Mecánica Computacional Vol. XXII M. B. Rosales, V. H. Cortínez y D. V. Bambill (Editores) Bahía Blanca, Argentina, Noviembre 2003.

# MODELIZACION DE FRACTURA UTILIZANDO UN MODELO DE GRADIENTES IMPLICITO

Pablo J. Sanchez<sup>\*</sup>, Victorio E. Sonzogni<sup>\*</sup>, Alfredo E. Huespe<sup>\*</sup>

\*Centro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería (CIMEC) Universidad Nacional del Litoral, CONICET Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina. TE: (0342)-4511594 e-mail: psanchez@intec.unl.edu.ar, web page: <u>http://www.cimec.org.ar</u>

Palabras claves: Modelos de gradientes, regularización, localización, fractura frágil, daño.

**Resumen.** El presente trabajo tiene por objetivo estudiar modelos constitutivos de daño con teoría de gradientes bajo la hipótesis de deformaciones infinitesimales, para materiales de comportamiento frágil. En este sentido se sigue una formulación implícita de gradientes, la cual ha mostrado conservar estrictamente la no localidad del problema. Se analiza el desempeño de tal formulación en el test de estiramiento uniaxial de una barra y en un problema de flexión de viga para modelos de daño isotrópico con ablandamiento lineal y exponencial. Los resultados se presentan en forma de curvas carga-desplazamiento y mapas de evolución del daño.

# **1 INTRODUCCION**

### 1.1 Motivación

La situación previa a la pérdida total de resistencia (falla o fractura) en ciertos materiales, se caracteriza por una disminución gradual de la tensión efectiva cuando se los somete a considerables niveles de deformación. Este comportamiento constitutivo, denominado ablandamiento por deformación, se manifiesta a nivel macroscópico por la formación de bandas de espesor reducido, en comparación con las dimensiones de la estructura, en donde prevalecen elevados gradientes de deformación, procesos irreversibles de degradación y disipación de energía (plasticidad y/o daño), mientras que el resto del sólido descarga en forma elástica. Tal mecanismo se ha observado experimentalmente por el desarrollo de micro fisuras y micro vacíos en materiales de importante uso tecnológico como el hormigón, cerámicos, rocas, suelos y metales. Por este motivo, el estudio del fenómeno de localización de deformaciones ha sido objeto de intenso estudio en los últimos años y actualmente es una de las líneas de investigación con mayores desafíos en la mecánica de sólidos computacional.

Un conocimiento real del comportamiento previo a la rotura material permite predecir en forma precisa modos probables de falla, como consecuencia de ello es posible optimizar procesos industriales de moldeo de piezas y, por otro lado, ajustar coeficientes de seguridad con mayor nivel de aproximación en estructuras mecánicas o civiles.

### 1.2 La fractura desde el punto de vista del continuo

La mecánica del continuo clásica o local introduce un conjunto de variables de estado capaces de describir explícitamente los procesos inelásticos responsables de la degradación, al menos en un sentido macroscópico. En este contexto, el modelado de la fractura material utiliza la mecánica de daño continuo<sup>1</sup> como marco teórico de referencia, en el cual se introduce una variable auxiliar en la ecuación constitutiva, el daño, para representar el deterioro local de resistencia<sup>2</sup>. Desde el punto de vista del continuo la iniciación, crecimiento y propagación de una fisura surge entonces naturalmente de la evolución de tal variable de daño hasta que su valor se torna crítico, en el cual se asume que el material es incapaz de soportar incremento de tensión alguno. Este tipo de aproximación resulta particularmente atractiva para simulaciones numéricas, ya que tales modelos pueden implementarse en programas existentes de elementos finitos sin mayores inconvenientes tomando ventaja de todos los desarrollos y algoritmos ya disponibles en estos códigos.

Sin embargo, varios estudios de estabilidad y bifurcación<sup>3,4,5</sup> han mostrado que la estrategia local presenta severas inconsistencias teóricas para modelos con ablandamiento.

En efecto, la descripción analítica predice singularidad del tensor acústico y consecuente pérdida de elipticidad de la ecuación diferencial de equilibrio incremental, en un entorno del punto donde se produce la localización. Existen familias de superficies (o líneas en casos bidimensionales) en donde es posible agregar a la solución continua en deformaciones campos discontinuos verificando aun todas las ecuaciones del problema de valores de contorno. En síntesis se obtiene bifurcación en la respuesta y pérdida de unicidad.

Además la localización de deformación se produce en un volumen infinitamente pequeño y por ende, la falla material se lleva a cabo sin disipación de energía. Esta inconsistencia, subyacente en el modelo continuo, se traduce al espacio discreto de aproximación por elementos finitos. En este caso, la simulación muestra una energía de fractura finita pero decreciente a medida que se refina la malla. En el límite, cuando el tamaño del elemento tiende a cero, la solución numérica predice una zona de localización que colapsa en una superficie y energía de fractura nula. La aproximación continua y discreta son consistentes, en este sentido, pero ambas carecen indudablemente de significado físico.

Para salvar este inconveniente, presente en los modelos con ablandamiento, se han propuesto diversas alternativas, la mayoría de ellas basadas en la inclusión explícita de un parámetro de longitud interna *lc*, dependiente de la microestructura material. Estas estrategias introducen términos de interacción espacial en las ecuaciones con el objeto de regularizar el comportamiento constitutivo limitando la localización a un volumen de tamaño finito. Las formulaciones no locales y de gradientes pueden mencionarse como las más destacadas.

En los modelos no locales<sup>6</sup> se utilizan expresiones integrales para obtener promedios ponderados de variables locales. La porción del dominio adecuada para tal promedio está en función del parámetro de longitud interna lc. Tienen la desventaja que en su implementación se necesita modificar la estructura básica de los códigos existentes, ya que debe conocerse información del entorno de un punto para evaluar una variable no local en dicho punto.

Las formulaciones de gradientes<sup>7,8</sup>, como su nombre lo indica, incorporan al modelo constitutivo términos de gradientes espaciales de alto orden de variables cinemáticas o internas, proporcionales al parámetro de longitud intrínseca material. Este enriquecimiento tiene como finalidad suavizar y regularizar la evolución de los mecanismos inelásticos.

Se ha verificado una analogía directa entre las formulaciones no locales y los modelos de gradientes implícitos<sup>9,10</sup>, para determinadas funciones de peso. De esta forma, utilizando tales esquemas implícitos se asegura el carácter no local del problema, con una ventaja adicional: desde el punto de vista computacional poseen la estructura standard de modelos locales.

No es necesario recurrir a la mecánica del continuo completamente no local para obtener modelos regularizados. En general sólo es suficiente considerar expansiones en términos de orden superior (en teoría de gradientes) o no localidad (en teorías integrales) para aquellas variables responsables de la evolución del ablandamiento, mientras que las restantes conservan su carácter local. Este tipo particular de formulación conserva estrictamente consistencia termodinámica<sup>11</sup> y es una de las más utilizadas en la actualidad.

Cabe aclarar que existen otros esquemas limitadores de localización, formulados con una filosofía diferente al concepto de longitud interna. El modelo continuo de Cosserat y los modelos dependientes de la velocidad de deformación (visco-plásticos, visco-daño) pueden mencionarse entre estos. Se comentan aquí con el único propósito de completar una clasificación básica sin pretender una discusión sobre los mismos.

### 1.3 Objetivos

El objetivo final de la presente investigación es caracterizar el comportamiento constitutivo

de materiales frágiles con ablandamiento, considerando procesos de degradación por daño hasta alcanzar la fractura, desde el punto de vista de la mecánica del continuo. Este informe presenta resultados preliminares, quedando aun varios aspectos teóricos por desarrollar.

En esta línea de trabajo se ha implementado una formulación implícita de gradientes para modelos de daño con ablandamiento lineal y exponencial. El esquema propuesto se valida numéricamente para dos problemas típicos. El primero de ellos corresponde al test de estiramiento uniaxial de una barra en estado plano de deformación; el segundo representa el problema de flexión de una viga apoyada en tres puntos bajo hipótesis de tensión plana.

# 2 MODELO DE DAÑO LOCAL

Las falencias en las formulaciones continuas locales con ablandamiento, mencionadas en párrafos anteriores, se presentan aun para los modelos constitutivos más elementales. Para no agregar complejidad y focalizarse en el tema de la regularización, el más simple de los modelos de daño, daño escalar, se toma como marco de referencia teórico para los desarrollos siguientes. Su aplicación queda restringida entonces a problemas en los cuales pueden asumirse las siguientes hipótesis básicas: las deformaciones plásticas son despreciables (comportamiento frágil), la evolución del daño es el mecanismo disipativo dominante, no se induce anisotropía material, deformaciones infinitesimales hasta alcanzar la fractura.

## 2.1 Daño isótropo

Se adopta un esquema de daño isotrópico formulado en el espacio de tensiones<sup>12</sup>. Una única variable escalar  $d \in [0;1]$  es suficiente para describir completamente el proceso de degradación (d=0 representa propiedades del sólido en estado virgen, d=1 caracteriza la pérdida completa de integridad material). Las ecuaciones básicas que describen el modelo son:

Potenciales de energía:

$$\boldsymbol{\psi}_{0(\varepsilon)} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad ; \ \boldsymbol{\psi}_{(\varepsilon,r)} = (1 - \boldsymbol{d}_{(r)}) \boldsymbol{\psi}_{0} \tag{1}$$

Relación tensión deformación:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \boldsymbol{\psi}_{(\varepsilon,r)}}{\partial \varepsilon} = (1 - d_{(r)}) \, \mathbf{C} : \varepsilon = (1 - d_{(r)}) \, \overline{\boldsymbol{\sigma}} \quad ; \quad \overline{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C} : \varepsilon \tag{2}$$

Variable de daño escalar:

$$d_{(r)} = 1 - \frac{q_{(r)}}{r} \quad ; \quad d \in [0; 1]$$
(3)

Criterio de daño:

$$f_{(\mathbf{\sigma},q)} = \tau_{\mathbf{\sigma}} - q \quad ; \quad \tau_{\mathbf{\sigma}} = \left\| \mathbf{\sigma} \right\|_{\mathbf{C}^{-1}} = \sqrt{(\mathbf{\sigma} : \mathbf{C}^{-1} : \mathbf{\sigma})}$$
(4)

Ley de evolución de r:

$$\overset{\bullet}{r} = \overset{\bullet}{\lambda} \quad ; \quad r \in [r_0; \infty) \quad ; \quad r_0 = r \big|_{t=0} = \frac{\sigma_u}{\sqrt{E}}$$
 (5)

Condiciones de optimalidad (Kuhn Tucker):

$$\lambda \ge 0$$
 ;  $f_{(\sigma,q)} \le 0$  ;  $\lambda f_{(\sigma,q)} = 0$  (6)

Ecuación de consistencia:

$$\lambda f_{(\mathbf{\sigma},q)} = 0$$
 (7)

Ley de ablandamiento:

$$\stackrel{\bullet}{q} = H_{(r)} \stackrel{\bullet}{r} ; \quad H_{(r)} = \frac{dq_{(r)}}{dr} \le 0 ; \quad q_0 = q \big|_{t=0} = r_0$$
(8)

en donde  $\psi_{0(\varepsilon)}$  y  $\psi_{(\varepsilon,r)}$  representan el potencial de energía elástica y libre de Helmholtz respectivamente,  $\varepsilon$  es el tensor de deformación infinitesimal,  $\sigma$  el tensor de tensiones; r es la variable interna en el espacio de deformaciones, q su conjugada termodinámica en el espacio de tensiones (dual a r) y C el tensor constitutivo elástico. La variable de degradación por daño está representada por d, el parámetro  $\lambda$  que se observa en las condiciones de carga-descarga es el multiplicador de daño,  $f_{(\sigma,q)}$  restringe el dominio elástico definiendo una superficie en el espacio de tensiones principales en términos de la norma  $\tau_{\sigma}$ . Los valores iniciales de  $q_0$  y  $r_0$  quedan definidos mediante la tensión última uniaxial  $\sigma_u$  y el módulo de Young E.

Si se tiene en cuenta el tensor de tensiones efectivas  $\overline{\sigma} = \mathbf{C} : \varepsilon$ , es posible definir una norma equivalente en el espacio de deformaciones que permite integrar en forma trivial el modelo:

$$\tau_{\varepsilon} = \left\|\overline{\mathbf{\sigma}}\right\|_{\mathbf{C}^{-1}} = \sqrt{(\overline{\mathbf{\sigma}}:\mathbf{C}^{-1}:\overline{\mathbf{\sigma}})} = \sqrt{(\varepsilon:\mathbf{C}:\varepsilon)} = \left\|\varepsilon\right\|_{\mathbf{C}} \quad ; \quad \tau_{\sigma} = (1 - d_{(r)})\tau_{\varepsilon} \tag{9}$$

#### 2.2 Tipo de ablandamiento

La función  $H_{(r)} = dq / dr \le 0$  caracteriza el mecanismo de ablandamiento material una vez superado el umbral de daño. Se proponen, en este trabajo, dos familias de modelos:

Ablandamiento lineal

Ablandamiento exponencial

$$H_{(r)} = \frac{dq_{(r)}}{dr} = H_0 = cte \le 0 \qquad \qquad H_{(r)} = \frac{dq_{(r)}}{dr} = H_0 e^{\frac{H_0[r-r_0]}{q_0}} \le 0 \qquad (10)$$

$$Dmech = \int_{t=0}^{t=\infty} (q \dot{r}) dt = -\frac{q_0^2}{2H_0} \ge 0 \qquad Dmech = \int_{t=0}^{t=\infty} (q \dot{r}) dt = -\frac{q_0^2}{H_0} \ge 0 \qquad (11)$$

en donde  $H_0$  representa el módulo de ablandamiento inicial en el espacio definido por q-r y *Dmech* la energía mecánica máxima disipada por unidad de volumen.

Ambos modelos quedan completamente definidos mediante los parámetros  $q_0$  y  $H_0$  (o eventualmente *Dmech*, teniendo en cuenta las ecuaciones 11).

# **3 MODELO DE DAÑO CON TEORIA DE GRADIENTES**

Sea  $\Omega$  un conjunto abierto y acotado incluido en  $\Re^n$  que representa la configuración de referencia del sólido (n dimensión del espacio en estudio),  $\overline{\Omega}$  es su clausura,  $\Gamma$  es la frontera de  $\Omega$  la cual admite una descomposición en dos conjuntos disjuntos  $\Gamma_u$  y  $\Gamma_\sigma$  donde se prescriben desplazamientos  $\overline{\mathbf{u}}$  y tensiones  $\overline{\mathbf{t}}$  respectivamente,  $\mathbf{x}$  es un punto material que pertenece a  $\overline{\Omega}$ . Se definen además otros subconjuntos incluidos en  $\overline{\Omega}$ :  $\Omega_0 = \{\mathbf{x} \in \overline{\Omega}/d_{(\mathbf{x})} = 0\}$  (material virgen),  $\Omega_D = \{\mathbf{x} \in \overline{\Omega}/0 < d_{(\mathbf{x})} < 1\}$  (región parcialmente degradada),  $\Omega_C = \{\mathbf{x} \in \overline{\Omega}/d_{(\mathbf{x})} = 1\}$  (fisura franca),  $\Omega_B = \{\mathbf{x} \in \overline{\Omega}/d_{(\mathbf{x})} < 1\}$  (zona no fisurada, dominio real del problema), y por último  $\Gamma_{\Omega_B} = \{\mathbf{x} \in \partial \Omega_B\}$  representando la frontera de  $\Omega_B$  que se modifica conforme transcurre la evolución del daño.

#### 3.1 Regularización constitutiva mediante gradientes

Las formulaciones de gradientes pueden deducirse a partir de teorías no locales. Para demostrar esto se asume que la evolución del daño en un punto **x** está gobernada por la deformación equivalente no local  $\overline{\tau}_{\varepsilon}$  cuya expresión se define como el promedio ponderado de la deformación equivalente local  $\tau_{\varepsilon}$  en un entorno de dicho punto:

$$\overline{\tau}_{\varepsilon(\mathbf{x})} = \frac{1}{\psi_{(\mathbf{x})}} \int_{\Omega_B} g_{(\xi;\mathbf{x})} \tau_{\varepsilon(\mathbf{x}+\xi)} \, \mathrm{d}\Omega_B \quad ; \quad \frac{1}{\psi_{(\mathbf{x})}} \int_{\Omega_B} g_{(\xi;\mathbf{x})} \, \mathrm{d}\Omega_B = 1 \tag{12}$$

donde  $\xi$  denota la posición del volumen infinitesimal  $d\Omega_B$ ,  $g_{(\xi;\mathbf{x})}$  es una adecuada función de peso asociada a la longitud intrínseca microestructural *lc*.

Si se desarrolla  $\tau_{\epsilon(\mathbf{x}+\xi)}$  en serie de Taylor:

$$\tau_{\varepsilon(\mathbf{x}+\boldsymbol{\xi})} = \tau_{\varepsilon(\mathbf{x})} + \left[\nabla \tau_{\varepsilon}\right]_{(\mathbf{x})} \cdot \boldsymbol{\xi} + \frac{1}{2!} \left[\nabla \nabla \tau_{\varepsilon}\right]_{(\mathbf{x})} \cdot (\boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\xi}) + O(\boldsymbol{\xi}^{3})$$
(13)

y se reemplaza esta última ecuación en la expresión integral (ecuación 12), asumiendo condiciones de isotropía y despreciando términos de orden superior  $(O(\xi^3))$  se llega a la clásica formulación explícita de gradientes:

$$\overline{\tau}_{\varepsilon(\mathbf{x})} = \tau_{\varepsilon(\mathbf{x})} + c\nabla^2 \tau_{\varepsilon(\mathbf{x})} \quad ; \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_B$$
(14)

Puede observarse que el parámetro de longitud interna material lc, presente en el modelo no local, se preserva en el esquema de gradientes a través del coeficiente c el cual

posee, en este caso, unidades de longitud al cuadrado. Tal coeficiente queda determinado por el promedio en el volumen  $\Omega_B$  de las funciones de ponderación  $g_{(\xi;\mathbf{x})}$ .

Este tipo de aproximación resulta sin embargo inadecuada para implementaciones numéricas ya que la presencia del operador laplaciano sobre la deformación equivalente local requiere funciones de interpolación con continuidad  $C^{l}$  para el campo de desplazamiento. Esta desventaja se salva mediante simples manipulaciones matemáticas para finalmente obtener la forma implícita del modelo de gradientes<sup>13</sup>:

$$\overline{\tau}_{\varepsilon(\mathbf{x})} - c\nabla^2 \overline{\tau}_{\varepsilon(\mathbf{x})} = \tau_{\varepsilon(\mathbf{x})} \quad ; \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_B$$
(15)

Considerando  $\overline{\tau}_{\varepsilon(\mathbf{x})}$  como una variable nodal independiente, que debe satisfacer la ecuación 15, sólo se necesita continuidad  $C^0$  para su aproximación. Desde el punto de vista matemático la ecuación diferencial extra de segundo orden, presente en el modelo de gradientes implícito, requiere la definición de condiciones de contorno sobre la variable  $\overline{\tau}_{\varepsilon(\mathbf{x})}$  o su derivada normal, para obtener unicidad de solución. Siguiendo los trabajos de Belytschko<sup>8</sup>, Mühlhaus y Aifantis<sup>14</sup> se adopta una condición de borde natural del tipo:

$$\nabla \boldsymbol{\tau}_{\varepsilon(\mathbf{x})} \cdot \mathbf{n}_{\mathrm{B}} = 0 \quad ; \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_{\Omega_{p}}$$
(16)

siendo  $\mathbf{n}_{\rm B}$  el versor normal a la frontera  $\Gamma_{\Omega_{\rm B}}$ . Cabe mencionar que aun no se dispone de una justificación teórica estricta ni una correcta interpretación física sobre tales condiciones de contorno adicionales.

## 3.2 Formulación del modelo de daño incorporando gradientes

La idea básica es postular una función criterio de daño (ecuación 4) en términos de alguna variable con implicancia no local,  $\overline{\tau}_{\epsilon(\mathbf{x})}$  para el modelo en estudio, que además satisfaga las ecuaciones 15 y 16. Esta mejora tiene el objeto de evitar que la localización de deformaciones se lleve a cabo en una región de medida cero.

Teniendo en cuenta la ecuación de balance de cantidad de movimiento lineal, el problema completo, en su forma fuerte, puede plantearse como sigue: dado  $\overline{\mathbf{t}}: \Gamma_{\sigma} \to \mathfrak{R}^n$  y  $\overline{\mathbf{u}}: \Gamma_{\mathbf{u}} \to \mathfrak{R}^n$  (fuerzas prescritas por unidad de superficie y desplazamientos impuestos respectivamente) encontrar el campo vectorial  $\mathbf{u}: \overline{\Omega} \to \mathfrak{R}^n$  y campo escalar  $\overline{\tau}_{\varepsilon}: \Omega_B \to \mathfrak{R}$ , tal que se verifiquen simultáneamente:

$$\nabla \boldsymbol{.} \boldsymbol{\sigma}_{(\mathbf{u})} = 0 \quad ; \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \tag{17}$$

$$\mathbf{u} = \overline{\mathbf{u}} \quad ; \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_{\mathbf{u}}$$
 (18)

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = \bar{\boldsymbol{t}} \quad ; \quad \forall \boldsymbol{x} \in \Gamma_{\boldsymbol{\sigma}} \tag{19}$$

$$\overline{\tau}_{\varepsilon(\mathbf{x})} - c\nabla^2 \overline{\tau}_{\varepsilon(\mathbf{x})} = \tau_{\varepsilon(\mathbf{x})} \quad ; \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_B$$
<sup>(20)</sup>

$$\nabla \overline{\tau}_{\varepsilon(\mathbf{x})} \cdot \mathbf{n}_{\mathrm{B}} = 0 \quad ; \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_{\Omega_{\mathrm{B}}}$$
<sup>(21)</sup>

Si se toma como referencia el modelo local introducido en la sección 2, la relación constitutiva existente entre tensión y desplazamiento se caracteriza ahora por una función de daño del tipo:

$$f_{(\sigma,q)} = \overline{\tau}_{\sigma} - q = f_{(\varepsilon,r)} = \overline{\tau}_{\varepsilon} - r \le 0$$
(22)

en donde puede observarse que la evolución de la variable interna r está gobernada por la deformación equivalente no local, la cual es una variable independiente del problema.

Mientras  $f_{(\varepsilon,r)} = \overline{\tau}_{\varepsilon} - r < 0$  el material se comporta elásticamente y no hay evolución de los procesos disipativos. La condición  $f_{(\varepsilon,r)} = \overline{\tau}_{\varepsilon} - r = 0$  determina trivialmente el valor de la variable  $r = \overline{\tau}_{\varepsilon}$ , cuando el estado tensional ha superado el umbral de daño. Teniendo en cuenta el valor inicial  $r_0$  se tiene:

$$r_{ACTUAL} = max(\tau_{*}, r_{0}, r_{PREVIO})$$
<sup>(23)</sup>

Conocido el valor de r y adoptando un adecuado mecanismo de ablandamiento, pueden evaluarse todas las variables del modelo con lo cual el sistema de ecuaciones 17-21 queda definido.

## **4 IMPLEMENTACION NUMERICA**

#### 4.1 Discretización espacial

Siguiendo la metodología standard del MEF, la forma variacional discreta del problema puede expresarse como sigue: dado  $\mathbf{\bar{t}}: \Gamma_{\sigma} \to \Re^n$  y  $\mathbf{\bar{u}}: \Gamma_{\mathbf{u}} \to \Re^n$  encontrar el campo vectorial  $\mathbf{u}^h \in \vartheta_0^h$  y el campo escalar  $\overline{\tau}_{\varepsilon}^h \in \Theta_0^h$ , tal que:

$$\int_{\Omega^{E}} (\nabla^{s} \mathbf{v}^{h} : \mathbf{\sigma}) \, \mathrm{d}\Omega^{E} - \int_{\Gamma_{\sigma}^{E}} (\mathbf{v}^{h} \cdot \bar{\mathbf{t}}) \, \mathrm{d}\Gamma_{\sigma}^{E} = 0 \quad ; \quad \forall \mathbf{v}^{h} \in \vartheta_{0}^{h}$$
(24)

$$\int_{\Omega^{E}} (w^{h} \overline{\tau}_{\varepsilon}^{h}) \, \mathrm{d}\Omega^{E} + \int_{\Omega^{E}} (\nabla w^{h} \cdot c \nabla \overline{\tau}_{\varepsilon}^{h}) \, \mathrm{d}\Omega^{E} = \int_{\Omega^{E}} (w^{h} \tau_{\varepsilon}^{h}) \, \mathrm{d}\Omega^{E} \quad ; \quad \forall w_{h} \in \Theta_{0}^{h}$$
(25)

en donde  $\vartheta_0^h \subset H_0^1(\Omega)$ ,  $\Theta_0^h \subset H_0^1(\Omega_B)$ ,  $\mathbf{v}^h$  y  $w^h$  son variaciones en el campo de desplazamiento y deformación equivalente no local respectivamente, además se considera que el supríndice E hace referencia al elemento finito en estudio.

Si se utiliza nomenclatura matricial y se integra el modelo constitutivo mediante un esquema implícito, se obtiene la versión algorítmica de las ecuaciones a nivel elemental:

$$\underbrace{\int_{\Omega^{E}} \left( \mathbf{B}_{\mathbf{u}}^{T} \, \mathbf{\sigma}_{(n+1)} \right) \, \mathrm{d}\Omega^{E}}_{\boldsymbol{\Omega}^{E}} = \underbrace{\int_{\Gamma_{\sigma}^{E}} \left( \mathbf{N}_{\mathbf{u}}^{T} \, \bar{\mathbf{t}}_{(n+1)} \right) \, \mathrm{d}\Gamma_{\sigma}^{E}}_{\boldsymbol{\Gamma_{\sigma}^{E}}} \qquad (26)$$

$$\underbrace{\int_{\Omega^{E}} \left( \mathbf{N}_{\overline{\tau}}^{T} \, \mathbf{N}_{\overline{\tau}} + \mathbf{B}_{\overline{\tau}}^{T} \, c \, \mathbf{B}_{\overline{\tau}} \right) \, \mathrm{d}\Omega^{E}}_{\boldsymbol{T}_{\varepsilon}(n+1)} - \int_{\Omega^{E}} \left( \mathbf{N}_{\overline{\tau}}^{T} \, \tau_{\varepsilon(n+1)}^{h} \right) \, \mathrm{d}\Omega^{E} = 0$$

$$\underbrace{\int_{\Omega^{E}} \left( \mathbf{N}_{\overline{\tau}}^{T} \, \mathbf{N}_{\overline{\tau}} + \mathbf{B}_{\overline{\tau}}^{T} \, c \, \mathbf{B}_{\overline{\tau}} \right) \, \mathrm{d}\Omega^{E}}_{\boldsymbol{T}_{\varepsilon}(n+1)} - \underbrace{\int_{\Omega^{E}} \left( \mathbf{N}_{\overline{\tau}}^{T} \, \tau_{\varepsilon(n+1)}^{h} \right) \, \mathrm{d}\Omega^{E} = 0$$

$$\underbrace{\int_{\Omega^{E}} \left( \mathbf{N}_{\overline{\tau}}^{T} \, \mathbf{N}_{\overline{\tau}} + \mathbf{N}_{\overline{\tau}}^{T} \, c \, \mathbf{B}_{\overline{\tau}} \right) \, \mathrm{d}\Omega^{E}}_{\boldsymbol{T}_{\varepsilon}(n+1)} - \underbrace{\int_{\Omega^{E}} \left( \mathbf{N}_{\overline{\tau}}^{T} \, \tau_{\varepsilon(n+1)}^{h} \right) \, \mathrm{d}\Omega^{E} = 0$$

$$(27)$$

siendo  $\mathbf{N}_{\overline{\tau}}$  y  $\mathbf{N}_{\mathbf{u}}$  los arreglos de funciones de forma (lineales y cuadráticas) para interpolar  $\overline{\tau}_{\varepsilon}^{h}$  y  $\mathbf{u}^{h}$  respectivamente,  $\mathbf{B}_{\overline{\tau}} = \nabla \mathbf{N}_{\overline{\tau}}$ ,  $\mathbf{B}_{\mathbf{u}} = \nabla^{s} \mathbf{N}_{\mathbf{u}}$  (el supraíndice "s" hace referencia a la parte simétrica del operador  $\nabla$ , el símbolo  $\wedge$  representa valores nodales de una variable y "n" el número de paso previo),  $\mathbf{f}_{int(n+1)}^{\mathbf{u}}$  y  $\mathbf{f}_{ext(n+1)}^{\mathbf{u}}$  son los vectores de fuerza interna y externa asociados al grado de libertad de desplazamiento, mientras que  $\mathbf{f}_{int(n+1)}^{\overline{\tau}}$  es la fuerza interna correspondiente a la deformación equivalente no local.

#### 4.2 Retorno a la superficie de daño.

La actualización del tensor de tensiones y el cálculo del tensor tangente consistente se realiza siguiendo un esquema de Euler atrasado. En este contexto y teniendo en cuenta la dualidad entre la formulación del modelo en el espacio de tensiones o deformaciones (ecuación 9 y 22), el algoritmo de retorno a la superficie de daño puede formularse:

Proyección elástica (estado trial):  $r_{(n+1)}^{trial} = r_{(n)} ; q_{(n+1)}^{trial} = q_{(n)} ; d_{(n+1)}^{trial} = d_{(n)}$ (28)  $f_{(n+1)}^{trial} = (1 - d_{(n)})(\overline{\tau}_{\varepsilon(n+1)} - r_{(n)})$ (29)  $\overline{\sigma}_{(n+1)} = \mathbb{C} \varepsilon_{(n+1)} ; \tau_{\varepsilon(n+1)} = \sqrt{(\varepsilon_{(n+1)}^T \overline{\sigma}_{(n+1)})}$ (30) si  $f_{(n+1)}^{trial} \le 0$  (paso elástico)  $r_{(n+1)} = r_{(n)} ; q_{(n+1)} = q_{(n)} ; d_{(n+1)} = d_{(n)} ; \alpha = 0$ (31)  $\beta_1 = \frac{q_{(n+1)}}{r_{(n+1)}} ; \sigma_{(n+1)} = \beta_1 \overline{\sigma}_{(n+1)}$ (32)

si 
$$f_{(n+1)}^{trial} > 0$$
 (paso con evolución de daño)  
 $r_{(n+1)} = \overline{\tau}_{\varepsilon(n+1)}$ ;  $\alpha = 1$  (33)  
Ablandamiento lineal Ablandamiento exponencial  
 $q_{(n+1)} = q_{(n)} + H_0 \Delta r$   $q_{(n+1)} = q_0 e^{\frac{H_0(r_{(n+1)} - r_0)}{q_0}}$  (34)  
 $\beta_1 = \frac{q_{(n+1)}}{r_{(n+1)}}$ ;  $\sigma_{(n+1)} = \beta_1 \overline{\sigma}_{(n+1)}$   $\beta_1 = \frac{q_{(n+1)}}{r_{(n+1)}}$ ;  $\sigma_{(n+1)} = \beta_1 \overline{\sigma}_{(n+1)}$  (35)  
 $\beta_2 = \frac{H_0 r_{(n+1)} - q_{(n+1)}}{r_{(n+1)}^2}$   $\beta_2 = -\frac{q_{(n+1)}}{r_{(n+1)}^2} \left[ -\frac{H_0 r_{(n+1)}}{q_0} + 1 \right]$  (36)

#### 4.3 Modulo tangente algorítmico

Para la implementación del modelo en un esquema iterativo de Newton-Raphson, es necesario calcular la linealización exacta del esquema constitutivo. En este sentido la primera variación de la expresión de equilibrio y de la ecuación adicional de gradientes se plantea:

$$\delta \mathbf{f}_{int\,(n+1)}^{\mathbf{u}} = \mathbf{K}^{\mathbf{u}\mathbf{u}} \,\,\delta \,\,\hat{\mathbf{u}}_{(n+1)} + \mathbf{K}^{\mathbf{u}\bar{\tau}} \,\,\delta \,\,\hat{\overline{\tau}}_{\varepsilon\,(n+1)} \tag{37}$$

$$\delta f_{int(n+1)}^{\bar{\tau}} = \mathbf{K}^{\bar{\tau}\mathbf{u}} \,\delta \mathbf{u}_{(n+1)}^{\hat{\tau}} + \mathbf{K}^{\bar{\tau}\bar{\tau}} \,\delta \bar{\tau}_{\varepsilon(n+1)}^{\hat{\tau}}$$
(38)

en donde se define:

$$\mathbf{K}^{\mathbf{u}\mathbf{u}} = \int_{\Omega^{E}} (\mathbf{B}_{\mathbf{u}}^{T} \ \boldsymbol{\beta}_{1} \ \mathbf{C} \ \mathbf{B}_{\mathbf{u}}) \, \mathrm{d}\Omega^{E}$$
(39)

$$\mathbf{K}^{\mathbf{u}\overline{\tau}} = \int_{\Omega^{E}} (\mathbf{B}_{\mathbf{u}}^{T} \,\alpha \,\beta_{2} \,\overline{\mathbf{\sigma}}_{(n+1)} \,\mathbf{N}_{\overline{\tau}}) \,\mathrm{d}\Omega^{E}$$
(40)

$$\mathbf{K}^{\bar{\tau}\mathbf{u}} = \frac{1}{\tau_{\varepsilon(n+1)}} \int_{\Omega^{E}} (\mathbf{N}_{\bar{\tau}}^{T} \, \overline{\mathbf{\sigma}}_{(n+1)}^{T} \, \mathbf{B}_{\mathbf{u}}) \, \mathrm{d}\Omega^{E}$$
(41)

$$\mathbf{K}^{\overline{\tau}\overline{\tau}} = \int_{\Omega^{E}} (\mathbf{B}_{\overline{\tau}}^{T} c \, \mathbf{B}_{\overline{\tau}} + \mathbf{N}_{\overline{\tau}}^{T} \, \mathbf{N}_{\overline{\tau}}) \, \mathrm{d}\Omega^{E}$$
(42)

(note que se suprime por legibilidad el supraíndice *h* que hace referencia a campos discretos).

La forma explícita del tensor constitutivo algorítmico resulta en consecuencia:

$$\mathbf{C}_{(n+1)}^{TAN} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}^{\mathbf{u}\mathbf{u}} & \mathbf{K}^{\mathbf{u}\tau} \\ \mathbf{K}^{\overline{\tau}\mathbf{u}} & \mathbf{K}^{\overline{\tau}\overline{\tau}} \end{bmatrix}$$
(43)

#### **5 RESULTADOS NUMERICOS**

Se considera, para todos los ejemplos estudiados, elementos triangulares y cuadrangulares con interpolación cuadrática en desplazamientos y lineal en deformación equivalente no local.

#### 5.1 Test de tracción

El problema consiste en estirar uniaxialmente una barra, bajo hipótesis de estado plano de deformación, hasta que el proceso de degradación por daño produzca la falla material. Los parámetros geométricos y mecánicos utilizados para la simulación numérica son (figura 1a): longitud de la barra L=100 [mm], área A=10 [mm<sup>2</sup>], tensión última  $\sigma_u=2$  [N/mm<sup>2</sup>], módulo de Young E=20000 [N/mm<sup>2</sup>], ablandamiento lineal caracterizado por un módulo inicial  $H_0=-0.008$  (disipación mecánica máxima *Dmech*=0.0125 [N/mm<sup>2</sup>]). Para activar el mecanismo de localización se perturba la región central de la barra en una longitud lp=10 [mm] en donde la tensión última se reduce un 10%. El parámetro longitud intrínseca microestructural  $l_c$  está representado por un coeficiente c=1 [mm<sup>2</sup>]. Por condiciones de simetría sólo se modela la mitad de la barra.

En la figura 1b se han dibujado curvas carga desplazamiento para distintos niveles de discretización (160, 320, 640 elementos cuadrangulares). Estos resultados concuerdan con los obtenidos por Peerlings et al.<sup>13</sup> y claramente muestran convergencia a una solución con energía de fractura finita, conforme se refina la malla.



Figura 1: a) Geometría de la estructura. b) Curva carga desplazamiento para distintas mallas.

La evolución de la variable interna de daño y la deformación equivalente no local, sobre distintos puntos en la curva de equilibrio, puede observarse en la figura 2 en la semilongitud de la barra (test de 640 elementos).



En este caso, la formulación es capaz de capturar adecuadamente el proceso de incremento de deformación en la zona de localización y descarga elástica fuera de la misma.

Figura 2: Curvas de evolución: a) Daño. b) Deformación no local equivalente.

Se supone ahora la barra con idénticas características geométricas y mecánicas pero con un mecanismo de ablandamiento de tipo exponencial con un módulo inicial  $H_0$ =-0.016.

La curva de respuesta fuerza desplazamiento es significativamente diferente (ver figura 3a) respondiendo al tipo de ley impuesta. La figura 3b revela una falencia propia de la formulación. Como se observa para el punto C la curva de daño prácticamente ha alcanzado su valor máximo, sin embargo a partir de ese momento incrementos de deformación producen un fenómeno de difusión del daño desde el centro hacia los extremos de la barra. Este mecanismo conduce a un mal condicionamiento del sistema de ecuaciones y dificultades para continuar con el análisis más allá del punto E. En estas circunstancias, la inclusión de una discontinuidad en desplazamientos parece ser una estrategia adecuada capaz de incorporar una condición de borde libre de tensiones y evitar el proceso de propagación espúreo del daño<sup>15</sup>.



Figura 3: a) Curva carga desplazamiento. b) Evolución del daño.

#### 5.2 Viga de 3 puntos

Este ejemplo representa un test clásico de flexión simple para fomentar el modo I de fractura en una viga de H°. Consiste en imponer un desplazamiento vertical monótonamente creciente en correspondencia con una entalla practicada en la estructura que favorece la iniciación de la fisura. Las características geométricas pueden observarse en la figura 4a. Los parámetros mecánicos utilizados para el análisis son los siguientes: E=300000 [kg/cm<sup>2</sup>], v=0.20,  $\sigma_u=33$  [kg/cm<sup>2</sup>], e=5 [cm] (espesor de la viga). La caracterización del modelo constitutivo se realizó teniendo en cuenta varios aspectos: un coeficiente c=0.01[cm<sup>2</sup>] (de acuerdo con los trabajos de M.G.D. Geers et al.<sup>16</sup>), un modelo de daño exponencial modificado para que la degradación se produzca sólo en tracción, y un módulo de ablandamiento por deformación  $H_0$ =-0.026 tal que se verifique la energía de fractura correspondiente al material en estudio (aproximadamente *Gf*=0.120 [kg/cm]).



Figura 4: a) Geometría de la estructura. b) Curva carga desplazamiento.

La curva carga desplazamiento se ajusta bastante bien a resultados experimentales y es comparable con otro tipo de aproximaciones (figura 4b). En la figura 5 puede observase un detalle de la discretización en la zona próxima a la entalla y la posición deformada para el máximo desplazamiento impuesto. Un total de 2770 elementos triangulares se han utilizado para la simulación numérica.



Figura 5: Geometría deformada.

La figura 6 pone de manifiesto la capacidad de la formulación para predecir modos de propagación de fisura en función de la evolucón de la variable interna de daño.



Figura 6: Mapa de distribución de daño.

#### **6** CONCLUSIONES

Se ha estudiado e implementado un modelo constitutivo de daño isótropo con ablandamiento lineal y exponencial enriquecido con una formulación de gradientes implícita para simular numéricamente el comportamiento de materiales frágiles.

En vista de los resultados obtenidos puede decirse que el esquema resulta adecuado como limitador de localización, evita la pérdida de elipticidad en la ecuación de equilibrio incremental, predice modos de iniciación y propagación de fisura físicamente correctos, además permite obtener objetividad en la respuesta para un adecuado nivel de discretización. El valor de la carga límite y el comportamiento post-pico pueden ajustarse bastante bien a resultados experimentales en función de los parámetros que gobiernan el modelo.

Un aspecto importante a destacar es que la dirección de crecimiento de la fisura surge en forma natural de la evolución de la variable de daño, este hecho representa una ventaja evidente frente a formulaciones tales como discontinuidades fuertes en las cuales es necesario asumir previamente tal trayectoria de propagación.

Como desventaja debe mencionarse la necesidad de una densidad de malla bastante importante para poder modelar los elevados gradientes de deformación que se producen en la zona de localización. La difusión espúrea del daño, evidenciada principalmente por el modelo con ablandamiento exponencial, restringe severamente la posibilidad avanzar sobre la curva de equilibrio (cuando se alcanza daño unitario en algún punto del sólido), condición necesaria para modelar estructuras reales.

En síntesis del presente trabajo se concluye que la mecánica del continuo enriquecida con formulaciones de gradientes (o no locales en general) representa una estrategia adecuada para simular los procesos inelásticos en donde el mecanismo predominante es la degradación material y la micro fisuración asociada. Cuando tales micro-fisuras coalescen y originan macro fisuras la cinemática del continuo es demasiado pobre para capturar la situación real. Este inconveniente sugiere la necesidad de introducir de forma explícita en el modelo numérico, la discontinuidad real que se produce en el sólido.

En este contexto las líneas de investigaciones futuras se centraran en dos aspectos básicos:

 Evaluar posibilidad de incluir consistentemente en la formulación, tecnología de elementos finitos con discontinuidades en desplazamientos (fuertes), con el objeto de simular la condición de contorno sin tensión que se agrega al problema cuando se alcanza el valor crítico de la variable de daño. Este tipo de estrategia ya ha sido insinuada por algunos investigadores con resultados, hasta el momento, poco satisfactorios. Estudiar con mayor profundidad la caracterización constitutiva, en el sentido de estimar los parámetros del modelo (básicamente H<sub>0</sub> o Dmech) para que dada una longitud intrínseca material lc, incluida en la formulación mediante el coeficiente c, se obtenga finalmente la energía de fractura correspondiente a dicho material.

## 7 REFERENCIAS

- [1] L.M. Kachanov, 'On the time to failure under creep conditions", *Izv. Akad. Nauk. SSSR*, *Otd. Tekhn. Nauk.*, **8**, 26-31 (1958).
- [2] J. Lemaitre, J.-L. Chaboche, *Mechanics of Solid Materials*, Cambridge University Press., Cambridge (1990).
- [3] R. Hill, "Acelerations waves in solids", J. Mech Phys. Solids, 10, 1-16 (1962).
- [4] J.W. Rudnicki, J.R. Rice, 'Conditions for the localization of deformation in pressuresensitive dilatant materials", J. Mech. Phys. Solids, 23, 371-394 (1975).
- [5] J.R. Rice, "The localization of plastic deformation", *in: Koiter, W.T. et al. (Eds.), Theoretical and Applied Mechanics. Proc. 14th IUTAM. Congress. North-Holland, Amsterdam,* 207–220 (1976).
- [6] Z.P. Bažant and F. Lin, "Nonlocal Yield Limit Degradation", Int. J. Num. Meths. Engng., 26, 1805-1823 (1988).
- [7] E.C. Aifantis, 'On the Role of Gradients in the Localization of Deformation and Fracture', *J. Engng. Sci*, **30**, 1279-1299 (1984).
- [8] D. Lasry and T. Belytschko, 'Localization Limiters in Transient Problems', *Int. J. Solids Struct.*, **24**, 581-597 (1988).
- [9] R.H.J. Peerlings, R. de Borst, W.A.M. Brekelmans, M.G.D. Geers, 'Localization issues in local and nonlocal continuum approaches to fracture', *European Journal of Mechanics A/Solids*, 21, 175-189 (2002).
- [10] R.H.J. Peerlings, M.G.D Geers, R. de Borst, W.A.M. Brekelmans, "A critical comparison of nonlocal and gradient-enhanced softening continua", *International. Journal of Solids* and Structures, 38, 7723-7746 (2001).
- [11] C. Polizzotto, G. Borino and P. Fuschi, "A Thermodynamically Consistent Formulation of Nonlocal and Gradient Plasticity", *Mech. Research. Comm.*, 25, 75-82 (1997).
- [12] J. Oliver, "On the discrete constitutive models induced by strong discontinuity kinematics and continuum constitutive equations", *Int. J. Solids Struct.*, **37**, 7207-7229 (2000).
- [13] R.H.J. Peerlings, R. De Borst, W.A.M. Brekelmans, J.H.P de Vree, 'Gradient Enhanced Damage for Quasi-Brittle Materials', *Int. J. Num. Meths. Engng.*, **39**, 3391-3403 (1996).
- [14]H..-B. Mühlhaus and E.C. Aifantis, "A variational principle for gradient plasticity", *Int. J. Solids Struct.*, **28**, 845-857 (1991).
- [15] A. Simone, G.N. Wells and L.J. Sluys, 'Discontinuities in regularised media', VII International Conference on Computational Plasticity COMPLAS 2003.
- [16] M.G.D. Geers, R. De Borst, R.H. Peerlings, 'Damage and crack modeling in single-edge and double-edge notched concrete beams', *Engng. Fracture Mech.*, **65**, 247-261 (2000).