



Modelado de la singularidad de borde libre en grietas 3D mediante XFEM y armónicos esféricos



V.F. González-Albuixech*, E. Giner y J.E. Tarancón

Centro de Investigación de Tecnología de Vehículos - CITV, Dpto. de Ingeniería Mecánica y de Materiales, Universitat Politècnica de València, Camino de Vera s/n, 46022 Valencia, España

INFORMACIÓN DEL ARTÍCULO

Historia del artículo:

Recibido el 22 de octubre de 2013
Aceptado el 11 de diciembre de 2013
On-line el 4 de julio de 2014

Palabras clave:

Singularidad de esquina
Singularidad de borde libre
XFEM
Enriquecimientos

Keywords:

Corner singularity
Free border singularity
XFEM
Enrichments

R E S U M E N

Una singularidad que puede aparecer en la mayoría de los problemas de fractura tridimensional bajo comportamiento elástico es la singularidad de esquina o de borde libre, localizada en la intersección del frente de grieta con una frontera libre. Sin embargo, su efecto es habitualmente ignorado. Por otro lado, el método de los elementos finitos extendido, XFEM, es una técnica que permite el modelado numérico eficiente de problemas de fractura, para lo que incorpora la geometría de la grieta a través de funciones de enriquecimiento dentro de un modelo de elementos finitos, cuya malla ya no necesita adaptarse a la geometría de la fisura. Sin embargo, cuando se aplica al estudio de problemas de fractura que presentan singularidad de esquina, esta no se captura adecuadamente. La razón es que las funciones de enriquecimiento del XFEM solo describen la singularidad típicamente asociada al frente de grieta. Por tanto, para poder modelar la singularidad del borde libre es necesario su introducción en el enriquecimiento. En este trabajo presentamos un nuevo conjunto de funciones de enriquecimiento basadas en armónicos esféricos que consiguen introducir el comportamiento asociado a la singularidad de borde libre.

© 2013 CIMNE (Universitat Politècnica de Catalunya). Publicado por Elsevier España, S.L.U. Todos los derechos reservados.

Modeling of the free border singularity in 3D cracks using XFEM and spherical harmonics

A B S T R A C T

One type of singularity that may appear in a three-dimensional fracture problem under elastic behavior is the free corner singularity, which occurs at the intersection of the crack with a free boundary and whose effect is usually ignored. The extended finite element method (XFEM) is a technique that allows the efficient numerical modeling of fracture problems, by using enrichment functions within a finite element model that incorporate the geometry and effect of the crack. However, when applied to the study of a problem with corner singularity, the singular behavior is not properly captured. The reason is that the usual enrichment in the XFEM only describes the typical crack front singularity. Hence, in order to include the effect of the free border singularity, the enrichment has to be modified. In this work, we present a new set of functions which relies on spherical harmonics and is able to capture the behavior of the free border singularity.

© 2013 CIMNE (Universitat Politècnica de Catalunya). Published by Elsevier España, S.L.U. All rights reserved.

1. Introducción

El estudio de la singularidad que aparece en la intersección del frente de grieta con una superficie libre bajo comportamiento elástico, conocida como singularidad de esquina, de borde libre o de *vertex*, es de gran interés. Sin embargo, a pesar de diversos

* Autor para correspondencia: Actualmente: Laboratory for Nuclear Materials, Paul Scherrer Institut. 5232 Villigen PSI, Suiza
Correos electrónicos: vigonal@upvnet.upv.es, vicente.gonzalez@psi.ch
(V.F. González-Albuixech).

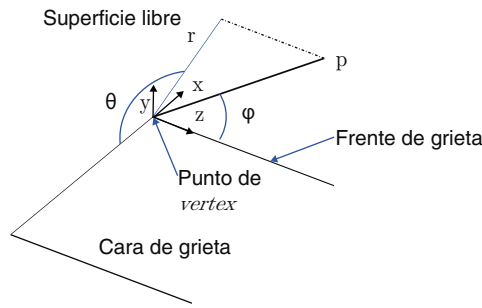


Figura 1. Sistema esférico de coordenadas definido en el punto de intersección de la grieta con la superficie libre.

estudios previos [1], aún no se han logrado resultados teóricos sobre el estado tensional existente. Además, las únicas formulaciones disponibles están limitadas a casos particulares [2-5].

Debido a la falta de resultados analíticos o experimentales que permitan el desarrollo de un modelo aproximado, la consideración de este efecto se suele realizar mediante métodos numéricos [6-11]. Aun así, debido a las complicaciones asociadas al modelado y a la discretización mediante elementos finitos, lo habitual es ignorar su efecto, ya que su zona de influencia es pequeña en relación con la zona de influencia de la singularidad del frente de grieta [6,7,12]. Sin embargo, su presencia modifica el comportamiento en fatiga [9,12-14] y, por tanto, debe tenerse en cuenta para un estudio adecuado.

Por otro lado, el método de los elementos finitos extendido -XFEM- es una técnica numérica que simplifica el estudio de problemas de mecánica de la fractura [15-17]. No obstante, cuando se utiliza el XFEM para estudiar una grieta tridimensional que presenta singularidades de esquina, las funciones de enriquecimiento usuales solo describen la singularidad típica del frente de grieta y no permiten capturar correctamente otras singularidades. Para describir mejor el efecto de esquina, en este trabajo proponemos añadir un conjunto de nuevas funciones de enriquecimiento que puedan representar la singularidad de borde libre.

Habitualmente, para definir las funciones de enriquecimiento, utilizadas en un problema, se parte de una expresión analítica conocida del campo de desplazamientos o de tensiones. Sin embargo, no se conoce ninguna expresión analítica para el comportamiento asociado a la singularidad de borde libre, por lo que no se dispone de una expresión a partir de la cual se puedan construir las funciones de enriquecimiento. Por tanto, se ha intentado capturar el efecto de esta singularidad mediante un enriquecimiento genérico.

2. Singularidad de borde libre

La singularidad de borde libre, que aparece en la intersección entre un frente de grieta tridimensional y una superficie sin restricciones, es un tipo de comportamiento singular propio de la mecánica de la fractura tridimensional y presenta un comportamiento que no se corresponde con la singularidad clásica de los campos de Williams presente en el frente de grieta, tal y como se acepta en mecánica de la fractura. Este problema y su influencia en la propagación por fatiga han motivado que desde los años setenta del siglo pasado se esté intentando, sin éxito, llegar a una expresión analítica para su aproximación [2-8,18-20]. Sin embargo, se acepta que, en las cercanías del *vertex*, el campo de tensiones muestra un comportamiento esférico y, así, se le asocia un sistema local de referencia esférico con coordenadas (ρ, θ, ϕ) centrado en el *vertex* (fig. 1), en contraposición al sistema local cilíndrico, de coordenadas (r, θ, z) , usado en la descripción habitual de la grieta de mecánica de la fractura según los campos de Williams y definido de forma que el eje z coincida con el frente de grieta.

Tabla 1

Valores de λ . Orden de singularidad de esquina dependiente del coeficiente de Poisson ν .

ν	$-\lambda$
0,0	-0,5
0,15	-0,4836
0,3	-0,4523
0,4	-0,4132
0,5	-0,3318

Designando σ_{ij}^{bl} al campo de tensiones para la singularidad de borde libre, este presenta la siguiente forma funcional [7]:

$$\sigma_{ij}^{bl} = \frac{K_{bl}}{\sqrt{2\pi}} \rho^{-\lambda} f_{ij}(\theta, \phi) \quad (1)$$

En esta relación, el término $f_{ij}(\theta, \phi)$ corresponde a una función angular esférica sin expresión analítica conocida. Además, $f_{ij}(\theta, \phi)$ y λ dependen de ν , es decir, del coeficiente de Poisson. K_{bl} se corresponde con el concepto intuitivo del factor de intensidad de tensiones, FIT, en dicho punto, aunque existen diferencias desde un punto de vista estricto. Hay que destacar que en problemas de modo I, K_{bl} es tal que, si el frente de grieta es recto e intersecta perpendicularmente con la superficie libre, el FIT en modo I para la zona donde hay *vertex* disminuye bruscamente. Este comportamiento es uno de los efectos más documentados de dicha singularidad [7,8].

La dependencia de λ con ν , para una grieta perpendicular a la superficie libre, se estudia en [4], obteniéndose los resultados de la tabla 1.

3. Enriquecimiento para la singularidad de borde libre

A continuación se propone un enriquecimiento para el modelado de la singularidad de borde libre basado en armónicos esféricos. El objetivo es introducir un enriquecimiento genérico para fenómenos cuya influencia se extienda esféricamente y aplicarlo al caso de la singularidad de borde libre.

3.1. Breve introducción a los armónicos esféricos

Se conoce como armónicos esféricos a la parte angular de un conjunto de soluciones de la ecuación de Laplace en coordenadas esféricas. Además, son funciones asociadas a los polinomios de Legendre y pueden generarse directamente a partir de ellos mediante recurrencias [21-23]. Las funciones normalizadas de armónicos esféricos denominados mediante $Y_{lm}(\theta, \phi)$ son:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (2)$$

siendo $P_l^m(\cos \theta)$ los polinomios asociados de Legendre definidos por:

$$P_l^m(\cos \theta) = (1 - \cos^2 \theta)^{l/2} \times \sum_{k=l}^m \frac{m!}{2^m k!} \frac{(l+m)! (\cos \theta - 1)^{m-k} (\cos \theta + 1)^{k-l}}{(l+m-k)! (m-k)! (k-l)!} \quad (3)$$

La representación habitual de las 4 primeras bandas de los armónicos esféricos reales se puede apreciar en la figura 2.

Los armónicos esféricos presentan relaciones de completitud, ortogonalidad y normalidad, constituyendo una base completa para las funciones con dependencia angular esférica. Por tanto, toda función que presenta solo dependencia angular del sistema de

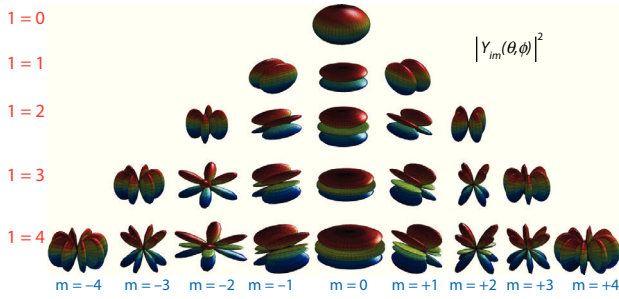


Figura 2. Ilustración que muestra la forma de los primeros armónicos esféricos $l=0, 1, 2, 3, 4$.

referencia esférico puede ser expresada en términos de armónicos esféricos, por ejemplo:

$$g(\lambda; \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (4)$$

donde a_{lm} es el coeficiente real asociado con el armónico esférico $Y_{lm}(\theta, \phi)$ y que se debe determinar para cada problema.

3.2. Armónicos esféricos como enriquecimiento para la singularidad de borde libre

Si consideramos la ecuación (1) y la relación de la ecuación (4), entonces es posible utilizar los armónicos esféricos para intentar reproducir la parte angular del campo de desplazamientos de la singularidad. Consecuentemente, es posible introducir un nuevo conjunto de funciones de enriquecimiento relacionadas con el campo de desplazamientos, como:

$$G_{lm}(\rho, \theta, \phi) = \rho^{-\lambda+1} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (5)$$

Así se puede expresar el desplazamiento en la aproximación de XFEM para simular la existencia de grietas, incluyendo la singularidad de borde libre o esquina, por:

$$u_{xfem}(\mathbf{x}) = \sum_{i \in I} N_i(\mathbf{x}) u_i + \sum_{i \in J} N_i(\mathbf{x}) [H(\mathbf{x}) - H(\mathbf{x}_i)] a_i + \sum_{i \in K} N_i(\mathbf{x}) \sum_{\alpha=1}^4 [F_{\alpha}(\mathbf{x}) - F_{\alpha}(\mathbf{x}_i)] b_i + \sum_{i \in V} N_i(\mathbf{x}) \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l [G_{lm}(\mathbf{x}) - G_{lm}(\mathbf{x}_i)] c_{ilm} \quad (6)$$

donde los subconjuntos J y K contienen los nodos enriquecidos de la aproximación clásica de XFEM, V contiene los nodos enriquecidos con armónicos esféricos, y a_i , b_i y c_{ilm} son los correspondientes grados de libertad de cada enriquecimiento. Los grados de libertad u_i se corresponden con los desplazamientos nodales. La selección del conjunto V se realiza tomando los elementos que incluyan el punto *vertex* y cuyos nodos pertenezcan al subconjunto K . El número de términos de armónicos esféricos añadidos se controla con L .

Hay algunos aspectos delicados para la construcción y el enriquecimiento del subconjunto V . La primera dificultad es la elección del orden de singularidad, siendo λ el indicado en la tabla 1. La segunda complicación es que la influencia de la singularidad de borde libre únicamente se aprecia en una región pequeña y cercana al punto de singularidad, cuyo tamaño es desconocido e implica limitaciones respecto al tamaño de elemento.

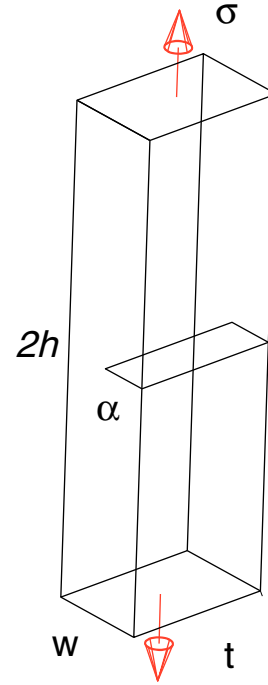


Figura 3. Esquema geométrico.

4. Verificación numérica

4.1. Modelo geométrico y problema de referencia

Para la verificación se considera un caso tridimensional en modo I. La geometría corresponde a una placa rectangular de espesor t , anchura w y altura $2h$ (fig. 3), con una grieta de longitud a . La placa tiene las siguientes dimensiones: $a/t=0,5$, $w/t=1,5$ y $h/t=2,5$. El coeficiente de Poisson es 0,3 y el módulo de Young es 20.000 unidades. Este problema se utiliza para estudiar la singularidad de borde libre en [24], tomando el valor de $\lambda=0,5$. El cálculo de los FIT de un problema similar aparece en [25] y, además, es empleado como problema de referencia en [15] para la verificación del XFEM. Para el estudio se considera un sistema coordenado cartesiano centrado en el frente de grieta y localizado en el plano medio del espesor del modelo geométrico.

4.2. Modelos de elementos finitos

Se han construido 2 modelos. El primero, realizado en ABAQUS, utiliza una malla estándar de elementos finitos (fig. 4) y gracias a las simetrías, presentes en el plano de grieta y en el plano medio, solo ha sido necesario considerar un cuarto de la placa. La malla presenta 2 regiones: una que está adaptada a la singularidad y a la morfología de la grieta, concentrada hacia el borde libre, y la otra que permite capturar el comportamiento general del modelo. Se han utilizado elementos tipo hexaedro y prisma de orden cuadrático, con 20 nodos por elemento, siendo el tamaño mínimo de elemento del orden de $0,002a$. Este modelo se utiliza para obtener una solución de referencia con la que comparar los demás resultados.

El segundo modelo de elementos finitos lineales se ha creado para la aproximación de XFEM y utiliza una malla regular de hexaedros (fig. 5). Solo se ha aplicado la simetría que aparece en el plano medio, analizando una secuencia de mallas para observar el efecto del enriquecimiento, con un tamaño de elemento respecto a la longitud de grieta de $0,125a$, $0,083a$ y $0,062a$.

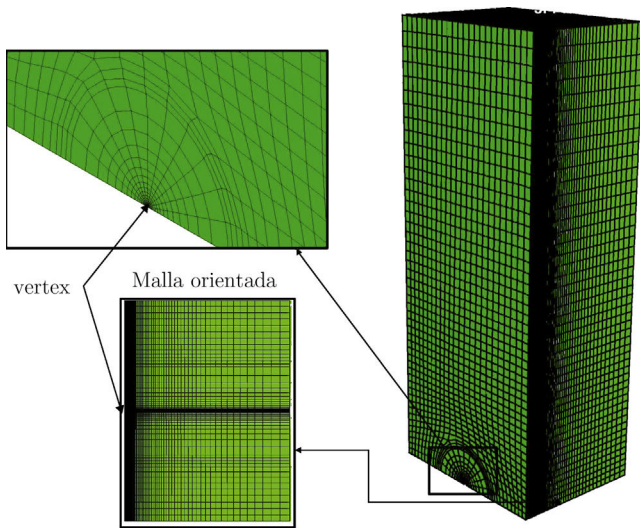


Figura 4. Malla adaptada al problema en ABAQUS. Se puede observar el refinamiento concentrado hacia el vertex.

4.3. Resultados para los factores de intensidad de tensiones

Los resultados obtenidos con los 2 modelos de elementos finitos se comparan con la solución que aparece en [24]. Se realiza un análisis usando 3 tamaños de elemento en la malla de XFEM. El tamaño de elemento se elige observando la solución de referencia y la obtenida mediante ABAQUS. En estas soluciones la región de singularidad de esquina es alrededor del 3% de la longitud del frente de grieta, t . Se construyen 3 mallas: una con un tamaño de elemento más grande que la región de singularidad ($0,125a$), otra con un tamaño de elemento similar ($0,083a$) y otra, la tercera, con un tamaño de elemento inferior ($0,062a$).

Este problema presenta una configuración de modo I puro. Se puede, por tanto, utilizar la integral J para extraer el FIT. Los resultados de los FIT para diversos órdenes de armónicos esféricos, seleccionados mediante L , se presentan en las figuras 6, 7 y 8. En estas gráficas se puede apreciar que el comportamiento de la singularidad de borde libre en los FIT se captura mejor si se usan algunos términos de enriquecimiento mediante armónicos esféricos.

En la zona de la intersección de la grieta con el borde libre, se detecta una caída brusca en los FIT para la solución de elementos finitos muy refinada que se toma como referencia. Sin embargo, el FIT obtenido mediante XFEM sin armónicos esféricos no muestra tal comportamiento, al igual que si solo se introduce el primer término

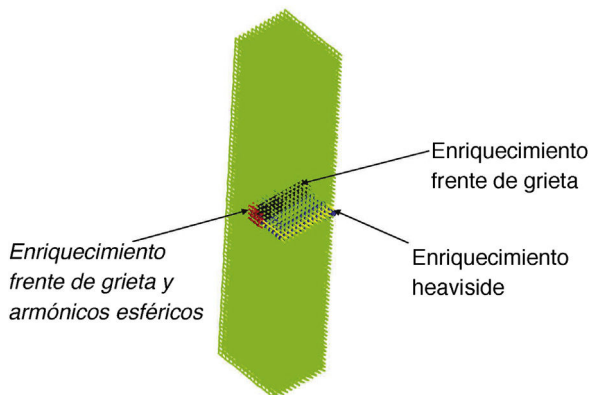


Figura 5. Ejemplo de una de las mallas para el análisis con XFEM. Se pueden observar las regiones enriquecidas.

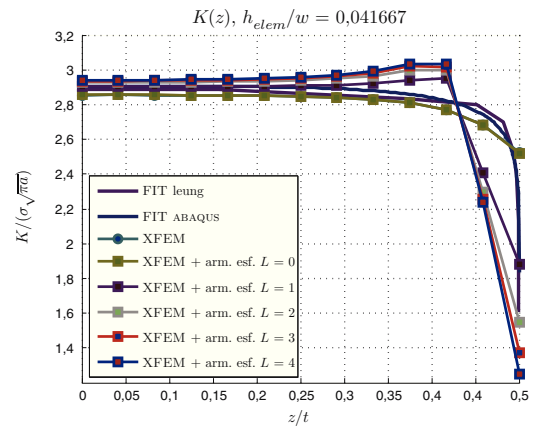


Figura 6. FIT, tamaño de elemento mayor que la región afectada, $h_{elem}=0,125a$.

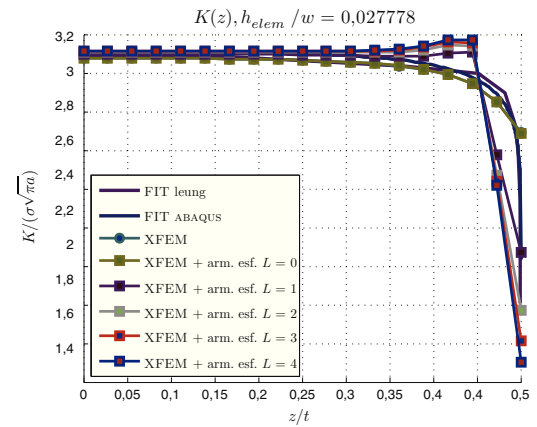


Figura 7. FIT, tamaño de elemento similar a la región afectada, $h_{elem}=0,083a$.

de armónicos esféricos. De hecho, ambos valores coinciden en las gráficas.

A medida que se añaden más términos, correspondientes a armónicos esféricos, esta caída brusca también aparece, como se puede observar a partir de $L = 1$. Más aún, a partir de $L = 3$ el efecto de la mejora se estabiliza. Por tanto, únicamente es necesaria la introducción de un número finito de términos para mejorar la solución. Este resultado está de acuerdo con la experiencia en otros ámbitos tratados con desarrollos en armónicos esféricos [21-23].

Se observa, también, que el enriquecimiento con armónicos esféricos introduce comportamientos no deseados. Este

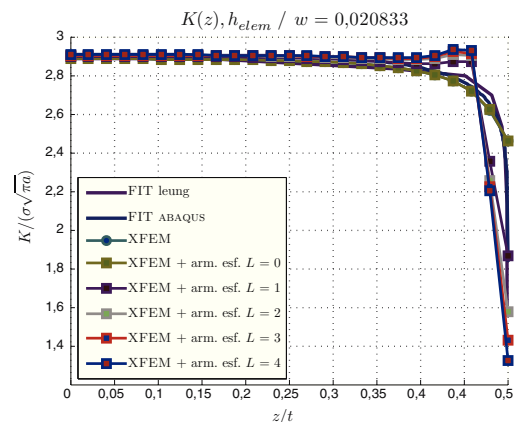


Figura 8. FIT, tamaño de elemento inferior a la región afectada, $h_{elem}=0,062a$.

comportamiento se aprecia en el aumento incorrecto del FIT justo antes de la zona afectada por la singularidad de borde libre, $z/t \approx 0,40 - 0,45$, siendo mayor para tamaños de elemento muy grandes y disminuyendo conforme se refina. Se trata de un efecto de la zona de transición, es decir, de los elementos no totalmente enriquecidos, fenómeno que también se encuentra para el enriquecimiento habitual de XFEM.

Hay que destacar que, dado que el enriquecimiento con armónicos esféricos simplemente constituye una base para efectos esféricos, se puede utilizar para introducir cualquier efecto local con comportamiento esférico, para lo cual, habitualmente, solo es necesario considerar un número finito de términos de enriquecimiento. Sin embargo, hay que considerar los problemas en la zona de transición. Existe también la posibilidad de que se introduzca una contaminación en la solución para mallas no suficientemente refinadas si la zona enriquecida es mucho mayor que la región afectada por la singularidad. Estos efectos pueden suponer limitaciones desde un punto de vista práctico.

5. Conclusiones

En este trabajo se ha propuesto un nuevo enriquecimiento capaz de modelar y capturar parte del comportamiento de la singularidad de esquina. El comportamiento en el factor de intensidad de tensiones en la región cercana a la singularidad de esquina muestra una mejora respecto al enriquecimiento estándar de XFEM. Más aún, para esta mejora en los resultados solo se necesitan unos pocos términos del nuevo enriquecimiento. Hay que añadir que, al ser la aplicación de una base genérica para efectos esféricos, también constituye una opción natural para la simulación de otros efectos esféricos, como inclusiones, mediante una aproximación de XFEM.

Sin embargo, también se puede observar que aparece un comportamiento no deseado en la zona de transición entre la región dominada por la singularidad del frente de la grieta y la zona dominada por la singularidad de esquina. Dado que la región exacta de influencia del borde libre y el orden de la singularidad no se conocen con exactitud, es necesario seguir investigando para lograr una mejor comprensión de la singularidad en el punto de *vertex*. No obstante, el nuevo enriquecimiento también puede ser utilizado como una herramienta con este objetivo: puede emplearse para aumentar la información sobre la parte angular –comparando los grados de libertad asociados a cada término de enriquecimiento– y como función de prueba para realizar estudios sobre los diferentes órdenes de singularidad, permitiendo hacer comparaciones y análisis de la influencia de cada expresión, lo que será objeto de estudio en trabajos futuros.

Bibliografía

- [1] Z.P. Bažant, L.F. Estenssoro, Surface singularity and crack propagation, *Int. J. Solids Struct.* 15 (1979) 405–426.
- [2] G.C. Sih, A review of the three dimensional stress problems for a cracked plate, *Int. J. Fract. Mech.* 71 (1) (1971) 39–61.
- [3] E.S. Folias, On the three-dimensional theory of cracked plates, *Trans. ASME (Ser E), J. Appl. Mech.* 42 (1975) 663–674.
- [4] J.P. Benthem, State of stress at the vertex of quarter-infinite crack in a half-space, *Int. J. Solids Struct.* 13 (1977) 479–492.
- [5] W.X. Zhu, Singular stress field of three-dimensional crack, *Engng. Fracture Mech.* 36 (2) (1990) 239–244.
- [6] L.P. Pook, Crack profiles and corner point singularities, *Fatigue Fract. Engng. Mater Struct.* 23 (2000) 141–150.
- [7] S.W. Kwon, C.T. Sun, Characteristics of three-dimensional stress fields in plates with a through-the-thickness crack, *Int. J. Fract.* 104 (2000) 291–315.
- [8] A.Y.T. Leung, R.K.L. Su, Order of the singular stress fields of through-thickness cracks, *Finite Elem. Anal. Des.* 75 (1996) 85–93.
- [9] P. Hutař, L. Náhlík, Z. Knésl, Quantification of vertex singularities on fatigue crack behavior, *Comput. Mater Sci.* 45 (2009) 653–657.
- [10] P. Hutař, L. Náhlík, Z. Knésl, The effect of a free surface on fatigue crack behavior, *Int. J. Fract.* 32 (2010) 1265–1269.
- [11] E. Giner, B. Bognet, J.J. Ródenas, A. Leygue, F.J. Fuenmayor, F. Chinesta, The Proper Generalized Decomposition (PGD) as a numerical procedure to solve 3D cracked plates in linear elastic fracture mechanics, *Int. J. Solids Struct.* 50 (19) (2013) 1710–1720.
- [12] M. Heyder, K. Kolk, G. Kuhn, Numerical and experimental investigations of the influence of corner singularities on 3D fatigue crack propagation, *Engng. Fracture Mech.* 72 (2005) 2095–2105.
- [13] C. Seife, Columbia disaster underscores the risky nature of risk analysis, *Science* 29 (2003) 1001.
- [14] M. Hopkin, Crack detector turns train in troubleshooters, *Nature News* (2004) 04705–04710.
- [15] N. Sukumar, N. Moës, N. Moran, T. Belytschko, Extended finite element method for three-dimensional crack modelling, *Int. J. Numer. Methods Engng.* 48 (2000) 1549–1570.
- [16] N. Moës, J. Dolbow, T. Belytschko, A finite element method for crack growth without remeshing, *Int. J. Numer. Methods Engng.* 46 (1999) 131–150.
- [17] N. Moës, A. Gravouil, T. Belytschko, Non-planar 3D crack growth by the extended finite element and level sets—Part I: Mechanical model, *Int. J. Numer. Methods Engng.* 53 (2002) 2549–2568.
- [18] E.S. Folias, Method of solution of a class of three-dimensional elastostatic problems under mode I loading, *Int. J. Fract.* 16 (1980) 335–348.
- [19] E.S. Folias, The 3D stress field at the intersection of a hole and a free surface, *Int. J. Fract.* 35 (1987) 187–194.
- [20] L.P. Pook, Some implications of corner point singularities, *Engng. Fracture Mech.* 48 (3) (1994) 367–378.
- [21] N.M. Ferrers, *An elementary treatise on spherical harmonics and subjects connected to them*, Macmillan, London, 1877.
- [22] H. Groemer, *Geometric applications of Fourier series and spherical harmonics*, Cambridge University Press, New York, 1996.
- [23] J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 2nd ed, John Wiley, New York, 1985.
- [24] A.Y.T. Leung, R.K.L. Su, A numerical study of singular stress field of 3D cracks, *Finite Elem. Anal. Des.* 18 (1995) 389–401.
- [25] Raju IS, Newman JC. Three-dimensional finite-element analysis of finite-thickness fracture specimens. NASA, Report TN D-8414 May; 1977 p. 1-40.