



Metodología experimental para determinar parámetros de fractura en simulaciones basadas en el método phase-field

Mario Álvarez-Blanco¹, Diego Infante-García², Miguel Marco¹, B. Emek Abali³, Christina Völlmecke⁴

¹ Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad Carlos III de Madrid, marioab@pa.uc3m.es, mimarcoe@ing.uc3m.es

² Instituto de Ingeniería Mecánica y Biomecánica, Departamento de Ingeniería Mecánica y de Materiales, Universitat Politècnica de València, dieingar@upv.es

³ Division of Applied Mechanics, Department of Materials Science and Engineering, Uppsala University, bilenemek@abali.org

⁴ Stability and Failure of functionally optimized Structures Group, Institute of Mechanics, Technische Universität Berlin, christina.voellmecke@tu-berlin.de

La relevancia del método phase-field se ha visto incrementada en simulaciones de la mecánica de la fractura para predecir la propagación de grieta a partir de un problema de minimización del balance de la energía relativamente simple. Sin embargo, este método computacional requiere que ciertos parámetros, como la tasa de liberación de energía crítica y la longitud característica, se definan previamente. Por ello, se presenta una metodología experimental a partir de ensayos de tracción uniaxial para caracterizar mecánicamente el material estudiado y determinar los parámetros de fractura necesarios para el modelo numérico. En primer lugar, para los ensayos experimentales se fabricaron probetas de tracción con y sin entalla mediante impresión 3D. En el proceso se utilizó filamento de ácido poliláctico y se aplicaron distintas configuraciones para analizar su influencia sobre los mecanismos de fractura y reducir defectos de impresión. Por otro lado, se desarrolló una herramienta numérica predictiva de código abierto basada en el modelo phase-field de fractura, empleando los parámetros obtenidos experimentalmente. Aparte, se evaluaron el efecto del parámetro de longitud característica sobre los resultados numéricos y la implementación de diferentes mejoras en el modelo para reducir el coste computacional. Los parámetros obtenidos a partir de los ensayos experimentales fueron validados con la literatura. Además, las simulaciones confirmaron la fiabilidad de la metodología experimental-numérica propuesta. En general, se obtuvieron resultados numéricos con errores relativos por debajo del 10%. Por último, el método presentado permite su aplicación de forma sencilla para otros materiales y estudios.

1. Introducción

La mecánica de daño es un enfoque continuo, en el que partículas adyacentes presentan una deformación continua hasta que la fractura genera una discontinuidad entre ellas. Este planteamiento introduce una nueva variable cuya evolución es definida por una ecuación constitutiva adicional a nivel microscópico para estimar la nucleación del fallo en la geometría a nivel macroscópico. Se trata de un problema multiescalar para la evolución del daño, modelizado a partir de un campo escalar como variable de daño [1-3]. Además, la mecánica de la fractura considera que la evolución del daño es irreversible en materiales ingenieriles. Como solución a la discontinuidad, el método phase-field introduce la variable de daño (o parámetro phase-field) ω definida por una función continua y tomando valores entre 0 y 1, siendo 0 para el material intacto y 1 para la fractura completa. De esta forma, el fallo se modeliza como un campo difuso sin la necesidad de definir las superficies de fractura de forma explícita [4-5]. Cabe destacar que este método ya ha sido ampliamente utilizado para la simulación de propagación de grietas [6], el comportamiento de materiales dúctiles [7] y la evolución del daño por fatiga [8]. Sin embargo, aunque existen en la literatura problemas de referencia que permiten validar su implementación [9], ciertos parámetros de la formulación asociada todavía no se comprenden en profundidad.

Por otro lado, la fabricación aditiva (AM, por sus siglas en inglés) con polímeros ha alcanzado un alto grado de desarrollo y se ha vuelto relativamente económico, permitiendo su integración en numerosas aplicaciones. El uso de AM en investigación permite el estudio de una gran variedad de estructuras y materiales desde diferentes campos, como la mecánica de la fractura [10]. La técnica AM más utilizada es la extrusión de material (MEX, por sus siglas en inglés), en la que material fundido es depositado a través de una boquilla sobre una superficie horizontal, discretizando la geometría mediante capas [11]. En general, la técnica MEX con polímeros termoplásticos es un proceso de fabricación eficiente para prototipado, permitiendo diseños complejos. Sin embargo, los parámetros de impresión tienen una gran influencia en el comportamiento mecánico de la estructura resultante y esto debe ser considerado durante la fabricación [12].

La evolución de grietas en materiales poliméricos ya se ha estudiado en la literatura, también en estructuras impresas mediante MEX de diversos materiales. El principal objetivo de estos trabajos es la caracterización de la estructura impresa o la comparación de distintos parámetros de impresión, como la orientación de impresión, que afecta significativamente a los mecanismos de fallo [13]. Sin embargo, todavía no existen estándares ampliamente aceptados sobre cómo caracterizar la tenacidad a la fractura o la resistencia en componentes fabricados por impresión 3D. Por otro lado, existe cierta controversia en cómo definir correctamente ciertos parámetros en una simulación numérica de fractura con el método phase-field. En general, se emplean ensayos estandarizados referentes a otros métodos de fabricación para obtener la tasa de liberación de energía que conduce a un factor de intensidad de tensiones, pero su relación y correcta aplicación siguen siendo objeto de debate [14].

Con el fin de abordar los desafíos derivados de la aplicación de ciertos parámetros del material durante la modelización numérica, se propone una metodología experimental para obtener los parámetros requeridos utilizando una geometría simplificada y provocando la fractura de modo I (apertura). Para ello, se ha empleado la técnica MEX para fabricar probetas de ácido poliláctico (PLA, por sus siglas en inglés). A partir de ensayos de tracción uniaxial se determinan las propiedades elásticas del material y los parámetros asociados a la formulación de la mecánica de daño. Además, se desarrolla una implementación numérica de código abierto basada en el método de elementos finitos y el método phase-field de fractura tomando como referencia los ensayos experimentales para la validación de la metodología presentada.

2. Materiales y métodos

El trabajo se divide en dos partes: una metodología experimental basada en ensayos de tracción uniaxial para la obtención de propiedades mecánicas y parámetros de daño, y una metodología numérica basada en la aplicación del método phase-field de fractura a partir de los parámetros obtenidos experimentalmente.

2.1. Ensayos experimentales

La metodología experimental presentada se enfoca en la determinación de los parámetros necesarios para el método phase-field de fractura. Para ello, se consideraron probetas de tracción con geometrías simplificadas para facilitar la caracterización mecánica, el estudio de mecanismos de fractura y su fabricación. En primer lugar, se utilizó una probeta rectangular (RECT) para obtener las propiedades elásticas del material, evitando defectos de impresión potenciales que puedan afectar a la respuesta mecánica del componente. Por otro lado, para el análisis de fractura se necesita una probeta fisurada. Por lo tanto, se optó por una probeta de tracción con doble entalla simétrica (DENT, por sus siglas en inglés), utilizada en la literatura para el estudio de la fractura de modo I y la propagación de grieta a lo largo del ligamento entre las entallas [10]. La Figura 1 muestra los planos acotados de las probetas utilizadas en este trabajo.

Las probetas se fabricaron mediante la técnica MEX empleando el filamento de PLA *Luminy® LX930* de 1,75 mm de diámetro. Las geometrías se procesaron con el software *Ultimaker Cura*, y se fabricaron en la impresora 3D

Prusa i3 MKS3S+ con una boquilla de 0,4 mm de diámetro. El filamento de PLA es comúnmente utilizado en impresión 3D por su facilidad de impresión, disponibilidad y biodegradabilidad. En este trabajo, los parámetros de impresión se determinaron siguiendo las recomendaciones del fabricante para PLA, y con el objetivo de minimizar desviaciones dimensionales y defectos de impresión inherentes del proceso, como porosidad o sobreextrusión. Además, la orientación de impresión se alineó con la dirección axial de las probetas (0°) para reducir su impacto bajo cargas uniaxiales de tracción.

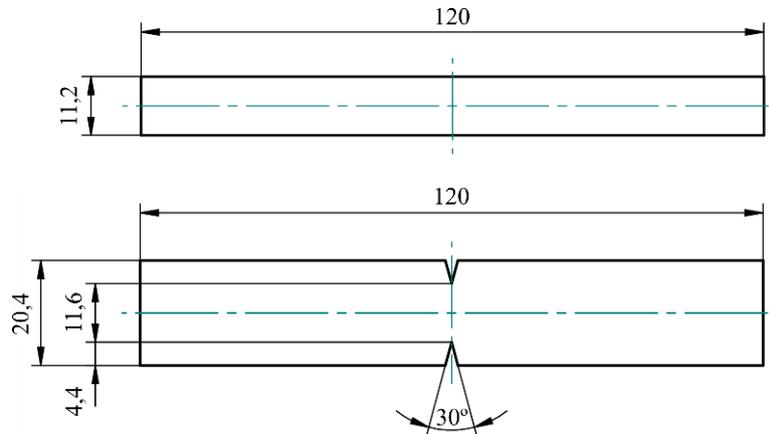


Figura 1: Planos acotados (en mm) de probetas RECT (arriba) y DENT (abajo). Espesor de 3 mm.

Aparte, la generación de las entallas de la probeta DENT se consideraron críticas para la nucleación de la grieta. Asumiendo una punta de grieta continua, se consideró una entalla impresa en lugar de una mecanizada con el fin de evitar defectos de impresión y una mayor variabilidad, como se indica en [15]. Por lo tanto, se aplicaron dos configuraciones de impresión diferentes para evaluar la influencia del proceso de fabricación sobre los resultados. Por un lado, se usó el diseño más simple sin paredes que definieran el perfil de las entallas (probeta DENT_W0), por lo que las superficies inclinadas de la entalla se encontraban discretizadas por la orientación de impresión aplicada. Por otro lado, también se fabricaron probetas DENT con una pared continua que perfila las entallas (probeta DENT_W1), como se estudió en [10]. Sin embargo, esta última configuración introduce inevitablemente un redondeo en las puntas de entalla de aproximadamente 0,2 mm de radio. La Figura 2 muestra las puntas de entalla resultantes para cada una de las configuraciones de impresión analizadas (DENT_W0 y DENT_W1).

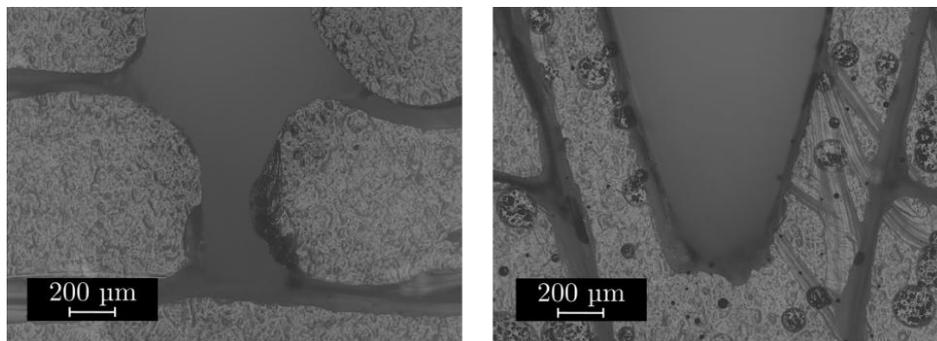


Figura 2: Puntas de entalla de las probetas DENT_W0 (izquierda) y DENT_W1 (derecha).

Antes de los ensayos, se establecieron ciertos requisitos que debían cumplir las probetas impresas para satisfacer la fiabilidad de la investigación: dimensiones precisas, porosidad mínima, zonas no sobreextruidas, entallas simétricas y bien definidas, y evitar recorridos del extrusor sobre el ligamento en las probetas DENT. En relación con los recorridos del extrusor sobre la pieza, este puede generar defectos sobre la capa superior, así como depositar residuos de filamento fundido, afectando a las siguientes capas. Como solución, se añadió un cilindro auxiliar junto a la probeta y, de esta forma, forzar que el recorrido final del extrusor al completar una capa se alejase de la zona de impresión de la probeta (y completar la capa correspondiente del cilindro).

Los ensayos de tracción uniaxial se llevaron a cabo en la máquina universal de ensayos Zwickiline Z2.5 equipada con una célula de carga de 2,5 kN y un sistema de garras manual. La velocidad del ensayo se estableció en 2 mm/min de forma constante para asegurar condiciones cuasiestáticas, siguiendo las normas ISO 527-4 [16] y ASTM D3039 [17]. Las probetas se colocaban dejando una zona libre de 60 mm de longitud entre las mordazas. Además, se utilizó un sistema de correlación digital de imágenes (DIC, por sus siglas en inglés) 2D para obtener el campo de desplazamientos completo durante los ensayos. Se ensayaron 6 probetas de cada configuración (RECT, DENT_W0 y DENT_W1) para alcanzar unos resultados fiables, por lo que se fabricaron un total de 18 probetas en este trabajo. En caso de que cualquier resultado se desviase demasiado (a partir de la desviación estándar del conjunto), la probeta correspondiente se descartaría para el estudio.

2.2. Implementación del método phase-field

El método phase-field de fractura se aplicó para la predicción del fallo frágil del material y la propagación de grieta, basándose en un problema de minimización de energía [18]. Este método regulariza la grieta discreta como un daño difuso al introducir el llamado parámetro phase-field ω , un escalar continuo que toma valores entre 0 (material intacto) y 1 (material fracturado), mediante la densidad de superficie de grieta $\gamma = \gamma(\omega, \omega_{,i})$ (la notación con coma denota derivada parcial en el espacio):

$$\int_B \psi \, dV = \int_B G_c \gamma \, dV \quad (1)$$

Donde la densidad de energía disipativa ψ es causada únicamente por la fractura (sin plasticidad), y la tasa de liberación de energía G_c mide la cantidad de energía disipable en el cuerpo continuo B . En el modelo de fractura frágil aplicado, la función γ se define como [19]:

$$\gamma(\omega, \omega_{,i}) = \frac{1}{c_\alpha \ell} (\alpha + \ell^2 \omega_{,i} \omega_{,i}); \quad c_\alpha = 4 \int_0^1 \alpha^{0.5} \, d\omega \quad (2)$$

El parámetro de longitud característica ℓ es necesario en la formulación y determina el ancho de la zona difusa del campo ω . En el caso de la constante normalizada c_α , su valor depende de la función geométrica de grieta $\alpha = \alpha(\omega) \in [0, 1]$. En este trabajo se utilizó una función lineal [20], siendo $\alpha(\omega) = \omega$ y, por lo tanto, $c_\alpha = 8/3$. Siguiendo una formulación variacional, a partir de (1) y (2) y otros términos se obtiene la forma débil del sistema. La formulación incluye la descomposición de la deformación elástica generada por tracción y compresión, permitiendo la aplicación del fallo únicamente por fuerzas de tracción y debilitando el material mediante la función cuadrática de degradación $g(\omega) = (1-\omega)^2$ [20]. En este caso, se considera un material frágil, isótropo y elástico lineal bajo condiciones cuasiestáticas, definiendo el daño de manera irreversible en el sistema.

Por lo tanto, teniendo todo esto en cuenta, se puede modelizar la evolución de la grieta a partir de G_c y ℓ definiendo ψ como:

$$\psi(\omega, \omega_{,i}) = \frac{3G_c}{8\ell} (\omega + \ell^2 \omega_{,i} \omega_{,i}) \quad (3)$$

Además, la implementación del método de elementos finitos requiere ciertos ajustes en la formulación. En primer lugar, la evolución del desplazamiento u_i y ω se discretizan en incrementos de tiempo Δt , que normalmente permanecen constantes durante la simulación. Aparte, el espacio se discretiza en nodos mediante el mallado del dominio. Siguiendo la investigación de Bourdin *et al.* [22], esta discretización por el mallado del modelo induce un incremento de la energía de fractura. Por lo tanto, G_c puede ser ajustado en función de ℓ y el tamaño de elemento h_e , para determinar su valor corregido $G_{c,corr}$ como:

$$G_{c,corr} = \frac{G_c}{1 + 3h_e/8\ell} \quad (4)$$

Finalmente, introduciendo los términos necesarios, aplicando las consideraciones descritas, integrando por partes y separando el problema de deformaciones y el problema de daño (u_i y ω como variables desconocidas, respectivamente), se obtienen las dos expresiones que definen el sistema para cada Δt . Para más información, el desarrollo completo de la formulación se encuentra detallado en [21].

La implementación numérica se llevó a cabo con el paquete de código abierto *SyFi* desarrollado en el proyecto *FEniCS* [23], siguiendo el enfoque computacional descrito en [24] y utilizando la plataforma *Visual Studio Code* para crear el código *Python*. El mallado de la geometría se realizó a través de la plataforma de código abierto *SALOME*, mientras que el software *ParaView* se utilizó para la visualización de los resultados numéricos.

2.3. Modelos numéricos

Los ensayos descritos se modelizaron mediante el método de elementos finitos a partir de los parámetros obtenidos experimentalmente. En particular, se simuló los ensayos de tracción uniaxial de la probeta DENT considerando dos geometrías 3D diferentes. Por un lado, se utilizaron las dimensiones teóricas de la probeta con entallas sin redondeo definidas en la Figura 1 (modelo DENT). Por otro lado, se generó la geometría a partir de las dimensiones reales tras la fabricación de la configuración con una pared, considerando las resultantes puntas de entalla con redondeo (modelo DENT_W1). De esta forma, se analizó numéricamente la influencia del diseño de la punta de entalla en la nucleación de la grieta y resistencia de la probeta. En ambos modelos 3D se aplicó una simetría simple a lo largo de la dirección axial, como se muestra en la Figura 3, forzando la propagación de grieta de forma simétrica desde las dos entallas. Las mordazas de la máquina se sustituyeron por condiciones de contorno basadas en un modelo controlado por el desplazamiento de sus extremos (fijando el extremo opuesto), y simulando solo la zona libre ensayada de la probeta (60 mm de longitud). Además, la porosidad inherente de las probetas se consideró

despreciable según lo observado en los ensayos, descartando un comportamiento anisótropo bajo estas condiciones y considerando el PLA como un material elástico lineal [10], aplicando las propiedades mecánicas elásticas obtenidas experimentalmente.

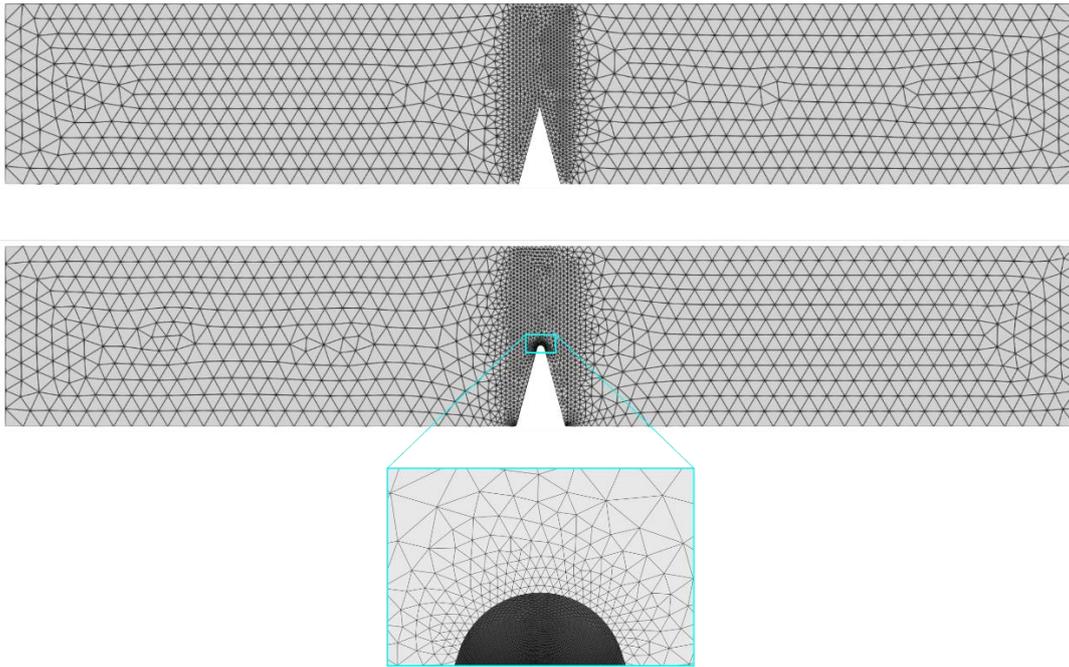


Figura 3: Mallas de los modelos DENT (arriba) y DENT_W1 (abajo) con detalle de punta de entalla.

El método phase-field requiere que el tamaño de elemento sea reducido en la zona de fractura, por lo que se aplicó una zona refinada entre las entallas para cada modelo con h_e de 0,20 mm, como se muestra en la Figura 3. Además, en el caso del modelo DENT_W1, se aplicó un refinamiento adicional en la punta de entalla con h_e de 0,02 mm para definir correctamente su curvatura (ver Figura 3(abajo)). Para el resto de la geometría se incrementó a 1 mm para reducir el coste computacional. Por lo tanto, los modelos DENT y DENT_W1 fueron mallados con 88.764 y 242.224 elementos tetraédricos lineales, respectivamente, tras el correspondiente análisis de sensibilidad. Sin embargo, se observó cierta desviación de h_e a lo largo de la malla, por lo que $G_{c,corr}$ fue aplicado para cada elemento considerando su h_e específico para minimizar el efecto de discretización mencionado.

Por otro lado, ℓ generalmente tiene un gran impacto en las estimaciones numéricas y existen algunas recomendaciones en la literatura para su determinación. Se sugiere que su valor sea lo suficientemente pequeño como para asegurar la convergencia de la energía de fractura (un valor nulo conduce a la fractura discreta), pero también lo suficientemente grande con respecto a h_e como para reducir el efecto de la discretización. Por un lado, se puede definir como un parámetro regulador, cumpliéndose $\ell \geq 2h_e$, y en otros estudios se considera ℓ como una propiedad del material que puede ser calculado, siempre y cuando sea compatible con las dimensiones del problema, a partir de G_c el módulo de Young E y la resistencia a tracción σ_f según [25]:

$$\ell = \frac{3G_c E}{8\sigma_f^2} \quad (5)$$

Debido a esto, se aplicaron diferentes valores de ℓ considerando estas recomendaciones para evaluar su influencia en los resultados. Aparte, Δt debe ser significativamente reducido para que la predicción de evolución de grieta sea fiable, lo que conlleva a un tiempo de simulación excesivo. Por ello, se aplicó un Δt dinámico de manera que, tras la etapa elástica lineal sin daño (90 % de la simulación), Δt se reduce 50 veces para la correcta estimación de la nucleación y propagación de la grieta.

3. Resultados

Los resultados obtenidos a partir de los ensayos experimentales y los modelos numéricos descritos anteriormente se presentan a continuación.

3.1. Resultados experimentales

La Tabla 1 recoge las propiedades mecánicas del PLA obtenidas a partir de los ensayos experimentales de tracción uniaxial. Las imágenes capturadas por el sistema DIC fueron procesadas mediante el software *Ncorr* [26] en *MATLAB* para conseguir los campos de desplazamientos sobre las probetas. Las propiedades elásticas del PLA fueron calculadas siguiendo la norma ISO 527-1 [27] a partir de las probetas RECT, mientras que los parámetros

de fractura requeridos para la aplicación del método phase-field fueron obtenidos a partir de las probetas DENT_W0 y DENT_W1. Asumiendo la entalla como una grieta, se calcula una tenacidad a fractura siendo dependiente de la geometría de la probeta según [28]:

$$K_c = \beta \sigma_c \sqrt{\pi a} \quad (6)$$

Siendo β un factor de forma que toma el valor 1,16 para la geometría DENT [29], σ_c la tensión crítica o remota en el extremo de la probeta, y a la longitud de la entalla, en este caso. Después, G_c se calcula a partir de la tenacidad con la siguiente expresión [25]:

$$G_c = \frac{K_c^2}{E} \quad (7)$$

Tabla 1: Propiedades mecánicas y parámetros de fractura (valor medio \pm desviación estándar) obtenidos a partir de los ensayos experimentales correspondientes.

Parámetro	RECT	DENT_W0	DENT_W1
Módulo de Young, E (GPa)	3,21 \pm 0,17	-	-
Coefficiente de Poisson, ν (-)	0,37 \pm 0,02	-	-
Resistencia a tracción, σ_T (MPa)	51,77 \pm 3,08	-	-
Fuerza máxima, F_{\max} (N)	-	1755,42 \pm 59,12	1675,36 \pm 76,09
Tensión crítica, σ_c (MPa)	-	27,97 \pm 0,96	26,62 \pm 1,38
Tenacidad a fractura, K_c (MPa·m ^{1/2})	-	3,82 \pm 0,16	3,72 \pm 0,19
Tasa de liberación de energía crítica, G_c (MPa·mm)	-	4,55 \pm 0,38	4,32 \pm 0,44

Todas las probetas presentaron un comportamiento elástico cuasilineal antes del fallo bajo fuerzas de tracción, como se muestra en la Figura 4. En el caso de las probetas RECT, se produjo una elongación considerable tras el comienzo del fallo, como se puede esperar en materiales poliméricos. Por el contrario, las probetas DENT exhibieron una fractura abrupta tras alcanzar F_{\max} (indicada con un marcador circular en la Figura 4).

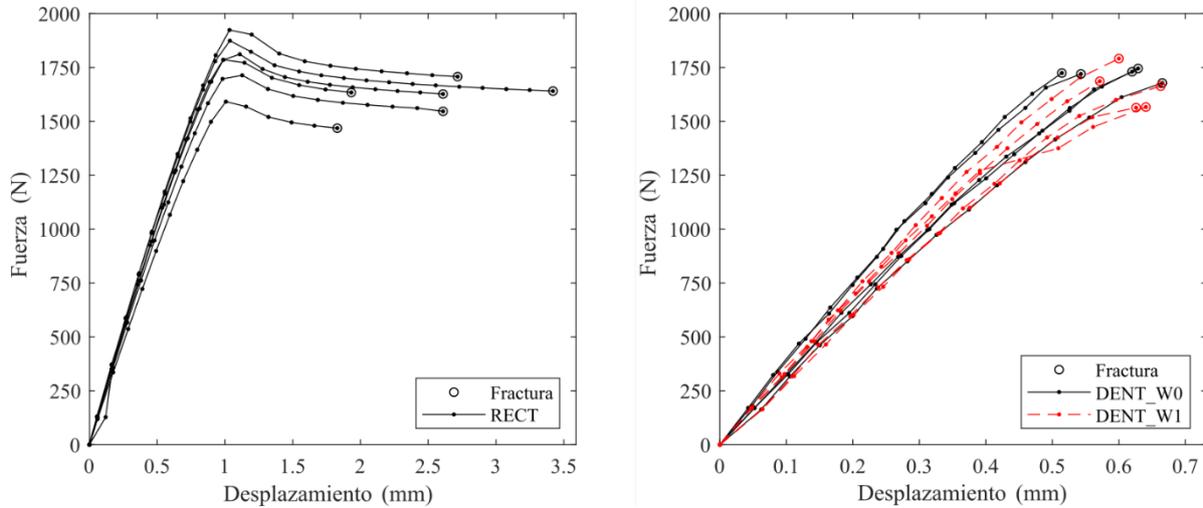


Figura 4: Curvas fuerza-desplazamiento experimentales de los ensayos a tracción.

Comparando los parámetros resultantes y las curvas experimentales de las dos probetas tipo DENT, ambas configuraciones fueron muy similares, demostrando el leve impacto de la fabricación de las entallas en su comportamiento mecánico global.

3.2. Resultados numéricos

La validación de los modelos numéricos se llevó a cabo mediante la comparación de las estimaciones con los resultados experimentales obtenidos. En el caso del modelo DENT, este fue validado con los resultados de ambas configuraciones (DENT_W0 y DENT_W1), mientras que el modelo DENT_W1 fue comparado únicamente con su probeta correspondiente. La Tabla 2 muestra F_{\max} y el desplazamiento correspondiente u_f estimados numéricamente considerando la simetría aplicada, al igual que los errores relativos con respecto a los ensayos experimentales de cada simulación en función del modelo y ℓ . Los valores de ℓ analizados se corresponden con $\ell = 2h_c$, $\ell = 4h_c$ y el calculado mediante (5), que aproximadamente se corresponde con $\ell = 10h_c$. Además, se estudia la longitud de la grieta estimada con respecto a la longitud total del ligamento entre entallas como un indicador de robustez de la simulación (considerando $\omega = 0,9$ como fractura completa), ya que la inestabilidad del modelo aumenta cuando comienza la predicción del fallo.

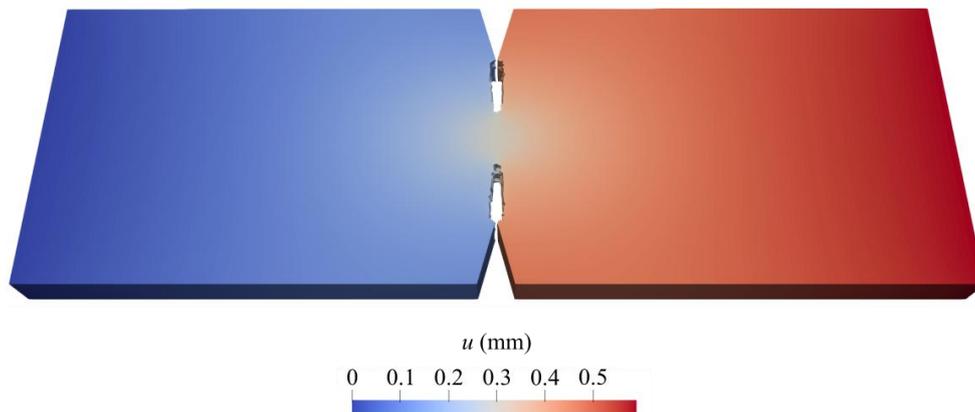
Tabla 2: Resultados numéricos de los modelos DENT y DENT_W1 en función de ℓ y los correspondientes errores relativos respecto a los ensayos experimentales y longitudes de grieta.

Modelo	ℓ (mm)	$F_{\text{máx}}$ (N)	$\varepsilon(F_{\text{máx}})$ (%)	u_f (mm)	$\varepsilon(u_f)$ (%)	Grieta (%)
DENT	0,40	1641,50	-4	0,56	-8	70
	0,80	1767,16	+3	0,60	-2	40
	1,99	1765,44	+3	0,61	0	5
DENT_W1	0,40	1939,08	+16	0,65	+3	1
	0,80	1961,38	+17	0,66	+5	5
	1,99	1823,82	+9	0,62	-2	5

Todos los modelos numéricos presentaron un comportamiento elástico lineal, seguido de una fractura frágil tras alcanzar $F_{\text{máx}}$. En general, el comportamiento mecánico fue replicado de manera precisa presentando unos errores relativos reducidos, en particular con el modelo DENT.

La influencia del ratio ℓ/h_e se vio reflejada en gran medida sobre la robustez de las simulaciones del modelo DENT (porcentaje de longitud de grieta estimada). En este caso, un ratio ℓ/h_e elevado afectó negativamente a la convergencia de la simulación, mientras que un ratio más reducido resultó en estimaciones ligeramente menos precisas. Para el modelo DENT_W1, ratios ℓ/h_e menores causaron la sobreestimación de $F_{\text{máx}}$. Estos errores pueden atribuirse también a la simplificación de ciertos defectos de impresión en la zona o porosidad que actuarían como concentradores de tensiones y reducirían la resistencia a tracción del componente real. Por otro lado, la inestabilidad encontrada en estas simulaciones, con grietas estimadas muy reducidas, puede deberse al refinamiento adicional en la curvatura de las puntas de entalla, y el resultante ratio ℓ/h_e excesivo, dificultando la convergencia durante la nucleación de la grieta.

Como ejemplo, la Figura 5 muestra la propagación de grieta estimada mediante la eliminación de los elementos con $\omega \geq 0,9$ en un instante determinado de la simulación del modelo DENT con $\ell = 0,40$ mm.

**Figura 5:** Campo de desplazamiento en dirección axial (en mm) y propagación de grieta estimada de modelo simétrico DENT ($\ell = 0,40$ mm) en el instante $u = 0.5886$ mm.

4. Discusión

La combinación entre los ensayos a tracción de las probetas RECT y DENT permiten la caracterización mecánica del material y la determinación de los parámetros de fractura necesarios en el método phase-field. Además, el uso de dos configuraciones de impresión diferentes a la hora de fabricar las entallas en la probeta DENT ofrece la evaluación del impacto del proceso de fabricación en su comportamiento mecánico. En este caso, se puede considerar que la presencia de una pared en el contorno de la probeta DENT no afecta a los parámetros calculados. Se debe tener en cuenta que se han seguido una serie de medidas para minimizar los defectos de impresión y, con ello, la influencia de la orientación de impresión.

Cabe destacar que las propiedades elásticas obtenidas coinciden con las publicadas en otros trabajos [15]. Igualmente, los K_c experimentales calculados son muy similares a la tenacidad a fractura en condiciones de deformación plana del PLA [10,15]. Estos resultados demuestran la fiabilidad de la metodología experimental presentada en este trabajo.

Con respecto a los modelos numéricos, también se ha llevado a cabo la evaluación de dos geometrías diferentes (perspectivas teórica y realista) para analizar numéricamente la influencia del redondeo en la punta de entalla sobre la nucleación de la grieta. En primer lugar, se debe tener en cuenta que se asumieron ciertas simplificaciones en base a las condiciones de este estudio, como la simetría en la dirección axial, la isotropía del material y la ausencia de defectos de impresión. Sin embargo, las estimaciones obtenidas en comparación con los ensayos experimentales son, en general, adecuadas para la predicción del fallo y evolución de la grieta. En el caso del modelo DENT_W1 con entallas redondeadas, las sobreestimaciones de la resistencia a tracción pueden atribuirse a la falta de

concentradores de tensión en la punta de entalla (defectos de impresión). Por otro lado, la corrección de G_c ($G_{c,corr}$) específica para cada elemento reduce el error de las estimaciones, y el Δt dinámico reduce drásticamente el tiempo de simulación (más del 100 %), facilitando análisis numéricos más extensos. No obstante, se han encontrado problemas de convergencia cuando comienza el daño en el modelo. La simulación de la fractura frágil provoca una caída abrupta de la rigidez, generando cierta inestabilidad en el código condicionada, a su vez, por el ratio ℓ/h_e . En este estudio, se considera que existe un equilibrio adecuado entre la precisión de las estimaciones y la convergencia del modelo cuando $\ell/h_e > 2$.

5. Conclusiones

En este trabajo se presenta una metodología experimental para la determinación de los parámetros de la mecánica de la fractura requeridos en las simulaciones basadas en el método phase-field. Para ello, se propone el proceso MEX para fabricar las probetas necesarias con filamento de PLA, y se realizan ensayos de tracción uniaxial para la caracterización mecánica del material, junto con el estudio de fractura utilizando probetas con entallas. Los parámetros obtenidos y, por tanto, las metodologías experimental y analítica presentadas han sido validadas con la literatura.

En cuanto al análisis numérico, los modelos se centran en reproducir los ensayos a tracción y predecir la fractura mediante el método phase-field con los parámetros obtenidos experimentalmente. Además, se ha analizado la influencia del valor del ratio ℓ/h_e .

Los resultados experimentales y numéricos validan la metodología propuesta, destacando la importancia de la corrección de G_c y la aplicación del Δt dinámico, mejorando en gran medida el rendimiento del modelo. Se concluye que el ratio $\ell/h_e = 4$ optimiza el equilibrio entre precisión y estabilidad numérica. Este trabajo demuestra que la metodología seguida es robusta y fácilmente replicable para otros materiales y procesos de fabricación.

6. Agradecimientos

Los autores agradecen la financiación recibida por parte del Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades [PID2020-112628RA-I00/AEI/10.13039/501100011033]; y del Programa Propio de Investigación de la Universidad Carlos III de Madrid [“Ayudas para la Movilidad de Investigadores en Formación Predoctoral”].

7. Referencias

- [1] Murakami S., *Continuum damage mechanics: a continuum mechanics approach to the analysis of damage and fracture*, Springer Science & Business Media, Dordrecht (2012)
- [2] Altenbach H., Sadowski T., *Failure and damage analysis of advanced materials*, Springer, Vienna (2015)
- [3] Öchsner A., “Continuum damage mechanics”, *Continuum damage and fracture mechanics*, 65-84, Springer, Singapore (2016)
- [4] Provatas N., Elder K., *Phase-field methods in materials science and engineering*, John Wiley & Sons, Weinheim (2011)
- [5] Borden M. J., Hughes T. J., Landis C. M., Anvari A., Lee I. J., “A phase-field formulation for fracture in ductile materials: Finite deformation balance law derivation, plastic degradation, and stress triaxiality effects”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 312, 130-166 (2016)
- [6] Pillai U., Triantafyllou S. P., Essa Y., Martín de la Escalera F., “An anisotropic cohesive phase field model for quasi-brittle fractures in thin fibre-reinforced composites”, *Composite Structures* 252, 112635 (2020)
- [7] Miehe C., Aldakheel F., Raina A., “Phase field modeling of ductile fracture at finite strains: A variational gradient-extended plasticity-damage theory”, *International Journal of Plasticity* 84, 1-32 (2016)
- [8] Golahmar A., Niordson C. F., Martínez-Pañeda E., “A phase field model for high-cycle fatigue: Total-life analysis”, *International Journal of Fatigue* 170, 107558 (2023)
- [9] Infante-García D., Quiñero-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”, *Engineering Fracture Mechanics* 308, 110371 (2024)
- [10] Ahmed A. A., Susmel L., “A material length scale-based methodology to assess static strength of notched additively manufactured polylactide (PLA)”, *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures* 41(10), 2071-2098 (2018)
- [11] ISO/ASTM Standard 52900:2021, “Additive manufacturing – General principles – Fundamentals and vocabulary”, International Organization for Standardization, 2022

- [12] Dizon J. R. C., Espera A. H., Chen Q., Advincula R. C., “Mechanical characterization of 3D-printed polymers”, *Additive Manufacturing* 20, 44-67 (2018)
- [13] Álvarez-Blanco M., Arias-Blanco A., Infante-García D., Marco M., Giner E., Miguélez M. H., “Influence of material extrusion parameters on fracture mechanisms of polylactic acid under three-point bending”, *Engineering Fracture Mechanics* 283, 109223 (2023)
- [14] Molnár G., Doitrand A., Estevez R., Gravouil A., “Toughness or strength? Regularization in phase-field fracture explained by the coupled criterion”, *Theoretical and Applied Fracture Mechanics* 109, 102736 (2020)
- [15] Marşavina L., Vălean C., Mărghitaş M., Linul E., Razavi N., Berto F., Brighenti R., “Effect of the manufacturing parameters on the tensile and fracture properties of FDM 3D-printed PLA specimens”, *Engineering Fracture Mechanics* 274, 108766 (2022)
- [16] ISO Standard 527-4:2021, “Plastics. Determination of tensile properties. Part 4: Test conditions for isotropic and orthotropic fibre-reinforced plastic composites”, International Organization for Standardization, 2021
- [17] ASTM D3039, “Standard test method for tensile properties of polymer matrix composite materials”, American Society for Testing and Materials, 2000
- [18] Francfort G. A., Marigo J. -J., “Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 46(8), 1319-1342 (1998)
- [19] Wu J. -Y., “A unified phase-field theory for the mechanics of damage and quasi-brittle failure”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 103, 72-99 (2017)
- [20] Pham K., Amor H., Marigo J. -J., Maurini C., “Gradient Damage Models and Their Use to Approximate Brittle Fracture”, *International Journal of Damage Mechanics* 20(4), 618-652 (2011)
- [21] Álvarez-Blanco M., Abali B. E., Völlmecke C., “An experimental methodology to determine damage mechanics parameters for phase-field approach simulations using material extrusion-based additively manufactured tensile specimens”, *Virtual and Physical Prototyping* 20(1) (2025)
- [22] Bourdin B., Francfort G. A., Marigo J. -J., “The Variational Approach to Fracture”, *Journal of Elasticity* 91, 5-148 (2008)
- [23] Alnæs M. S., Mardal K. -A., “SyFi and SFC: Symbolic finite elements and form compilation”, *Automated solution of differential equations by the finite element method*, 273-282, Springer, Berlin-Heidelberg (2012)
- [24] Abali B. E., *Computational reality, solving nonlinear and coupled problems in continuum mechanics*, Springer, Singapore (2017)
- [25] Tanné E., Li T., Bourdin B., Marigo J. -J., Maurini C., “Crack nucleation in variational phase-field models of brittle fracture”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 110, 80-99 (2018)
- [26] Blaber J., Adair B., Antoniou A., “Ncorr: Open-Source 2D Digital Image Correlation Matlab Software”, *Experimental Mechanics* 55(6), 1105-1122 (2015)
- [27] ISO Standard 527-1:2019, “Plastics. Determination of tensile properties. Part 1: General principles”, International Organization for Standardization, 2019
- [28] Irwin G. R., “Analysis of Stresses and Strains Near the End of a Crack Traversing a Plate”, *Journal of Applied Mechanics* 24(3), 361-364 (1957)
- [29] Tada H., Paris P. C., Irwin G. R., “Part II. Stress analysis results for common test specimen configurations”, *The stress analysis of cracks handbook*, 39-80, ASME Press, New York (2000)