

IMPLEMENTACIÓN DE UN ESQUEMA FFT PARA UN MODELO DE 'PHASE-FIELD FRACTURE': APLICACIÓN A METALES POLICRISTALINOS.

P. Aranda¹, G. Zarzoso², J. Segurado^{1,2}

¹Departamento de Ciencia de Materiales, E.T.S. de Ingenieros de Caminos,
Canales y Puertos, Universidad Politécnica de Madrid, C/ Profesor Aranguren s/n,
28040 Madrid, España.

E-mail: jsegurado@mater.upm.es

²IMDEA Materials Institute,
C/ Eric Kandel 2,
28906, Getafe, Madrid, España.

RESUMEN

El presente trabajo presenta el estudio mediante un modelo *Phase-Field Fracture* de la fractura de policristales metálicos a nivel mesoscópico, utilizando un entorno de cálculo basado en la transformada rápida de Fourier (FFT). La implementación en FFT del modelo resuelve el sistema acoplado de ecuaciones diferenciales resultantes de *Phase-Field Fracture* de forma escalonada e implícita. Para la ecuación de conservación del momento lineal se usa un algoritmo de Fourier-Galerkin no lineal. La ecuación de Helmholtz para la obtención del campo de daño se define como un operador diferencial lineal en el espacio de Fourier y se resuelve con el método del gradiente conjugado. Este entorno numérico se ha utilizado para resolver el problema de la fractura en paneles pre-fisurados con materiales policristalinos elásticos y elasto-plásticos. La ecuación constitutiva en el segundo caso corresponde a un modelo de plasticidad cristalina elasto-visco-plástico.

ABSTRACT

The present work presents the study of the fracture of metallic polycrystals at the mesoscopic level by means of a *Phase-Field Fracture* model, using a calculation environment based on the fast Fourier transform (FFT). The FFT implementation of the model is used to solve the coupled system of differential equations in a staggered and implicit way. For the linear momentum conservation equation a non-linear Fourier-Galerkin algorithm is used. The Helmholtz equation, obtained for calculate the damage field, is defined as a linear differential operator in Fourier space and is solved with the conjugate gradient method. This numerical environment has been used to solve fracture in pre-fissured panels with elastic and elastoplastic polycrystalline materials. The constitutive equation of the elastoplastic grains is a model of elasto-visco-plastic crystal plasticity.

1. INTRODUCCIÓN

La fractura en aleaciones metálicas está muy influenciada por su microestructura, de tal forma que la distribución de formas, tamaños y orientaciones de los granos, así como las características de los bordes de grano o bien el comportamiento elasto-plástico y tenacidad del cristal controlan la fisuración del material a nivel macroscópico.

Para la predicción de la fractura a nivel macroscópico en función de la microestructura policristalina es fundamental el desarrollo de modelos micromecánicos que permitan incluir la microestructura en la simulación del proceso de fisuración. Existen numerosos modelos para el estudio de la fractura a nivel macroscópico de materiales elasto-plásticos. Por una parte, están los modelos de daño continuo, como los de Lemaitre y Gurson. Su funcionamiento se basa en la definición de una variable interna de daño que evoluciona ligada a la deformación plástica y cuyo valor produce un ablandamiento o deterioro del material. Es conocido que estos modelos resultan en una localización de la región dañada que resulta en una dependencia patológica con el tamaño de la discretización. Sin em-

bargo, el empleo de versiones no-locales de dichos modelos permite eliminar esta dependencia de la malla. La aproximación más extendida de los modelos no-locales de daño son los modelos de gradiente. En estos modelos, la versión no local de las variables internas se obtiene resolviendo una ecuación de Helmholtz que incluye una longitud característica que controla el radio de las interacciones y determina el tamaño de las bandas de daño en el material.

Una alternativa a estos, son los modelos de fractura tipo *Phase-Field*, introducidos principalmente en [1] para la simulación de problemas de fractura elástica lineal. En este modelo la grieta y la discontinuidad que representa en el desplazamiento, son sustituidas por un campo de daño que representa una versión suave y no singular de la grieta. El modelo está inspirado en el planteamiento de Griffith y formulado de forma variacional con influencia de la energía potencial elástica y de la energía disipada por la creación de nueva superficie.

Los primeros usos de este modelo fueron en materiales elásticos [1] y más tarde el modelo se extendió a mate-

riales elasto-plásticos con modelos clásicos de plasticidad isotrópica. Sin embargo, la extensión de este modelo a plasticidad cristalina es un campo muy novedoso y fue propuesto en [2]. No obstante, las implementaciones presentadas hasta el momento están basadas en el método de elementos finitos que, por su coste computacional, restringe el tamaño y complejidad de modelos policristalinos con un gran número de granos. La alternativa de resolución mediante el uso de algoritmos basados en la FFT [3] permitiría el empleo de volúmenes representativos mucho más complejos, dada la eficiencia de esta técnica. Ya existen algunas implementaciones pioneras del modelo de *phase-field fracture* en esquemas de FFT [4], pero su extensión al estudio de la fractura en plasticidad cristalina es aún inexplorada.

En el presente trabajo se presenta una implementación de un modelo *phase-field* para el análisis de la fractura en policristales utilizando un entorno de cálculo basado en la FFT. Como aplicación se estudia el proceso de fractura en placas policristalinas pre-fisuradas con una distribución aleatoria de granos con orientaciones también aleatorias dentro del plano. Como resultado del estudio se obtienen la evolución de grieta así como las curvas fuerza desplazamiento para casos policristalinos elásticos y elasto-plásticos.

2. MODELOS

2.1. Modelo de plasticidad cristalina

El comportamiento de la microestructura es representado mediante un modelo de plasticidad cristalina. Este modelo asume una descomposición multiplicativa del gradiente de deformación

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p \quad (1)$$

en sus partes elástica, \mathbf{F}^e y plástica \mathbf{F}^p , siendo este estado de deformación el que define la configuración intermedia, libre de tensiones. Usando la configuración intermedia, el segundo tensor de Piola-Kirchoff \mathbf{S} se obtiene a partir del tensor de deformación elástico de Green \mathbf{E}^e y del tensor de rigidez elástico del cristal \mathbb{C}

$$\mathbf{S} = \mathbb{C} : \mathbf{E}^e \quad \text{con} \quad \mathbf{E}^e = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e - \mathbf{I}). \quad (2)$$

El primer tensor de Piola, empleado para resolver el problema, se relaciona con este mediante

$$\mathbf{P} = \mathbf{F}^e \mathbf{S} \mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^{-T} \quad (3)$$

El gradiente de velocidad plástico se define como la suma de las velocidades de deformación cortantes $\dot{\gamma}$ en cada uno de los sistemas de deslizamiento α característicos de la aleación

$$\mathbf{L}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} \mathbf{s}^{\alpha} \otimes \mathbf{m}^{\alpha} \quad (4)$$

siendo \mathbf{s}^{α} y \mathbf{m}^{α} los vectores unitarios en la dirección de deslizamiento y normal al plano de deslizamiento. En este estudio se supone una aleación FCC, con lo que los

sistemas de deslizamiento disponibles son los 12 sistemas octaédricos, $\mathbf{m}, \mathbf{s} \in [111] < 110 >$.

La velocidad de deformación cortante $\dot{\gamma}$ sigue una ley visco-plástica potencial

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{\alpha}}{g^{\alpha}} \right)^{\frac{1}{m}} \text{sign}(\tau^{\alpha}) \quad (5)$$

donde $\dot{\gamma}_0$ es la velocidad de deformación de referencia, m es el exponente visco-plástico y τ^{α} , g^{α} son respectivamente la tensión resuelta y la tensión crítica resuelta (CRSS) del sistema α considerado.

La evolución de g^{α} depende de un endurecimiento isotrópico y viene dada por

$$\dot{g}^{\alpha} = h_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} + \sum_{\beta \neq \alpha} q_{\alpha\beta} h_{\beta} \dot{\gamma}^{\beta} \quad (6)$$

donde $q_{\alpha,\beta}$ son los coeficientes de endurecimiento latente y h es el módulo de auto endurecimiento, dado por la expresión de Voce-Tome [5].

2.2. Modelo de fractura

Para la descripción del avance de una fisura en un dominio Ω con un contorno $d\Omega$, el modelo de *phase-field fracture* define un campo de daño, ϕ , que representa a la grieta de forma continua y suave. El campo puede tomar valores entre 0 (material no dañado) y 1 (material completamente dañado). El valor de dicho campo viene definido por la minimización de un funcional

$$\Gamma(\phi) = \int_{\Omega} \frac{1}{2\ell} \phi^2 + \frac{\ell}{2} \|\nabla\phi\|^2 d\Omega \quad (7)$$

donde ℓ es un parámetro numérico que está relacionado con el ancho donde se difunde la grieta, obteniéndose una fisura real (de ancho 0) cuando $\ell \rightarrow 0$. El valor de la integral de la ecuación (7) es igual al área real (o longitud en 2D) de la grieta representada. De esta forma se puede definir un potencial de disipación energético debido a la formación de fisuras como

$$\mathcal{D}(\phi) = \int_{\Omega} G_c \Gamma(\phi) d\Omega \quad (8)$$

Donde G_c corresponde a la energía de fractura, definida en la teoría de Griffith como la energía necesaria para crear nuevas superficies.

El efecto del daño en el comportamiento del material corresponde a una degradación de la energía interna. Sea \mathbf{u} el campo de desplazamiento, entonces la energía interna acumulada por el cuerpo viene dada por

$$\mathcal{E}(\mathbf{u}, \phi) = \int_{\Omega} g(\phi) \psi_{eo}^+ + \psi_{eo}^- + \psi_p d\Omega, \quad (9)$$

donde ψ_{eo}^+ , ψ_{eo}^- son las funciones de densidad energética elástica del material intacto a tracción y compresión respectivamente, ψ_p es la energía plástica acumulada y $g(\phi)$

es una función de degradación que determina el efecto del daño sobre la energía elástica. En este trabajo dicha función es seleccionada como $g = (1 - \phi)^2 + k$, con k como un parámetro de valor cercano a 0 para evitar problemas numéricos. En la aproximación empleada suponemos que la degradación solo se produce en la parte de la energía producida por deformación elástica positiva (ecuación (10)), asumiendo que las componentes de compresión no influyen en el crecimiento de una grieta,

$$\psi_{eo}^+(\mathbf{E}_e^+) = \frac{1}{2} \mathbf{C} : \mathbf{E}_e^+(\mathbf{u}) : \mathbf{E}_e^+(\mathbf{u}) \quad (10)$$

donde \mathbf{E}_e es el tensor de deformación elástica de Green-Lagrange, definido en la ecuación (2). Para la obtención de la parte positiva de la deformación se ha considerado una descomposición espectral [1]

$$\mathbf{E}_e^+ = \langle \lambda_1 \rangle \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \langle \lambda_2 \rangle \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \langle \lambda_3 \rangle \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 \quad (11)$$

donde las componentes λ son las deformaciones elásticas principales y la operación $\langle \bullet \rangle$ son los corchetes de Macaulay, que devuelven la parte positiva del argumento evaluado. El balance energético en el dominio Ω implica que

$$P_{ext} = \dot{D}_T + \dot{E} \quad (12)$$

donde P_{ext} es la potencia de las fuerzas externas aplicadas en la superficie y \dot{D}_T es la tasa de disipación energética total que contempla a las tasas de disipación por formación de fisuras y disipación plástica. Introduciendo las ecuaciones del modelo de plasticidad cristalina en el balance para un tiempo t , se puede derivar un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas con los campos de desplazamiento y daño como incógnita.

$$\begin{aligned} \nabla \cdot g(\phi) \mathbf{P}(\mathbf{F}(\mathbf{u}), \mathbf{F}^p, \beta) &= 0 \\ \left(\frac{G_c}{\ell} + 2\psi_{eo}^+ \right) \phi + G_c \ell \nabla^2 \phi &= 2\psi_{eo}^+ \end{aligned} \quad (13)$$

En esta derivación se ha empleado una aproximación *híbrida* [6], donde la energía elástica positiva se usa como fuerza motriz para la generación de grieta, mientras que en la tensión se asume una degradación isotropa. El valor de la tensión de Piola, $\mathbf{P}(\mathbf{F}, \mathbf{F}^p, \beta)$ viene dada por las ecuaciones del modelo elasto-visco-plástico del cristal (ecuaciones (1)-(6)), siendo β las variables de historia de la deformación plástica. Para asegurar la irreversibilidad del proceso de daño, se define en cada paso de tiempo una variable de estado $\mathcal{H}(\phi, t)$ que representa el máximo daño sufrido en un punto como, $\mathcal{H}(t) = \max(\phi(t), \mathcal{H}(t \leq t))$. Discretizando en el tiempo, con $(\cdot)_n$ en valor de los campos en $t = t_n$, e integrando con un método de backward Euler, el sistema final de ecuaciones a resolver es

$$\begin{cases} \nabla \cdot ((1 - \mathcal{H}_n)^2 + k) \mathbf{P}_n = 0 \\ \left(\frac{G_c}{\ell} + 2\psi_{eo}^+ \right) \phi_n + G_c \ell \nabla^2 \phi_n = 2\psi_{eo}^+ \\ \mathcal{H}_n(\mathbf{x}) = \max(\mathcal{H}_{n-1}(\mathbf{x}), \phi_n(\mathbf{x})) \\ \mathbf{P}_n = \mathbf{P}_n(\mathbf{F}_n, \mathbf{F}_n^p, \beta_n, \mathbf{F}_{n-1}^p, \beta_{n-1}) \end{cases} \quad (14)$$

donde la evolución de \mathbf{F}^p y β_n viene dada por las ecuaciones (4)-(6).

2.3. Homogeneización policristalina mediante FFT

El dominio de la simulación, Ω , es un elemento tridimensional representativo de la microestructura (RVE) particionado en diferentes regiones, cada una de ellas correspondiente a un grano, fig.2. El RVE es periódico y la periodicidad en los tres ejes viene dada por el tamaño de la celda $\mathbf{L} = L_1 \mathbf{e}_1 + L_2 \mathbf{e}_2 + L_3 \mathbf{e}_3$. La forma y tamaño de las regiones (granos) viene dada por una teselación de Voronoi obtenida a partir de una nube de puntos, cuyas posiciones y pesos se optimizan para que la distribución de granos resultante sea representativa del policristal simulado [3]. Finalmente, se asigna a cada grano una orientación aleatoria cuya probabilidad viene dada por la distribución de orientaciones en el policristal.

El problema de homogeneización consiste en encontrar los micro-campos de deformación, $\tilde{\mathbf{F}}$, y de daño con una historia de deformación macroscópica, $\bar{\mathbf{F}}$, dada. Los micro-campos se obtienen introduciendo la historia macroscópica a través del promedio de deformaciones, $\langle \mathbf{F}(\mathbf{x}) \rangle_{\Omega} = \bar{\mathbf{F}}$, y resolviendo el sistema de ecuaciones (14) con las condiciones de contorno periódicas $\phi(\mathbf{x} + pL_1 \mathbf{e}_1 + qL_2 \mathbf{e}_2 + kL_3 \mathbf{e}_3) = \phi(\mathbf{x})$ y $\mathbf{F}(\mathbf{x} + pL_1 \mathbf{e}_1 + qL_2 \mathbf{e}_2 + kL_3 \mathbf{e}_3) = \mathbf{F}(\mathbf{x})$, para todo $p, q, k \in \mathcal{Z}$. Como alternativa a imponer la historia del gradiente de deformación macroscópico completo, los autores han desarrollado un método [3] para imponer condiciones de contorno mixtas sin coste computacional adicional, permitiendo imponer una mezcla de componentes del gradiente de deformación macroscópico y de la tensión. El sistema ecuaciones (14) se resuelve para cada paso de tiempo n de forma secuencial e iterativa mediante un algoritmo escalonado e implícito [1], representado en la figura 1.

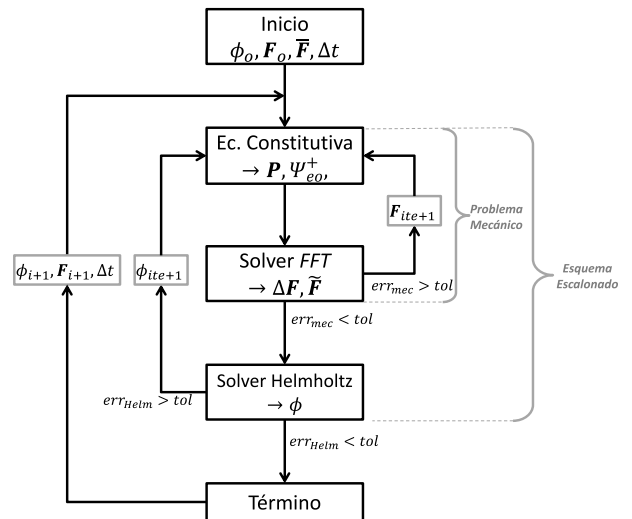


Figura 1: Esquema escalonado para la resolución del problema de fractura.

Este esquema ha sido implementado en el código de homogeneización FFTMAD, desarrollado [3] para resolver cada ecuación mediante algoritmos basados en la transformada rápida de Fourier.

Si el RVE se discretiza en una malla regular de $n_1 \cdot n_2 \cdot n_3$ puntos, da lugar al mismo número de frecuencias en el espacio de Fourier y la transformación de campos entre ambos espacios queda definida por la transformada de Fourier discreta —calculada mediante el algoritmo FFT—. La ecuación (14.1) corresponde al equilibrio mecánico y es un problema no lineal que consiste en encontrar el valor de $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ en la configuración de referencia. La tensión de Piola en cada punto viene dada por la ecuación constitutiva (ecuaciones (1)-(6)) y está pre-multiplicada a la función de degradación correspondiente al daño de una iteración previa. En esta parte del problema el campo de daño se mantiene fijo. La resolución del problema está basada en el esquema de Fourier-Galerkin [3] cuyo resultado es un sistema de ecuaciones algebraico no lineal de $9 \cdot n_1 \cdot n_2 \cdot n_3$ ecuaciones, donde las incógnitas son las componentes del gradiente de deformación en cada voxel. Dicho sistema se resuelve mediante el método del gradiente conjugado.

La ecuación (14.2) es la ecuación de Helmholtz, donde la energía elástica positiva, $2\psi_{\text{eo}}^+$, se mantiene constante y viene dada por la resolución del problema mecánico anterior. Esta ecuación se resuelve definiendo su parte izquierda como un operador lineal del campo ϕ mediante el uso de la transformada de Fourier

$$\mathcal{A}(\phi(\mathbf{x})) = \left(\frac{G_c}{\ell} + 2\psi_{\text{eo}}^+ \right) \phi + G_c \ell \mathcal{F}^{-1}[-\|\xi\|^2 \mathcal{F}(\phi)] \quad (15)$$

donde ξ es el vector de frecuencias. El resultado es un sistema lineal de tamaño $n_1 \cdot n_2 \cdot n_3$ ecuaciones en el espacio real y que también se resuelve mediante el método de gradiente conjugado

$$\mathcal{A}(\phi(\mathbf{x})) = 2\psi_{\text{eo}}^+(\mathbf{x}). \quad (16)$$

Es importante remarcar que la ventaja de definir los operadores discretos de forma explícita mediante transformadas de Fourier evita tener que calcular y guardar la matriz de coeficientes. También conviene reseñar el uso de pre-condicionadores para la resolución del problema de Helmholtz [7].

Ambas ecuaciones se resuelven de forma secuencial e iterativa según procedimiento descrito en la figura 1. El proceso acaba cuando las diferencias de los campos de deformación y daño entre dos iteraciones sucesivas sean suficientemente pequeñas, momento en el que ambos campos satisfacen a la vez al sistema de ecuaciones (14).

3. RESULTADOS

3.1. Características de las simulaciones

Los casos estudiados se realizan en un dominio tridimensional de tamaño $1 \times 2 \times 2$ mm, y discretizado en $1 \times 256 \times 256$ voxels. Las condiciones de contorno periódicas en X y el uso de un solo punto en esa dirección corresponden a un problema de deformación plana o tensión plana generalizada.

Las simulaciones se han efectuado sobre una microestructura policristalina con una distribución logarítmico-normal de tamaños de grano con valor medio es de $300 \mu\text{m}$ de diámetro (figura 2A). La placa tiene una textura de fibra, con los cristales con su dirección $[100]$ orientada perpendicular a la placa, X , y las otras direcciones orientadas de forma aleatoria. La placa se deforma imponiendo un estado de deformación medio uniaxial, a través de imponer un gradiente de deformación total $\bar{\mathbf{F}}(t)$ de valor 0 en todas las componentes menos en la dirección Y (fig. 2B), donde la deformación es proporcional al tiempo.

El panel está pre-fisurado con una grieta de 0,4mm de longitud (Fig. 2B). Dicha fisura se ha introducido como un campo de daño inicial, $\mathcal{H}_0(\mathbf{x})$. El valor de ese campo difuso (Fig. 2C) se obtuvo resolviendo la ecuación de Helmholtz con parámetro ℓ para una distribución de daño localizado en una sola fila de voxels. De esta forma, la fisura es equivalente a una desarrollada mediante mecanismos de fractura.

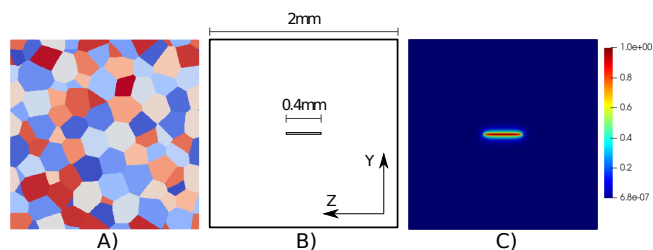


Figura 2: Representación geométrica de los casos estudiados. A) Microestructura policristalina representativa del dominio. B) Dimensiones geométricas de los casos. C) Regularización de la fisura inicial

3.2. Fractura en el material elástico

Las propiedades elásticas del cristal corresponden a una superaleación basada en níquel [8] y son $\mathbb{C}_{11} = 259$ [GPa], $\mathbb{C}_{12} = 179,1$ [GPa] y $\mathbb{C}_{44} = 109,6$ [GPa]. Las constantes usadas en el modelo de *phase-field* son $\ell = 0,03$ [mm] y $G_c = 10000$ [J/m²]. Debido a la textura de fibra en el policristal, el RVE tendrá un comportamiento transversalmente isótropo. Las propiedades elásticas efectivas del policristal se obtuvieron mediante simulaciones FFT en las diferentes direcciones, usando un RVE idéntico pero sin fisura previa.

Se realizaron dos simulaciones de la propagación de la fisura, una usando el material policristalino y otra empleando un material elástico transversalmente isótropo equivalente. Los resultados de las simulaciones se han representado en la figura 3, donde se observan los campos de daño tras la rotura del panel y los campos de tensión en el estado inmediatamente anterior al inicio de la fractura, superpuestos a la microestructura en el caso del policristal.

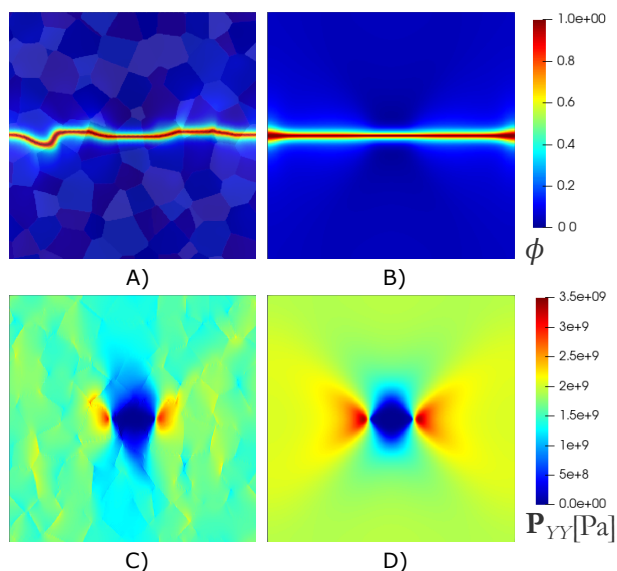


Figura 3: Simulación en materiales elásticos. A) Fisura generada en policristal elástico. B) Fisura generada en cristal homogeneizado. C) Campo de tensiones en la dirección de tracción para el policristal elástico. D) Campo de tensiones en la dirección de tracción para el cristal homogeneizado

Se puede observar que la fractura desarrollada por ambos materiales es morfológicamente distinta debido a la influencia de la microestructura. Por una parte, la fisura genera una gran concentración de energía elástica en sus extremos (figura 3C), por la otra, la microestructura genera concentraciones de tensión locales que implican una acumulación desigual en la energía de cada grano. Esto produce que el avance de la grieta, aunque dictado principalmente por el estado de tensión generado alrededor de la grieta, cambie de dirección constantemente, lo cual se ve afectado significativamente por los bordes de grano en donde se dan las mayores diferencias en el campo de tensión (figura 3A). Esto no ocurre en el caso homogeneizado, donde se observa un campo de tensiones continuo (figura 3D), y una propagación recta de la grieta (figura 3B).

Las curvas de fuerza media y desplazamiento medio en cada simulación se obtuvieron a partir del promedio volumétrico de la tensión y deformación, resultados de las simulaciones de homogeneización, y de las dimensiones del panel.

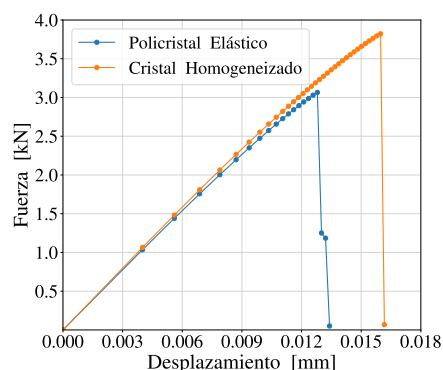


Figura 4: Curvas de Fuerza v/s desplazamiento de las simulaciones planteadas.

La semejanza inicial de las curvas se explica por la equivalencia de sus formulaciones constitutivas. Sin embargo, las diferencias en la fractura se debe al efecto de la microestructura del caso policristalino, ya que la mayor presencia de concentradores de tensión en ese caso facilitan el temprano comienzo de la grieta. Además, su grieta se desarrolla paulatinamente, ya que no todos los granos se fracturan de la misma forma, lo cual ralentiza su avance.

3.3. Fractura en material elasto-plástico

La simulación con el material policristalino se repite incorporando el modelo de plasticidad cristalina con las propiedades de endurecimiento empleadas en [8] ($\tau_0 = 465,5$ [MPa], $\tau_1 = 598,5$ [MPa], $H_0 = 6000$ [MPa] y $H_1 = 300$ [MPa]) e imponiendo las mismas condiciones que en las simulaciones anteriores. Como resultado se tienen los campos de la figura 5

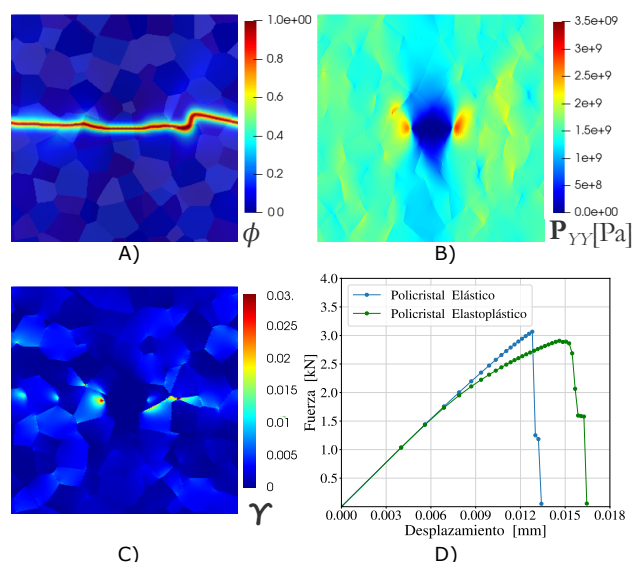


Figura 5: Simulación en material elasto-plástico. A) Campo de daño posterior a la fractura. B) Campo de tensión anterior a la fractura. C) Campo de deformación cortante acumulada posterior a la fractura. D) Gráfica de Fuerza media v/s deformación media en comparación con la curva equivalente en la simulación elástica.

Se observa que la fractura y el campo de tensiones en este material son similares a las del material policristalino elástico. Esto se explica por el uso de la misma microestructura y porque la deformación plástica está muy localizada en áreas cercanas a la grieta. Las diferencias con la simulación elástica se deben que la orientación de los granos, además de variar localmente la energía elástica, favorece una mayor disipación plástica en los granos bien orientados, con una menor tasa de acumulación de energía elástica y un menor desarrollo de la grieta. El desarrollo localizado de la plastificación se encuentra mayoritariamente cerca del paso de la grieta, lo cual se observa en la figura 5C en el campo de deformación cortante acumulada ($\Upsilon = \sum_{\alpha} \int_t |\dot{\gamma}^{\alpha}| dt$). A pesar de ello, la curva de fuerza v/s desplazamiento de la figura 5D se ve afectada hacia el final del cálculo por los efectos plásticos. También se observa que la fractura se desarrolla posteriormente a la de la simulación elástica. Esto se debe a que la energía disponible para fracturar el material es inferior en el material elasto-plástico debido a la disipación plástica, lo que implica que se requiere de más trabajo externo para acumular la energía necesaria para iniciar la fractura. Si se representan las áreas bajo la curvas tensión-deformación de la figura 5D, se obtienen los valores de 0,023[J] para el caso elástico y 0,028[J] en el caso elasto-plástico. Esta discrepancia se explica porque el área bajo la curva en el caso elasto-plástico no considera solo a la energía disponible para generar fractura. También se debe señalar que las simulaciones, al poseer un control de deformación total, no logran captar el efecto de retroceso (*snapback*) de la deformación que es característico de los procesos de fractura. Por lo tanto, la energía disponible para fracturar el material no se ve representada en las áreas bajo la curva.

4. CONCLUSIONES

Se ha implementado un modelo *phase-field fracture* en un entorno de cálculo robusto y eficiente basado en la FFT para el análisis del desarrollo de la fractura en materiales policristalinos elásticos y elasto-plásticos, habiendo acoplado al cálculo un modelo de plasticidad cristalina en el caso elasto-plástico. Las simulaciones realizadas logran capturar el efecto de la microestructura sobre el proceso de fractura. Las desviaciones observadas en el avance de la grieta en los casos policristalinos respecto de un medio monolítico equivalente son producto de la anisotropía de cada grano dentro del material, tanto a nivel elástico como plástico. El proceso de fractura ha logrado ser captado en todas las curvas. Las curvas fuerza y desplazamiento de la fisuración de paneles elásticos policristalinos u homogéneos es muy similar. En el caso elasto-plástico, la dirección de la fisura no es igual a la del material elástico con una microestructura idéntica. Además, la energía disipada calculada como el área bajo la curva fuerza-desplazamiento, fue mayor en el material elasto-plástico. La metodología descrita en este trabajo, todavía en proceso de optimización, ha demostrado ya ser eficiente respecto a otras [2], al obtenerse con éxito la evolución de la fractura en casos con una geometría compleja y una discretización muy fina (65536 voxeles). Próximamente se

mejorará la formulación de *phase-field* para considerar las contribuciones energéticas de la plasticidad y también se implementará un esquema de minimización total de la energía que reemplaze el esquema escalonado para optimizar aún más las simulaciones.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece el apoyo del programa de doctorado BECAS CHILE 2020-72210273 de la Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo de Chile, a la Vicerrectoría de Investigación Desarrollo e Innovación de la Universidad de Santiago de Chile y a la financiación de la Universidad Politécnica de Madrid a través del proyecto REM20431JSE.

REFERENCIAS

- [1] C. Miehe, F. Welschinger, and M. Hofacker. Thermodynamically consistent phase-field models of fracture: Variational principles and multi-field implementations. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 83(10):1273–1311, 2010.
- [2] L. De Lorenzis, A. McBride, and B. Reddy. Phase-field modelling of fracture in single crystal plasticity: Phase-field modelling of fracture in single crystal plasticity. *Gamm Mitt*, 39:7–34, 06 2016.
- [3] S Lucarini, M V Upadhyay, and J Segurado. FFT based approaches in micromechanics: fundamentals, methods and applications. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 30(2):023002, 2021.
- [4] Y. Chen, D. Vasiukov, L. Gélébart, and C. Park. A FFT solver for variational phase-field modeling of brittle fracture. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 349:167–190, 2019.
- [5] C. Tome, G.R. Canova, U.F. Kocks, N. Christodoulou, and J.J. Jonas. The relation between macroscopic and microscopic strain hardening in f.c.c. polycrystals. *Acta Metallurgica*, 32(10):1637–1653, 1984.
- [6] M. Ambati, T. Gerasimov, and L. De Lorenzis. A review on phase-field models of brittle fracture and a new fast hybrid formulation. *Comput Mech*, 55:383–405, 2015.
- [7] M. Magri, S. Lucarini, G. Lemoine, L. Adam, and J. Segurado. An FFT framework for simulating non-local ductile failure in heterogeneous materials. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 380:113759, 2021.
- [8] A. Cruzado, B. Gan, M. Jiménez, D. Barba, K. Ostolaza, A. Linaza, J.M. Molina-Aldareguia, J. Llorca, and J. Segurado. Multiscale modeling of the mechanical behavior of in718 superalloy based on micropillar compression and computational homogenization. *Acta Materialia*, 98:242–253, 2015.