



Implementación de un modelo de fractura ortótropo en Phase-Field incluyendo distintos mecanismos de fallo

Antonio R. Quiñonero Moya, Diego Infante García, José E. Tarancón, Eugenio Giner

Instituto Universitario de Ingeniería Mecánica y Biomecánica – I2MB, Departamento de Ingeniería Mecánica y de Materiales, Universitat Politècnica de València, Camino de Vera s/n, 46022 Valencia, España

anquomo@upv.es, dieingar@upv.es, jetaranc@mcm.upv.es, eginerm@mcm.upv.es

La predicción del fallo en materiales compuestos se ha convertido en un campo de gran importancia debido al creciente uso de los mismos. Uno de los mayores incrementos se encuentra en el sector aeronáutico, donde debido a sus magníficas propiedades específicas se convierten en candidatos ideales para la fabricación de aeronaves. Los altos estándares de seguridad requeridos en dicho sector hacen necesaria una profunda comprensión de los mecanismos de fallo de los mismos. Los ensayos experimentales destructivos son muy costosos económicamente, por lo que en la actualidad se trabaja en modelos numéricos con alta capacidad predictiva.

Dentro de los modelos numéricos, en este trabajo se ha seleccionado el enfoque variacional de fractura Phase-Field para modelizar el fallo de este tipo de materiales. Este modelo consiste en la representación de las grietas mediante una variable continua regularizada a lo largo de una longitud característica. La formulación original de dicho modelo únicamente es válida para materiales cuya respuesta a la fractura sea isótropa (i.e. su resistencia a la fractura no dependa de la orientación de la misma). Por lo tanto, es necesaria una extensión a materiales cuya tenacidad no sea isótropa. En la literatura, existen dos formas de considerar la respuesta no isótropa de la fractura en Phase-Field: mediante anisotropía de las propiedades resistentes cambiando la longitud característica por un tensor estructural característico conservando una única variable de Phase-Field o utilizando diversas variables de Phase-Field (una variable y una tenacidad por mecanismo de fallo) y realizando una degradación no isótropa de las propiedades constitutivas del material. La segunda opción ha sido seleccionada en este trabajo. Además, debido a la imposibilidad de implementar una variable histórica que evite la disminución de daño en este modelo, se ha optado por imponer una restricción del crecimiento del daño mediante multiplicadores de Lagrange. La implementación se ha llevado a cabo en el software de elementos finitos Abaqus mediante una combinación de subrutinas UEL y UMAT para materiales ortótropos. Este enfoque permite capturar de forma más precisa los distintos mecanismos de fallo y propagación de las grietas que en el caso de conservar una única variable de Phase-Field.

1. Introducción

Durante la última década, el enfoque variacional de la mecánica de la fractura conocido como *Phase Field* (PF), ha atraído la atención de la comunidad científica por su capacidad para modelizar la propagación e iniciación de grietas en modelos complejos. Este enfoque variacional fue presentado por primera vez por Francfort y Marigo [1] y adaptado a su uso en modelos numéricos mediante la regularización propuesta por Bourdin [2,3]. Este modelo se basa en la representación de las grietas mediante una variable de daño continua. Algunas de las ventajas de este enfoque son la capacidad de predecir la propagación de grietas sin un camino predefinido y su consistencia termodinámica. Sin embargo, presenta algunas limitaciones, como la generación de grietas bajo estados de compresión, para lo que se han propuesto distintas descomposiciones de la densidad de energía de deformación [4–6] o su alto coste computacional para cumplir el principio de la Γ -convergencia que rige la regularización de la energía de fractura.

El creciente uso de materiales compuestos a nivel industrial ha impulsado un gran esfuerzo en la investigación de su fallo con el objetivo de optimizar costes y procesos asociados a los mismos. Las técnicas numéricas permiten profundizar en el ahorro de estos costes permitiendo el análisis de diversas configuraciones de los componentes o casos de carga sin la necesidad de fabricar y ensayar todos los casos. Los plásticos reforzados con fibra y, en concreto, los laminados conformados por láminas unidireccionales, presentan un comportamiento ortótropo o transversalmente isótropo. La aplicación del modelo de PF a materiales ortótropos requiere algunas modificaciones con respecto a la formulación inicial. Existen dos enfoques principales: por un lado, la consideración de propiedades resistentes no isótropas mediante la inclusión de un tensor estructural en la función de densidad de grieta [7]. Este modelo conserva una única variable de daño del material e impone direcciones de propagación de grieta preferentes o prohibidas. Por otra parte, se pueden encontrar los modelos que consideran varias variables de daño y degradación no isótropa de la matriz constitutiva [8]. Ambos enfoques han sido comparados en la literatura [9] e, incluso, combinados [10].

En este trabajo, se presenta una implementación de un modelo con varias variables de PF [8] en el código de elementos finitos Abaqus. Además, se ha estudiado la inclusión de la irreversibilidad para las variables de daño mediante el uso de una restricción aplicada con multiplicadores de Lagrange. Finalmente, se han utilizado dos modelos numéricos de materiales ortótropos para evaluar el desempeño del modelo de PF seleccionado.

2. Formulación

El presente trabajo presenta una implementación del modelo de PF presentado por Bleyer y Alessi [8] en el software comercial de elementos finitos Abaqus mediante una subrutina de elemento de usuario UEL. Este modelo consta de una degradación anisótropa de las propiedades elásticas del material mediante el uso de distintas variables de daño para distintos mecanismos de fallo del material analizado. Además, tiene en cuenta la aportación de la energía de fractura de los distintos mecanismos en el potencial energético. Dicho potencial energético está representado por la Ecuación (1).

$$\Pi = \int_{\Omega} \psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \phi_1, \dots, \phi_n) dV + \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} G_{ic} \gamma_i(\phi_i, \nabla \phi_i) dV \quad (1)$$

Donde ϕ_i representa la variable de daño de PF para el mecanismo de fractura i , G_{ic} es la tasa crítica de liberación de energía asociada al mecanismo de fallo i y $\boldsymbol{\varepsilon}$ es el campo de deformaciones. Por su parte, ψ es la densidad de energía de deformación de cada punto material. Este trabajo se ha limitado al caso bidimensional con dos mecanismos de fallo, tomando la densidad de energía de deformación la forma mostrada en la Ecuación (2).

$$\psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \phi_1, \phi_2) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \begin{pmatrix} (1 - \phi_1)^2 C_{11} & (1 - \phi_1)(1 - \phi_2) C_{12} & 0 \\ (1 - \phi_1)(1 - \phi_2) C_{12} & (1 - \phi_2)^2 C_{22} & 0 \\ 0 & 0 & (1 - \phi_1)(1 - \phi_2) C_{66} \end{pmatrix} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2)$$

Finalmente, γ_i es la función de densidad de grieta del mecanismo de fallo i . En este trabajo, se ha considerado el modelo de fallo cuadrático conocido como AT2 propuesto por Bourdin [2], en el que γ_i toma la forma mostrada en la Ecuación (3):

$$\gamma_i(\phi_i, \nabla \phi_i) = \frac{1}{2l_0} (\phi_i^2 + l_0^2 \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_i) \quad (3)$$

donde l_0 es la longitud característica del modelo de PF, que en este trabajo ha sido tratada como un parámetro numérico.

Es habitual introducir una condición de irreversibilidad del daño, pues los distintos modelos de PF no aseguran dicho fenómeno de manera natural. La forma más usual de establecer la irreversibilidad es la introducción de una variable histórica que registre el valor máximo acumulado en la densidad de energía de deformación y utilizar este valor como la densidad de energía de deformación que se utiliza en la ecuación de evolución [11]. Sin embargo, las distintas ecuaciones de evolución del presente modelo están influidas por ambas variables de daño y la densidad de energía de deformación sin degradar no aparece explícitamente en ellas, por lo que no se puede aplicar el

enfoque anterior. En este trabajo, se ha impuesto la irreversibilidad como una restricción mediante multiplicadores de Lagrange siguiendo el trabajo de Molnár *et al.* [12]. Esta técnica también ha sido utilizada para imponer una restricción al valor máximo admisible de las variables de daño, siendo este de 1. Teniendo en cuenta estas restricciones, el potencial energético a minimizar quedaría modificado tal y como se muestra en la Ecuación (4), donde los términos λ_i son los multiplicadores asignados a la restricción de irreversibilidad y los términos κ_i son los multiplicadores asignados a la restricción de $\phi \leq 1$. Los multiplicadores actúan como grados de libertad del problema modificando el residuo y la matriz de rigidez del elemento cuando se viola la restricción o si el valor de los multiplicadores es positivo.

$$\Pi^{\text{res}} = \Pi - \sum_i \lambda_i \Delta \phi_i - \sum_i \kappa_i (1 - \phi_i) \quad (4)$$

La implementación utiliza un esquema de resolución de tipo *staggered*, que consiste en la resolución independiente del problema mecánico y del problema de PF, tal y como se presenta en [12]. Este tipo de algoritmo permite resolver problemas más complejos en los que no es posible encontrar soluciones con un esquema de resolución monolítico, que resuelve las ecuaciones correspondientes al problema mecánico y de PF simultáneamente. La dificultad de convergencia en el solver monolítico radica en la no convexidad del potencial energético al tener en cuenta todos los grados de libertad del mismo. Para aplicar el solver *staggered*, se utilizan dos capas coincidentes de elementos, una capa de elementos de propios de Abaqus donde se resuelve el problema mecánico mediante un material de usuario programado en una subrutina UMAT y otra capa de elementos de usuario en la que se resuelve el problema de PF mediante un elemento de usuario programado en una subrutina UEL. El problema mecánico toma el valor de las variables de PF del incremento anterior, actualiza el valor de desplazamientos obtenido y este valor se guarda y se comunica al elemento de usuario para el incremento siguiente. En el elemento de usuario ocurre el mismo proceso, pero actualizando el valor de las variables de daño y los desplazamientos obtenidos en el incremento anterior.

En este trabajo, se han utilizado una capa de elementos hexaédricos lineales de integración completa y tensión plana (CPS4) para resolver el problema mecánico con un material de usuario y otra capa superpuesta de elementos de usuario hexaédricos lineales con los mismos cuatro puntos de integración del elemento CPS4 para resolver la ecuación de PF.

Se han planteado dos problemas básicos para verificar el correcto funcionamiento de la formulación propuesta: por una parte, un modelo consistente en un único elemento para evaluar el correcto funcionamiento de las dos direcciones consideradas. Por otra parte, un modelo consistente en una placa plana con una grieta generada explícitamente (mediante una discontinuidad en el dominio). Ambos modelos son cuadrados con 1mm de longitud y, en el caso de la placa con grieta, se ha considerado una grieta inicial de 0.5mm. Además, el modelo de la placa se ha mallado con una malla estructurada de 40000 elementos en cada capa. Se han considerado las propiedades elásticas y resistentes ortótropas mostradas en la Tabla 1 para el material, siendo estas tomadas de una lámina unidireccional de material compuesto [13]. La tasa crítica de liberación de energía en dirección 1 (fallo de las fibras) se ha reducido un orden de magnitud respecto a su valor en la literatura para promover el fallo del material en dicha dirección. Los autores remarcan aquí que no se pretende simular el comportamiento de dicho material, sino que el objetivo de este trabajo es la verificación del modelo numérico. Además, se han considerado distintas orientaciones del material con respecto a la carga. Finalmente, el valor de la longitud característica se ha elegido de forma que se cumpla la relación $l_0/h_e = 4$ en el modelo de la placa con grieta. Se ha considerado la misma longitud característica para los dos mecanismos de fallo. El incremento de desplazamiento seleccionado en todos los modelos ha sido de una milésima parte del desplazamiento final.

Tabla 1: Propiedades del material ortótropo utilizado en los modelos.

E₁ (GPa)	E₂ (MPa)	ν_{12}	G₁₂ (MPa)	G_{1c} (N/mm)	G_{2c} (N/mm)	l_{0,1} (mm)	l_{0,2} (mm)
171	9080	0.32	5290	9.78	0.277	0.02	0.02

3. Resultados y discusión

3.1. Modelo de un elemento

Con el objetivo de evaluar el comportamiento de la implementación con un modelo sencillo, se ha sometido a un único elemento a condiciones de tracción mediante un control en desplazamientos. Además, se han utilizado dos orientaciones de la dirección de mayor rigidez, paralela a la carga y perpendicular a la misma.

La Figura 1 muestra la evolución de las tensiones y de la variable de fallo que actúan en dirección de la carga. La evolución de estas tensiones y variables de fallo es similar a la que se obtendría con un modelo isótropo, con una zona en la que el material no presenta una gran acumulación de daño y la tensión va creciendo con la deformación hasta llegar a la carga máxima soportada por el elemento, seguida de la disminución de la carga que el material puede soportar conforme aumenta el daño. Por su parte, la variable de daño es creciente durante todo el proceso

Implementación de un modelo de fractura ortótropo en Phase-Field incluyendo distintos mecanismos de fallo de carga. La característica más importante es que el modelo es capaz de reproducir distintas cargas máximas del material para las distintas direcciones del material ortótropo.

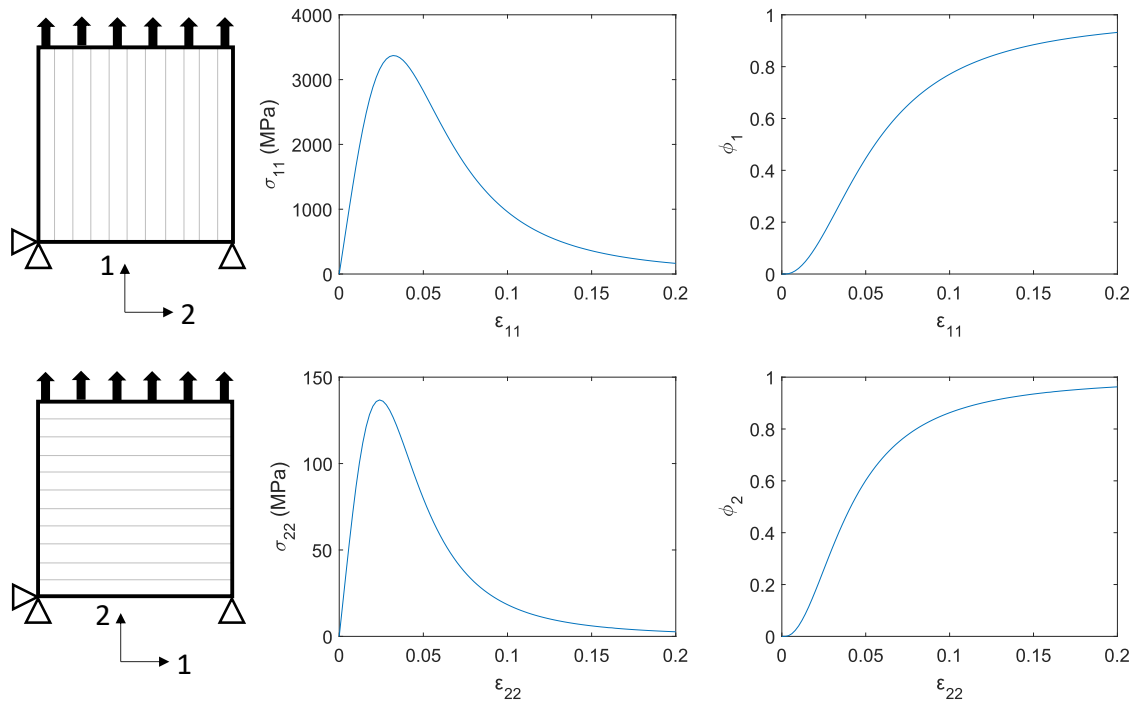


Figura 1: Evolución de la tensión y variable de daño asociadas a la dirección de carga para un único elemento.

Por otra parte, resulta interesante estudiar el comportamiento de la dirección perpendicular a la carga para ambas orientaciones. En la Figura 2, se muestra la evolución de la deformación perpendicular a la carga y de su variable de fallo asociada. Como puede apreciarse, existe un acoplamiento entre la deformación en la dirección de carga y la perpendicular que se debe a los efectos del coeficiente de Poisson. Este acoplamiento es un orden de magnitud más importante en el caso en que se carga en la dirección de mayor rigidez del material. El hecho de que la deformación perpendicular a la carga decrezca (en magnitud) al aumentar la propia carga se debe al hecho de que la variable de daño asociada a la dirección de carga afecta a los términos de la matriz constitutiva que controlan el efecto del coeficiente de Poisson. Por ello, al desarrollarse el daño en dirección de la carga, este efecto se va perdiendo paulatinamente. Por otra parte, la aparición de daño en dirección perpendicular de la carga se puede deber a que no se ha implementado ninguna descomposición de la energía de deformación, por lo que los estados de deformación negativa también producen daño. Además, se puede apreciar como al disminuir el efecto de Poisson y, por lo tanto, disminuir el módulo de la deformación perpendicular a la carga, también decrece la variable de daño asociada a dicha dirección, siempre que no se haya implementado la irreversibilidad. En el caso contrario, la variable de daño asociada al mecanismo perpendicular a la dirección de carga conservaría el máximo valor que hubiera alcanzado.

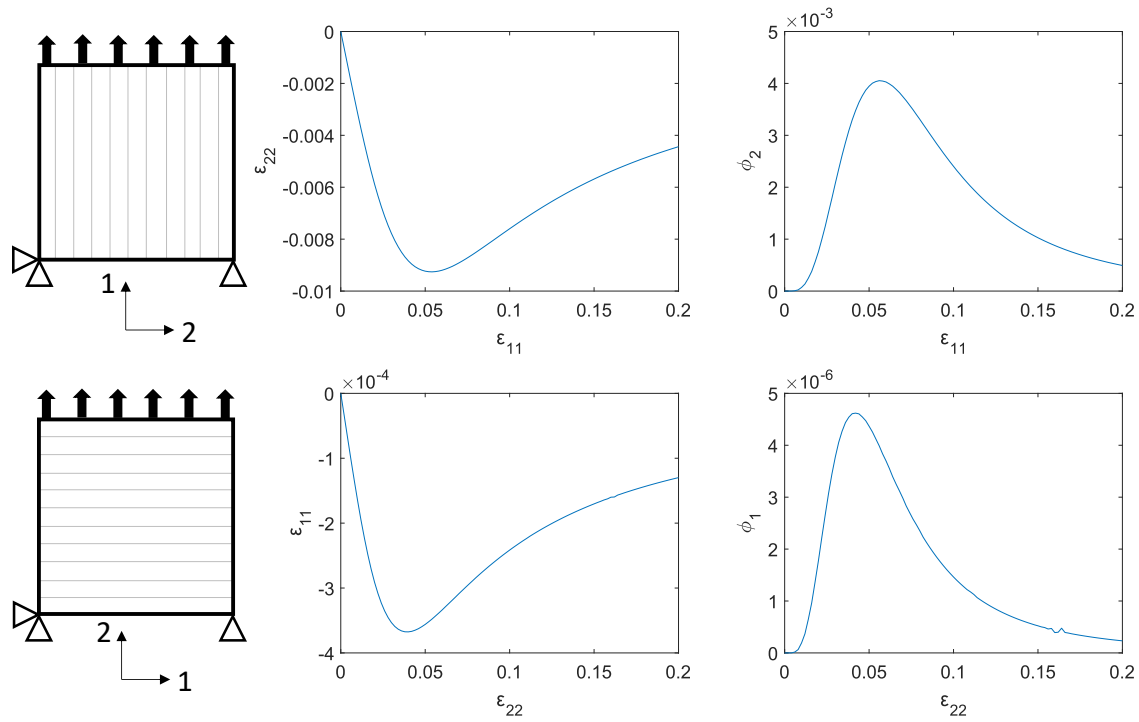


Figura 2: Evolución de la tensión y variable de daño asociadas a la dirección perpendicular a la carga para un único elemento.

3.2. Modelo de placa plana con pregrieta

En este caso, se han considerado tres orientaciones: fibras horizontales y paralelas a la pregrieta, fibras a 45 grados con respecto a la pregrieta y, finalmente, fibras verticales y perpendiculares a la pregrieta. Se ha tomado únicamente el caso de carga a tracción vertical.

La Figura 3 muestra el campo de la variable de fallo transversal al final de la carga a tracción vertical del material. Cabe destacar que el fallo del modelo se ha producido por el mecanismo de fallo asociado a la dirección transversal (menos rígida y tenaz), incluso en el caso de fibras verticales en la dirección de la carga. La relación de las tasas críticas de liberación de energía seleccionadas para simular ambos mecanismos de fallo controla el efecto del crack kinking [8] y, en caso de que se desee modelizar un material real, sería necesario llevar a cabo una calibración de las mismas. Asimismo, se puede apreciar que la fractura tiene tendencia a seguir la orientación más rígida del material para el conjunto de parámetros utilizado.

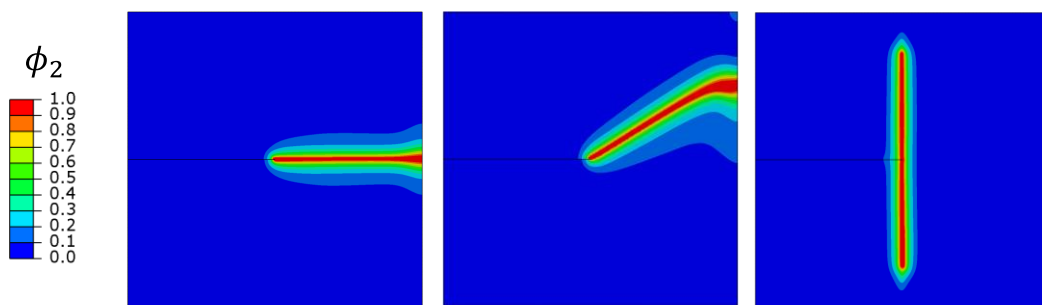


Figura 3: Campo de la variable de daño transversal para carga de tracción vertical y orientación de la dirección longitudinal con respecto a la horizontal. 0° (izquierda), 45° (centro) y 90° (derecha).

La Figura 4 muestra las curvas de carga-desplazamiento obtenidas para los casos de carga verticales en las distintas configuraciones del material. Se puede observar que el modelo utilizado es capaz de predecir una mayor resistencia del material cuanto más alineada se encuentra la carga con la dirección de mayor resistencia del mismo, tal y como sucedería en un material real. Por otra parte, se puede apreciar que el fallo transversal del material afecta de manera menos severa a la capacidad de la dirección longitudinal de soportar la carga.

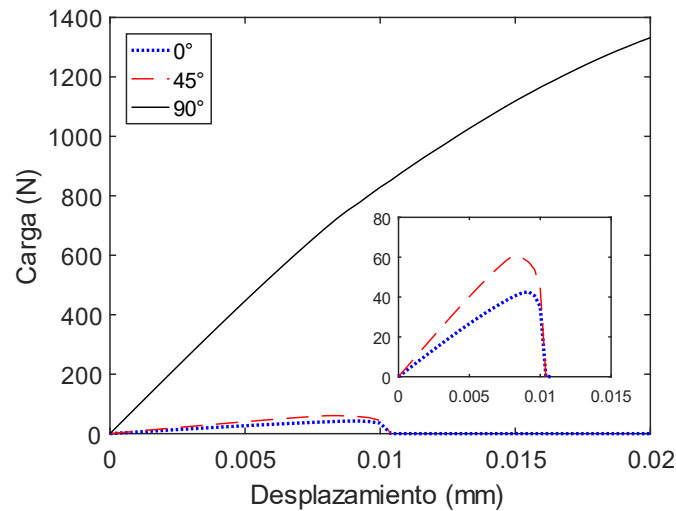


Figura 4: Curvas carga-desplazamiento para distintas orientaciones del material sometido a tracción. La orientación se corresponde con la dirección de mayor rigidez del material y se mide respecto a la horizontal.

La introducción de la pregrieta queda abierta a futuras investigaciones. Es habitual utilizar una de las cuatro posibilidades siguientes: introducción explícita de la pregrieta (seleccionada en este trabajo), introducción mediante condiciones de contorno de Dirichlet, introducción mediante un valor inicial de la densidad de energía de deformación y, finalmente, combinación de la introducción explícita y las condiciones de contorno de Dirichlet. Como se ha demostrado en la literatura [14], la última opción es la que ofrece mejores resultados en cuanto a la energía de fractura generada durante la evolución de la grieta. Sin embargo, no existe una metodología para introducir las condiciones de contorno de forma clara en el caso en que la pregrieta no esté perfectamente alineada con las direcciones principales del material. Por ello, se ha restringido el presente trabajo a introducir geoméricamente la discontinuidad de forma explícita.

La calibración del modelo no requiere la inclusión de un parámetro como el tensor estructural presentado en [7], cuya definición está abierta a debate en la literatura, estando ligada a las propiedades resistentes [8], a las longitudes características estimadas para distintos mecanismos de fallo [13] o incluso siendo tratado como un parámetro de escala [15]. Este tensor, además, modifica la longitud característica del fallo en distintas direcciones de una forma rígida, no permitiendo la libertad del presente modelo de asignar a cada mecanismo de fallo una tasa crítica de liberación de energía y una longitud característica determinadas.

4. Conclusiones

Se ha implementado un modelo de PF con degradación anisótropa y distintas variables de daño para representar los distintos mecanismos de fallo presentes en un material ortótropo en el software comercial de elementos finitos Abaqus. El modelo ha demostrado su capacidad para simular las propiedades elásticas y resistentes ortótropas del material seleccionado, así como la propagación de grietas de acuerdo a estas direcciones.

Se han implementado la irreversibilidad del daño y una restricción adicional para limitar el valor máximo de las variables de daño mediante el uso de multiplicadores de Lagrange. Se ha seleccionado este método por la imposición fuerte de las restricciones y, en el caso de la irreversibilidad, debido a que el enfoque basado en aplicar una variable histórica de la densidad de energía de deformación no es válido en este modelo. Los multiplicadores aumentan el coste computacional del modelo de manera considerable, por lo que se están estudiando otras técnicas como la regularización para imponer estas restricciones sin las que el modelo arroje resultados inverosímiles.

De cara al futuro, queda abierto un estudio exhaustivo del efecto de utilizar distintas relaciones de tasa crítica de liberación de energía o longitudes características, obviadas en este trabajo. Por otra parte, se está llevando a cabo una campaña experimental con materiales compuestos que será simulada mediante el presente modelo. Se espera incluir también el fallo por delaminación como un tercer mecanismo de fallo independiente, de forma que no se necesiten técnicas adicionales al PF para modelizar este tipo de fallo.

Agradecimientos

Los autores desean agradecer la financiación recibida a través del proyecto PID2023-151610OB-C22 financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y FEDER, UE. También desean agradecer la ayuda PRE2021-097626 financiada por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y por el FSE+.

Referencias

- [1] Francfort G.A., Marigo J.-J., “Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem”, *J Mech Phys Solids* **46**, 1319–1342 (1998)
- [2] Bourdin B., Francfort G.A., Marigo J.J., “The variational approach to fracture”, *J Elast* **91**, 5–148 (2008)
- [3] Bourdin B., Francfort G.A., Marigo J.-J., “Numerical experiments in revisited brittle fracture”, *J Mech Phys Solids* **48**, 797–826 (2000)
- [4] Miehe C., Welschinger F., Hofacker M., “Thermodynamically consistent phase-field models of fracture: Variational principles and multi-field FE implementations”, *Int J Numer Methods Eng* **83**, 1273–1311 (2010)
- [5] Amor H., Marigo J.J., Maurini C., “Regularized formulation of the variational brittle fracture with unilateral contact: Numerical experiments”, *J Mech Phys Solids* **57**, 1209–1229 (2009)
- [6] Freddi F., Royer-Carfagni G., “Variational fracture mechanics to model compressive splitting of masonry-like materials”, *Annals of Solid and Structural Mechanics* **2**, 57–67 (2011)
- [7] Teichtmeister S., Kienle D., Aldakheel F., Keip M.A., “Phase field modeling of fracture in anisotropic brittle solids”, *Int J Non Linear Mech* **97**, 1–21 (2017)
- [8] Bleyer J., Alessi R., “Phase-field modeling of anisotropic brittle fracture including several damage mechanisms”, *Comput Methods Appl Mech Eng* **336**, 213–236 (2018)
- [9] Scherer J.M., Brach S., Bleyer J., “An assessment of anisotropic phase-field models of brittle fracture”, *Comput Methods Appl Mech Eng* **395**, 115036 (2022)
- [10] Nguyen T.T., Réthoré J., Baietto M.C., “Phase field modelling of anisotropic crack propagation”, *European Journal of Mechanics, A/Solids* **65**, 279–288 (2017)
- [11] Miehe C., Hofacker M., Welschinger F., “A phase field model for rate-independent crack propagation: Robust algorithmic implementation based on operator splits”, *Comput Methods Appl Mech Eng* **199**, 2765–2778 (2010)
- [12] Molnár G., Doitrand A., Jacon A., Prabel B., Gravouil A., “Thermodynamically consistent linear-gradient damage model in Abaqus”, *Eng Fract Mech* **266**, 108390 (2022)
- [13] Quintanas-Corominas A., Reinoso J., Casoni E., Turon A., Mayugo J.A., “A phase field approach to simulate intralaminar and translaminar fracture in long fiber composite materials”, *Compos Struct* **220**, 899–911 (2019)
- [14] Infante-García D., Quiñonero-Moya A.R., Álvarez-Blanco M., Giner E., “Verification of strain energy splits of phase field fracture model using Westergaard’s problem under mixed-mode loading”, *Eng Fract Mech* **308**, 110371 (2024)
- [15] Mitrou A., Arteiro A., Reinoso J., Camanho PP., “Modeling fracture of multidirectional thin-ply laminates using an anisotropic phase field formulation at the macro-scale”, *Int J Solids Struc t* **273**, 112221 (2023)