fespace Vhs(Th,P1);
Vhs s,ds,vs;
```

```
fespace Wh(Th,P1);
Wh sigmavm;
```

```
//CREACIÓN DE MACROS
```

```
macro div(u1,u2) (dx(u1)+dy(u2)) //EOM
macro epsilon(u1,u2) [dx(u1),dy(u2),(dy(u1)+dx(u2))/sqrt2] //EOM
macro grads(s) [dx(s),dy(s)]//EOM
macro sigma(u1,u2) [lambda*(dx(u1)+dy(u2))+2*mu*dx(u1),
                    lambda*(dx(u1)+dy(u2))+2*mu*dy(u2),
                    mu*(dx(u1)+dy(u2))]///EOM
```

```
//PLANTEAMIENTO DE LA FORMULACIÓN VARIACIONAL
```

```
problem elasticidad([du1,du2], [v1,v2])= int2d(Th)(
    ((1-s)^2+k)*
    lambda*div(du1,du2)*div(v1,v2)
    +2. *mu*( epsilon(du1,du2)*epsilon(v1,v2) ) )
+int2d(Th)(
    ((1-s)^2+k)*
    lambda*div(u1,u2)*div(v1,v2)
    +2. *mu*( epsilon(u1,u2)*epsilon(v1,v2) ) )
+on (3,du2=du) //Condiciones de contorno
```

+ on(1,du1=0,du2=0);

problem fractura (ds,vs)= int2d(Th)

```
(  
  Gc*1*(grads(ds)'*grads(vs))  
  +(Gc/l)*ds*vs  
  +2*(ds)*((lambda*div(u1,u2)*div(u1,u2))  
  +2 *mu*( epsilon(u1,u2)'*epsilon(u1,u2) ))*vs  
  )  
  + int2d(Th)(  
  Gc*1*(grads(s)'*grads(vs))  
  +(Gc/l)*s*vs  
  +2*(s-1)*((lambda*div(u1,u2)*div(u1,u2))  
  +2 *mu*( epsilon(u1,u2)'*epsilon(u1,u2) ))*vs  
  );
```

//RESOLUCIÓN DEL PROBLEMA

```
for(int i=0;i<n;i++)
```

```
{  
  elasticidad;  
  u1=u1+du1;  
  u2=u2+du2;
```

```
  fractura;  
  s=s+ds;
```

```
  w=int2d(Th)((1-s)^2*sigma(u1,u2)'*epsilon(u1,u2));
```

```
  F=w/(ud*(i+1)/n);
```

```
  Fvec[i]=F;
```

//TENSIÓN DE VON MISSES

```
sigmavm=sqrt(sigma(u1,u2)[0]*sigma(u1,u2)[0]-sigma(u1,u2)[0]*sigma(u1,u2)[1]  
  +sigma(u1,u2)[1]*sigma(u1,u2)[1]+3*sigma(u1,u2)[2]*sigma(u1,u2)[2]);
```

```
savevtk("Ejemplo1_nx=50_n=50_"+i+".vtk",Th,[u1,u2],i,s,sigmavm);
```

```
}
```

ANEXO II: Código FreeFem+ para resolución de ejemplo 2

////////// EJEMPLO 1 //////////

```
load "iovtk";
```

```
//CREACIÓN DE LA MALLA
```

```
real c=0.5; //Profundidad de la grieta
```

```
real d=0.005; // apertura de la grieta
```

```
real b=0.19; //apoyo lateral izquierdo
```

```
border a1(t=0,1){x=c*t;y=(1-t)*d;label=1;}
```

```
border a2(t=0,1){x=t+(1-t)*c;y=0;label=2;}
```

```
border a3(t=0,1){x=1;y=0.2*t;label=3;}
```

```
border a4(t=0,1){x=1-t;y=0.2;label=4;}
```

```
border a5(t=0,1){x=0;y=b*t+(1-t)*0.2;label=5;}
```

```
border a6(t=0,1){x=0;y=t*d+(1-t)*b;label=6;}
```

```
real n1=1; //resolución apoyos
```

```
real n2=20; //resolución aristas largas
```

```
real n3=3; //resolución aristas cortas
```

```
real n4=10; //resolución grieta
```

```
mesh Th= buildmesh(a1(n4*10)+a2(n3*30)+a3(n3*15)+a4(n2*10)+a5(n1*10)+a6(n3*10));
```

```
plot(Th);
```

```
//PARÁMETROS FÍSICOS Y CARGAS
```

```
real E=1, nu=0.2;
```

```
real lambda = E*nu/((1+nu)*(1-2*nu)), mu=E/(2*(1+nu));
```

```
real sqrt2=sqrt(2.);
```

```
real k=1e-5*E;
```

```
real Gc=2e-4;
```

```
real l=5e-3;
```

```
real w;
```

```
real F;
```

```
int n=50;
```

```
real ud=0.05;
```

```
real du=ud/n;
```

```
real [int] Fvec(n);
```

```
//ESPACIO DE ELEMENTOS FINITOS
```

```
fespace Vh(Th,P1);
```

```
Vh u1,u2,v1,v2,du1,du2;
```

```
fespace Vhs(Th,P1);
```

```
Vhs s,ds,vs;
```

```
fespace Wh(Th,P1);
```

```
Wh sigmavm;
```

```
//MACROS
```

```
macro div(u1,u2) (dx(u1)+dy(u2)) //EOM
```

```
macro epsilon(u1,u2) [dx(u1),dy(u2),(dy(u1)+dx(u2))/sqrt2] //EOM
```

```
macro grads(s) [dx(s),dy(s)] //EOM
```

```
macro sigma(u1,u2) [lambda*(dx(u1)+dy(u2))+2*mu*dx(u1),
```

```
lambda*(dx(u1)+dy(u2))+2*mu*dy(u2),
```

```
mu*(dx(u1)+dy(u2))] //EOM
```

//PLANTEAMIENTO DE LA FORMULACIÓN VARIACIONAL

```
problem elasticidad([du1,du2], [v1,v2])= int2d(Th)(
  ((1-s)^2+k)*(
    lambda*div(du1,du2)*div(v1,v2)
    +2. *mu*( epsilon(du1,du2)*epsilon(v1,v2) ) ) )
+int2d(Th)(
  ((1-s)^2+k)*(
    lambda*div(u1,u2)*div(v1,v2)
    +2. *mu*( epsilon(u1,u2)*epsilon(v1,v2)) )
)
+on (4,du2=du) //Condiciones de contorno
+ on(5,du1=0)
+ on(2,du2=0);
```

```
problem fractura (ds,vs)= int2d(Th)
(
  Gc*1*(grads(ds)'*grads(vs))
  +(Gc/l)*ds*vs
  +2*(ds)*((lambda*div(u1,u2)*div(u1,u2))
  +2 *mu*( epsilon(u1,u2)'*epsilon(u1,u2) ))*vs
)
+ int2d(Th)(
  Gc*1*(grads(s)'*grads(vs))
  +(Gc/l)*s*vs
  +2*(s-1)*((lambda*div(u1,u2)*div(u1,u2))
  +2 *mu*( epsilon(u1,u2)'*epsilon(u1,u2) ))*vs
);
```

//RESOLUCIÓN DEL PROBLEMA

```
for(int i=0;i<n;i++)
{
  elasticidad;
  u1=u1+du1;
  u2=u2+du2;

  fractura;
  s=s+ds;

  w=int2d(Th)((1-s)^2*sigma(u1,u2)'*epsilon(u1,u2));
  F=w/(ud*(i+1)/n);
  Fvec[i]=F;

  sigmavm=sqrt(sigma(u1,u2)[0]*sigma(u1,u2)[0]-sigma(u1,u2)[0]*sigma(u1,u2)[1]
  +sigma(u1,u2)[1]*sigma(u1,u2)[1]+3*sigma(u1,u2)[2]*sigma(u1,u2)[2]);

  savevtk("DatosParaview_Ejemplo2_" + i + ".vtk",Th,[u1,u2],i,s,sigmavm);
}
```

ANEXO III: Código FreeFem+ para resolución ejemplo 3

////////// EJEMPLO 1 //////////

```
load "iovtk";

//CREACIÓN MALLA

real d=0.5; //profundidad de la grieta

border a1(t=0,1){x=(1-t)*d;y=t*0.49+(1-t)*0.5;label=1;}
border a2(t=0,1){x=0;y=(1-t)*0.49;label=2;}
border a3(t=0,1){x=t;y=0;label=3;}
border a4(t=0,1){x=1;y=t;label=4;}
border a5(t=0,1){x=1-t;y=1;label=5;}
border a6(t=0,1){x=0;y=1-0.49*t;label=6;}
border a7(t=0,1){x=d*t;y=0.51-0.01*t;label=7;}

real n1=10; //resolución zona grieta
real n2=10; //resolución aristas menores
real n3=15; //resolución aristas mayores

mesh Th= buildmesh(a1(n1*10)+a2(n2*10)+a3(n3*10)+a4(n3*10)
+a5(n3*10)+a6(n2*10)+a7(n1*10));

plot(Th);

//PARÁMETROS FÍSICOS Y CARGAS
real E=1, nu=0.4;
real lambda = E*nu/((1+nu)*(1-2*nu)),mu=E/(2*(1+nu));
real sqrt2=sqrt(2.);
real k=1e-5*E;
real Gc=5.0e-5;
real l=5e-3;
real w;
real F;
int n=100;
real ud=0.5;
real du=ud/n;
real [int] Fvec(n);

//ESPACIO DE ELEMENTOS FINITOS
fespace Vh(Th,P1);
Vh u1,u2,v1,v2,du1,du2;

fespace Vhs(Th,P1);
Vhs s,ds,vs;

fespace Wh(Th,P1);
Wh sigmavm;

//MACROS
macro div(u1,u2) (dx(u1)+dy(u2)) //EOM
macro epsilon(u1,u2) [dx(u1),dy(u2),(dy(u1)+dx(u2))/sqrt2] //EOM
macro grads(s) [dx(s),dy(s)]//EOM
macro sigma(u1,u2) [lambda*(dx(u1)+dy(u2))+2*mu*dx(u1),
                    lambda*(dx(u1)+dy(u2))+2*mu*dy(u2),
                    mu*(dx(u1)+dy(u2))]///EOM
```

```
//PLANTEAMIENTO DE LA FORMULACIÓN VARIACIONAL
problem elasticidad([du1,du2], [v1,v2])= int2d(Th)(
  ((1-s)^2+k)*(
    lambda*div(du1,du2)*div(v1,v2)
    +2. *mu*( epsilon(du1,du2)*epsilon(v1,v2) ) ) )
+int2d(Th)(
  ((1-s)^2+k)*(
    lambda*div(u1,u2)*div(v1,v2)
    +2. *mu*( epsilon(u1,u2)*epsilon(v1,v2)) )
)
+on (5,du1=du) //CONDICIONES DE CONTORNO
+ on(3,du1=0,du2=0);
```

```
problem fractura (ds,vs)= int2d(Th)
(
  Gc*1*(grads(ds)'*grads(vs))
  +(Gc/l)*ds*vs
  +2*(ds)*((lambda*div(u1,u2)*div(u1,u2))
  +2 *mu*( epsilon(u1,u2)*epsilon(u1,u2) ))*vs
)
+ int2d(Th)(
  Gc*1*(grads(s)'*grads(vs))
  +(Gc/l)*s*vs
  +2*(s-1)*((lambda*div(u1,u2)*div(u1,u2))
  +2 *mu*( epsilon(u1,u2)*epsilon(u1,u2) ))*vs
);
```

```
//RESOLUCIÓN DEL PROBLEMA
for(int i=0;i<n;i++)
{
  elasticidad;
  u1=u1+du1;
  u2=u2+du2;

  fractura;
  s=s+ds;

  w=int2d(Th)((1-s)^2*sigma(u1,u2)*epsilon(u1,u2));
  F=w/(ud*(i+1)/n);
  Fvec[i]=F;

  sigmavm=sqrt(sigma(u1,u2)[0]*sigma(u1,u2)[0]-sigma(u1,u2)[0]*sigma(u1,u2)[1]
  +sigma(u1,u2)[1]*sigma(u1,u2)[1]+3*sigma(u1,u2)[2]*sigma(u1,u2)[2]);

  savevtk("DatosParaview_Ejemplo3_"+i+".vtk",Th,[u1,u2],i,s,sigmavm);
}
```

ANEXO IV: Código FreeFem+ para resolución ejemplo 4

```
load "gmsH"; //Paquete para poder cargar una malla de GMSH
load "msh3"; //Paquete para poder crear una malla 3D
load "iovtk";

//CREACIÓN DE LA MALLA//
mesh3 Th = gmsHload3("mallaeditada.msh");
plot(Th,wait=true);

//PARÁMETROS FÍSICOS Y CARGAS

real E=210e6, nu=0.29;
real lambda = E*nu/((1+nu)*(1-2*nu)),mu=E/(2*(1+nu));
real sqrt2=sqrt(2.);
real k=1e-5*E;
real Gc=5.0e-5;
real l=1e-9;
int n=50;
real ud=5;
real du=ud/n;

//ESPACIO DE ELEMENTOS FINITOS
fespace Vh(Th,P1);
Vh u1,u2,u3,v1,v2,v3,du1,du2,du3;

fespace Vhs(Th,P1);
Vhs s,ds,vs;

fespace Wh(Th,P1); // elementos P1
Wh sigmavm;
Wh FS;

//MACROS
macro div(u1,u2,u3) (dx(u1)+dy(u2)+dz(u3)) //EOM
macro grads(s) [dx(s),dy(s),dz(s)]//EOM
macro epsilon(u1,u2,u3)
[dx(u1),dy(u2),dz(u3),(dz(u2)+dy(u3))/sqrt2,(dz(u1)+dx(u3))/sqrt2,(dy(u1)+dx(u2))/sqrt2] // EOM
macro sigma(u1,u2,u3) [lambda*(dx(u1)+dy(u2)+dz(u3))+2*mu*dx(u1),
lambda*(dx(u1)+dy(u2)+dz(u3))+2*mu*dy(u2),
lambda*(dx(u1)+dy(u2)+dz(u3))+2*mu*dz(u3),
mu*(dx(u1)+dy(u2)+dz(u3))] // EOM

s=0;//inicialización del parámetro s

//PLANTEAMIENTO DE LA FORMULACION VARIACIONAL
problem elasticidad([du1,du2,du3], [v1,v2,v3])= int3d(Th)(
((1-s)^2+k)*(
lambda*div(du1,du2,du3)*div(v1,v2,v3)
+2. *mu*( epsilon(du1,du2,du3)*epsilon(v1,v2,v3) ) )
+int3d(Th)(
((1-s)^2+k)*(
lambda*div(u1,u2,u3)*div(v1,v2,v3)
+2. *mu*( epsilon(u1,u2,u3)*epsilon(v1,v2,v3) )
)
+on (230,du1=du)
+ on(229,du1=0,du2=0,du3=0);
```

```

problem fractura (ds,vs)= int3d(Th)
(
  Gc*1*(grads(ds)'*grads(vs))
  +(Gc/l)*ds*vs
  +2*(ds)*((lambda*div(u1,u2,u3)*div(u1,u2,u3))
  +2 *mu*( epsilon(u1,u2,u3)*epsilon(u1,u2,u3)
)))*vs
)
+ int3d(Th)(
  Gc*1*(grads(s)'*grads(vs))
  +(Gc/l)*s*vs
  +2*(s-1)*((lambda*div(u1,u2,u3)*div(u1,u2,u3))
  +2 *mu*( epsilon(u1,u2,u3)*epsilon(u1,u2,u3)
)))*vs
);

```

```
//RESOLUCIÓN DEL PROBLEMA
```

```

for(int i=0;i<n;i++)
{
  elasticidad;
  u1=u1+du1;
  u2=u2+du2;
  u3=u2+du3;

  fractura;
  s=s+ds;

  //Tensión de von Misses
  sigmavm = sqrt(sigma(u1,u2,u3)[0]*sigma(u1,u2,u3)[0]
  +sigma(u1,u2,u3)[1]*sigma(u1,u2,u3)[1]
  +sigma(u1,u2,u3)[2]*sigma(u1,u2,u3)[2]
  -sigma(u1,u2,u3)[0]*sigma(u1,u2,u3)[1]
  -sigma(u1,u2,u3)[1]*sigma(u1,u2,u3)[2]
  -sigma(u1,u2,u3)[2]*sigma(u1,u2,u3)[0]
  );
  mesh3 Thd = movemesh3(Th, transfo=[x+u1, y+u2, z+u3]); // malla deformada

  savevtk("DatosParaview_Fractura3D_" + i + ".vtk",Thd,[u1,u2,u3],i,s,sigmavm);
}

```

ANEXO V: Código de la geometría de la biela realizada con GMSH

```
cl_1 = 10;
h1=0.05; //PARÁMETRO DE REFINAMIENTO
Point(1) = {0, 0, 0, 10};
Point(2) = {200, 0, 0, 10};
Point(3) = {10, 0, 0, 10};
Point(4) = {20, 0, 0, 10};
Point(5) = {40, 0, 0, 10};
Point(6) = {60, 0, 0, 10};
Point(7) = {70, 0, 0, 10};
Point(8) = {190, 0, 0, 10};
Point(9) = {170, 0, 0, 10};
Point(10) = {150, 0, 0, 10};
Point(11) = {170, 20, 0, 10*h1};
Point(12) = {170, -20, 0, 10*h1};
Point(13) = {170, 30, 0, 10*h1};
Point(14) = {170, -30, 0, 10*h1};
Point(15) = {40, 20, 0, 10};
Point(16) = {40, 30, 0, 10};
Point(17) = {40, 40, 0, 10};
Point(18) = {40, -20, 0, 10};
Point(19) = {40, -30, 0, 10};
Point(20) = {40, -40, 0, 10};
Point(21) = {170, 30, 15, 10*h1};
Point(22) = {40, 40, 15, 10};
Point(26) = {40, 0, 15, 10};
Point(27) = {0, 0, 15, 10};
Point(32) = {40, -40, 15, 10};
Point(36) = {170, -30, 15, 10*h1};
Point(40) = {170, 0, 15, 10};
Point(41) = {200, 0, 15, 10*h1};
Point(49) = {40, 30, 15, 10};
Point(51) = {10, 0, 15, 10};
Point(56) = {40, -30, 15, 10};
Point(61) = {70, 0, 15, 10};
Point(69) = {170, 20, 15, 10*h1};
Point(71) = {150, 0, 15, 10};
Point(76) = {170, -20, 15, 10*h1};
Point(81) = {190, 0, 15, 10};
Point(102) = {20, 0, 15, 10};
Point(104) = {40, -20, 15, 10};
Point(109) = {60, 0, 15, 10};
Point(114) = {40, 20, 15, 10};
Point(115) = {40, 30, 20, 10};
Point(116) = {40, 0, 20, 10};
Point(117) = {70, 0, 20, 10};
Point(122) = {40, -30, 20, 10};
Point(127) = {10, 0, 20, 10};
Point(135) = {20, 0, 20, 10};
Point(137) = {40, -20, 20, 10};
Point(142) = {60, 0, 20, 10};
Point(147) = {40, 20, 20, 10};
Point(148) = {40, 30, -5, 10};
Point(149) = {40, 0, -5, 10};
Point(150) = {70, 0, -5, 10};
Point(155) = {40, -30, -5, 10};
Point(160) = {10, 0, -5, 10};
```

Point(168) = {20, 0, -5, 10};
 Point(170) = {40, -20, -5, 10};
 Point(175) = {60, 0, -5, 10};
 Point(180) = {40, 20, -5, 10};
 Line(1) = {13, 17};
 Line(2) = {20, 14};
 Circle(3) = {13, 9, 2};
 Circle(4) = {2, 9, 14};
 Circle(5) = {11, 9, 8};
 Circle(6) = {8, 9, 12};
 Circle(7) = {12, 9, 10};
 Circle(8) = {10, 9, 11};
 Circle(9) = {20, 5, 1};
 Circle(10) = {1, 5, 17};
 Circle(11) = {16, 5, 7};
 Circle(12) = {7, 5, 19};
 Circle(13) = {19, 5, 3};
 Circle(14) = {3, 5, 16};
 Circle(15) = {15, 5, 6};
 Circle(16) = {6, 5, 18};
 Circle(17) = {18, 5, 4};
 Circle(18) = {4, 5, 15};
 Line(30) = {21, 22};
 Circle(31) = {22, 26, 27};
 Circle(32) = {27, 26, 32};
 Line(33) = {32, 36};
 Circle(34) = {36, 40, 41};
 Circle(35) = {41, 40, 21};
 Circle(36) = {49, 26, 51};
 Circle(37) = {51, 26, 56};
 Circle(38) = {56, 26, 61};
 Circle(39) = {61, 26, 49};
 Circle(40) = {69, 40, 71};
 Circle(41) = {71, 40, 76};
 Circle(42) = {76, 40, 81};
 Circle(43) = {81, 40, 69};
 Line(45) = {13, 21};
 Line(46) = {17, 22};
 Line(50) = {1, 27};
 Line(54) = {20, 32};
 Line(58) = {14, 36};
 Line(62) = {2, 41};
 Line(69) = {16, 49};
 Line(70) = {3, 51};
 Line(74) = {19, 56};
 Line(78) = {7, 61};
 Line(85) = {11, 69};
 Line(86) = {10, 71};
 Line(90) = {12, 76};
 Line(94) = {8, 81};
 Circle(106) = {102, 26, 104};
 Circle(107) = {104, 26, 109};
 Circle(108) = {109, 26, 114};
 Circle(109) = {114, 26, 102};
 Line(127) = {4, 102};
 Line(128) = {18, 104};
 Line(132) = {6, 109};
 Line(136) = {15, 114};

Circle(144) = {115, 116, 117};
 Circle(145) = {117, 116, 122};
 Circle(146) = {122, 116, 127};
 Circle(147) = {127, 116, 115};
 Circle(148) = {135, 116, 137};
 Circle(149) = {137, 116, 142};
 Circle(150) = {142, 116, 147};
 Circle(151) = {147, 116, 135};
 Line(153) = {49, 115};
 Line(154) = {61, 117};
 Line(158) = {56, 122};
 Line(162) = {51, 127};
 Line(169) = {102, 135};
 Line(170) = {104, 137};
 Line(174) = {109, 142};
 Line(178) = {114, 147};
 Circle(186) = {148, 149, 150};
 Circle(187) = {150, 149, 155};
 Circle(188) = {155, 149, 160};
 Circle(189) = {160, 149, 148};
 Circle(190) = {168, 149, 170};
 Circle(191) = {170, 149, 175};
 Circle(192) = {175, 149, 180};
 Circle(193) = {180, 149, 168};
 Line(195) = {16, 148};
 Line(196) = {7, 150};
 Line(200) = {19, 155};
 Line(204) = {3, 160};
 Line(211) = {4, 168};
 Line(212) = {18, 170};
 Line(216) = {6, 175};
 Line(220) = {15, 180};
 Line Loop(26) = {1, -10, -9, 2, -4, -3, -14, -13, -12, -11, -8, -7, -6, -5};
 Plane Surface(26) = {26};
 Line Loop(28) = {11, 12, 13, 14, -17, -16, -15, -18};
 Plane Surface(28) = {28};
 Line Loop(47) = {1, 46, -30, -45};
 Ruled Surface(47) = {47};
 Line Loop(51) = {-10, 50, -31, -46};
 Ruled Surface(51) = {51};
 Line Loop(55) = {-9, 54, -32, -50};
 Ruled Surface(55) = {55};
 Line Loop(59) = {2, 58, -33, -54};
 Ruled Surface(59) = {59};
 Line Loop(63) = {-4, 62, -34, -58};
 Ruled Surface(63) = {63};
 Line Loop(67) = {-3, 45, -35, -62};
 Ruled Surface(67) = {67};
 Line Loop(71) = {-14, 70, -36, -69};
 Ruled Surface(71) = {71};
 Line Loop(75) = {-13, 74, -37, -70};
 Ruled Surface(75) = {75};
 Line Loop(79) = {-12, 78, -38, -74};
 Ruled Surface(79) = {79};
 Line Loop(83) = {-11, 69, -39, -78};
 Ruled Surface(83) = {83};
 Line Loop(87) = {-8, 86, -40, -85};
 Ruled Surface(87) = {87};

Line Loop(91) = {-7, 90, -41, -86};
 Ruled Surface(91) = {91};
 Line Loop(95) = {-6, 94, -42, -90};
 Ruled Surface(95) = {95};
 Line Loop(99) = {-5, 85, -43, -94};
 Ruled Surface(99) = {99};
 Line Loop(100) = {30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43};
 Plane Surface(100) = {100};
 Line Loop(129) = {-17, 128, -106, -127};
 Ruled Surface(129) = {129};
 Line Loop(133) = {-16, 132, -107, -128};
 Ruled Surface(133) = {133};
 Line Loop(137) = {-15, 136, -108, -132};
 Ruled Surface(137) = {137};
 Line Loop(141) = {-18, 127, -109, -136};
 Ruled Surface(141) = {141};
 Line Loop(142) = {-39, -38, -37, -36, 106, 107, 108, 109};
 Plane Surface(142) = {142};
 Line Loop(155) = {-39, 154, -144, -153};
 Ruled Surface(155) = {155};
 Line Loop(159) = {-38, 158, -145, -154};
 Ruled Surface(159) = {159};
 Line Loop(163) = {-37, 162, -146, -158};
 Ruled Surface(163) = {163};
 Line Loop(167) = {-36, 153, -147, -162};
 Ruled Surface(167) = {167};
 Line Loop(171) = {106, 170, -148, -169};
 Ruled Surface(171) = {171};
 Line Loop(175) = {107, 174, -149, -170};
 Ruled Surface(175) = {175};
 Line Loop(179) = {108, 178, -150, -174};
 Ruled Surface(179) = {179};
 Line Loop(183) = {109, 169, -151, -178};
 Ruled Surface(183) = {183};
 Line Loop(184) = {144, 145, 146, 147, 148, 149, 150, 151};
 Plane Surface(184) = {184};
 Line Loop(197) = {11, 196, -186, -195};
 Ruled Surface(197) = {197};
 Line Loop(201) = {12, 200, -187, -196};
 Ruled Surface(201) = {201};
 Line Loop(205) = {13, 204, -188, -200};
 Ruled Surface(205) = {205};
 Line Loop(209) = {14, 195, -189, -204};
 Ruled Surface(209) = {209};
 Line Loop(213) = {-17, 212, -190, -211};
 Ruled Surface(213) = {213};
 Line Loop(217) = {-16, 216, -191, -212};
 Ruled Surface(217) = {217};
 Line Loop(221) = {-15, 220, -192, -216};
 Ruled Surface(221) = {221};
 Line Loop(225) = {-18, 211, -193, -220};
 Ruled Surface(225) = {225};
 Line Loop(226) = {186, 187, 188, 189, 190, 191, 192, 193};
 Plane Surface(226) = {226};
 Surface Loop(1) = {26, 100, 47, 51, 55, 59, 63, 67, 71, 75, 79, 83, 87, 91, 95, 99};
 Volume(1) = {1};
 Surface Loop(2) = {28, 142, 83, 79, 75, 71, 129, 133, 137, 141};
 Volume(2) = {2};

Surface Loop(3) = {142, 184, 155, 159, 163, 167, 171, 175, 179, 183};
Volume(3) = {3};
Surface Loop(4) = {28, 226, 197, 201, 205, 209, 213, 217, 221, 225};
Volume(4) = {4};
Physical Surface(229) = {129, 133, 137, 141};
Physical Surface(230) = {95, 99};
Physical Volume(227) = {1, 2, 3, 4};