

UN ESTIMADOR DE ERROR EN EL CÁLCULO DE G POR INTEGRAL DE DOMINIO MEDIANTE ANÁLISIS DE SENSIBILIDADES DE FORMA

E. Giner, F.J. Fuenmayor, J.E. Tarancón, A. Besa

Universidad Politécnica de Valencia
Departamento de Ingeniería Mecánica y de Materiales
Camino de Vera s/n, 46022 Valencia

Resumen. Se propone un estimador del error en el cálculo de G cuando se evalúa a través del Método de la Integral de Dominio Equivalente (EDI) a partir de la solución que proporciona el Método de los Elementos Finitos (MEF) en problemas de MFEL. La utilización del MEF introduce un error de discretización inherente a la malla y tipo de elemento utilizado, cuyo efecto en el cálculo de G o J en problemas elástico lineales de mecánica de la fractura es estimado en este trabajo. Para ello se hace uso de un enfoque basado en el análisis de sensibilidades de diseño de forma y de una extensión del estimador de error de discretización de Zienkiewicz-Zhu. Con ayuda de un ejemplo numérico bidimensional con solución conocida se valida la efectividad del estimador de error propuesto utilizando un proceso h -adaptativo y se comprueba que mejora notablemente el valor de G calculado inicialmente.

Abstract. An error estimator for G when evaluated from a finite element solution through the Equivalent Domain Integral method (EDI) in LEFM is proposed. The implementation of the EDI Method through the FEM introduces a discretization error that is inherent in the mesh and type of element employed. In this work, an estimation of the effect of the discretization error on G or J for linear elastic problems in fracture mechanics is quantified, which is based on shape design sensitivity analysis and an extension of the Zienkiewicz-Zhu error estimator. The reliability of the estimator is then analyzed solving a numerical bidimensional problem with known solution using an h -adaptive process. It is verified that the proposed error estimator improves notably the initial value calculated for G .

1. INTRODUCCIÓN

Existen numerosos métodos que permiten obtener parámetros caracterizantes en mecánica de la fractura elástico lineal (MFEL) mediante el Método de los Elementos Finitos (MEF). Dichos métodos se pueden clasificar en base a dos aproximaciones al problema: el *enfoque local*, que toma como parámetro caracterizante el factor de intensidad de tensiones K y da lugar a los denominados métodos directos, y el *enfoque global* o *energético*, en el que la tasa de liberación de energía G es el parámetro caracterizante. Los métodos que utilizan este último enfoque se encuentran entre los más eficientes debido precisamente a su carácter global y se

denominan *métodos indirectos* o *energéticos*. Ambos enfoques son teóricamente equivalentes, como se demuestra en cualquier texto general sobre mecánica de la fractura [1]. Ejemplos de métodos indirectos importantes son los métodos basados en extensión virtual de grieta y derivada de la matriz de rigidez [2,3], integrales de contorno, como la integral J [4], sus integrales de dominio equivalentes, conocidas como el método EDI, Equivalent Domain Integral, [5-8] o métodos basados en el cierre virtual de grieta [9,10].

Cuando estos métodos son aplicados como técnica de postproceso a una solución aproximada del problema elástico obtenida mediante un método numérico como el

MEF, el orden de magnitud del error cometido adquiere una especial relevancia. Este error se debe en gran medida al llamado error de discretización, que es inherente a la naturaleza del método y que fundamentalmente depende del tipo de elemento y grado de refinamiento de la malla empleados. Obviamente, cuando el MEF es aplicado al cálculo de G o J en MFEL, dicho error de discretización introduce un error en la estimación de G . Además, el propio método indirecto empleado puede ser otra fuente de errores.

Por otro lado, el Método de la Integral de Dominio Equivalente (EDI) está considerado como uno de los métodos indirectos más eficaces. Se trata de una reformulación de la conocida integral de contorno J a través de una integral de dominio, mucho más adecuada a su implementación numérica mediante EF que la primera. Además, esta integral permite ser aplicada a todo el dominio de definición del problema en contraste a lo que sucede con métodos de estimación locales (p.ej. extrapolación de desplazamientos) y por ello se presta a la estimación del error de discretización en G a través del estimador del error que aquí se propone.

Para obtener un estimador de error en G eficiente se necesita un planteamiento del problema más general que la simple aplicación directa del método EDI. Como se explica en los apartados siguientes, este planteamiento está basado en el análisis de sensibilidades de diseño de forma (SDSA) [11] aplicado a mecánica de la fractura junto con una extensión del estimador de error de discretización de Zienkiewicz-Zhu [12]. De este modo se puede evaluar la influencia del error de discretización global en el cálculo de G cuando se utiliza el método EDI. Por último, y con el fin de validar la efectividad del estimador de error presentado, se aplicará a un ejemplo numérico bidimensional con solución conocida que permita una comparación del error estimado con el error verdadero. Se muestra así la utilidad del estimador, puesto que el valor inicial de G calculado a través del método EDI para una discretización dada puede ser mejorado notablemente tras calcular el estimador de error correspondiente.

2. EL MÉTODO EDI INTERPRETADO COMO UN ANÁLISIS DE SENSIBILIDADES DE DISEÑO DE FORMA

Como ya se ha mencionado, el método de la integral de dominio equivalente, EDI, es una de las técnicas más eficientes para calcular J en un problema elástico (no necesariamente lineal). En esencia, se trata de una integral de dominio [5-8] que resulta de aplicar bajo ciertas hipótesis el teorema de la divergencia a la integral de contorno J propuesta por Rice [4]. Así, para un problema elástico bidimensional, en ausencia de fuerzas másicas y fuerzas superficiales aplicadas sobre las caras de grieta y suponiendo que la grieta avanza sin

cambiar de orientación en dirección x_1 , J se puede calcular como:

$$J = \int_{\Omega^*} \left(\sigma_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_1} - W \delta_{1i} \right) \frac{\partial q_1}{\partial x_i} d\Omega \quad (1)$$

con $i, j = 1, 2$ y donde Ω^* es una porción del dominio del problema que rodea completamente el extremo de grieta (ver figura 1), σ_{ij} y u_i son los campos de tensiones y desplazamientos, W es la energía de deformación por unidad de volumen, δ_{ij} es la delta de Kronecker y q_1 es una función suficientemente continua que debe tomar valores entre 0 y 1, bajo las siguientes condiciones

$$q_1(x_1, x_2) = \begin{cases} 0 & \text{si } (x_1, x_2) \in \Gamma_1 \\ 1 & \text{si } (x_1, x_2) \in \Gamma_3 \end{cases} \quad (2)$$

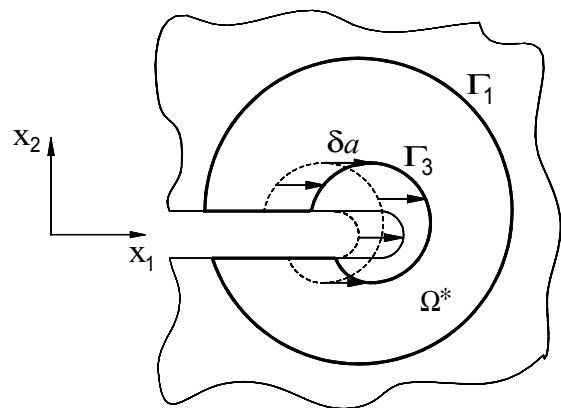


Fig. 1. Extensión virtual δa de los puntos encerrados por Γ_3 , y que a su vez induce una extensión virtual δx_1 en los puntos del dominio Ω^* .

Tanto el contorno exterior Γ_1 como el contorno Γ_3 son elegidos arbitrariamente siempre que comiencen en una de las caras de grieta y terminen en la otra. Γ_1 puede ser el propio contorno exterior del cuerpo analizado (excluyendo las caras de grieta) y Γ_3 a menudo queda reducido a un único punto (el extremo de grieta). Físicamente, la función q_1 puede ser interpretada como una función de ponderación que escala la extensión virtual δx_1 de cualquier punto perteneciente al dominio Ω^* entre los valores 0 y δa a través de la expresión $\delta x_1 = q_1 \delta a$.

deLorenzi [5] estableció una relación entre este método y el concepto de derivada material propio de la mecánica del medio continuo. Recientemente se ha demostrado [13, 14] que la ec. (1) puede ser deducida a partir del enfoque más general del análisis de sensibilidades de diseño de forma cuando es aplicado a MFEL. La idea fundamental que permite relacionar ambos planteamientos proviene de la interpretación de la longitud de grieta a como una *variable de diseño*, cuyo cambio en longitud implica una modificación del

contorno del cuerpo analizado (es decir, un cambio de forma). Existen varias técnicas que permiten efectuar un análisis de sensibilidades de forma [11]. Saliba *et al.* [13] y Taroco [14] utilizan un método continuo con el fin de demostrar que la sensibilidad de la energía total de deformación U de un cuerpo que contenga una grieta en MFEL viene dada por:

$$\dot{U} = \frac{dU}{da} = \int_{\Omega_0} \boldsymbol{\sigma} : \nabla \dot{\mathbf{u}} d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} [\mathbb{W} \mathbf{I} - (\nabla \mathbf{u})^T \boldsymbol{\sigma}] : \nabla \mathbf{v} d\Omega_0 \quad (3)$$

donde Ω_0 es el dominio del cuerpo analizado, $\boldsymbol{\sigma}$ es el tensor de tensiones, $\nabla \dot{\mathbf{u}}$ es el gradiente de la sensibilidad del campo de desplazamientos, \mathbf{I} es la matriz identidad y \mathbf{v} es el denominado *campo de velocidades*, concepto que se corresponde exactamente con la función q_1 descrita anteriormente.

Si se supone que las cargas superficiales \mathbf{T} aplicadas al contorno del cuerpo en cuestión se mantienen constantes, que las caras de grieta están libres de cargas aplicadas y que el campo de velocidades \mathbf{v} satisface las condiciones anteriores, entonces se cumple que la sensibilidad del trabajo exterior realizado por las cargas aplicadas \mathbf{T} (que será denotada aquí por \dot{V}) equivale a la primera integral de (3) para todo campo $\dot{\mathbf{u}}$ cinemáticamente admisible, es decir:

$$\int_{\Omega_0} \boldsymbol{\sigma} : \nabla \dot{\mathbf{u}} d\Omega_0 = \dot{V} \quad (4)$$

Esto permite establecer una equivalencia, salvo el signo, entre (1) y la segunda integral en (3). El cambio en signo se debe a que en MFEL se cumple que $-G = \dot{\Pi} = \dot{U} - \dot{V}$, donde $\dot{\Pi}$ es la sensibilidad de la energía potencial total. Más aún, la primera integral en (3) equivale exactamente a $2G$ y por tanto (3) es otro modo de calcular G , precisamente el que servirá de base al estimador de error en G propuesto en este trabajo.

3. ESTIMACIÓN DEL ERROR EN G

El estimador de error que se propone a continuación se basa en la idea subyacente en el estimador de error en norma energética de Zienkiewicz-Zhu [12]. Es decir, los campos exactos (en general desconocidos) asociados con aquellas magnitudes de la solución de EF que presentan discontinuidades entre elementos son sustituidos por *campos mejorados*, calculados a partir de la misma solución de EF. En este trabajo, la ec. (3) constituye la base del estimador de error en G . El estimador puede ser definido entonces para una discretización de EF con un total de ne elementos isoparamétricos como:

$$e_{es(G)} = \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} (\boldsymbol{\sigma}_* - \boldsymbol{\sigma}_{ef}) : [(\nabla \dot{\mathbf{u}})_* - (\nabla \dot{\mathbf{u}})_{ef}] |\mathbf{J}| d\Omega_e + \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} \left\{ \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma}_* - \boldsymbol{\sigma}_{ef}) (\boldsymbol{\varepsilon}_* - \boldsymbol{\varepsilon}_{ef}) \mathbf{I} - [(\nabla \mathbf{u})_* - (\nabla \mathbf{u})_{ef}]^T (\boldsymbol{\sigma}_* - \boldsymbol{\sigma}_{ef}) \right\} : \nabla \mathbf{v} |\mathbf{J}| d\Omega_e \quad (5)$$

donde Ω_e es el dominio local del elemento de referencia, \mathbf{J} es la matriz jacobiana de la transformación y $\boldsymbol{\varepsilon}$ es el tensor de deformaciones infinitesimales. Los campos mejorados de (5) se denotan por $(\)_*$ mientras que $(\)_{ef}$ hace referencia a los campos tal y como se obtienen de la solución de elementos finitos. Para el caso de elementos lineales, los campos mejorados se pueden obtener mediante promediado en nodos. Para elementos cuadráticos, la técnica de alisado que se ha utilizado es el SPR [15]. Hay que señalar que para obtener $\dot{\mathbf{u}}$ se debe resolver previamente el problema de sensibilidades en EF dado por

$$\mathbf{K} \dot{\mathbf{u}} = -\dot{\mathbf{K}} \mathbf{u} \quad (6)$$

donde \mathbf{K} es la matriz de rigidez global de la discretización de EF y $\dot{\mathbf{K}}$ su sensibilidad. En (6) \mathbf{u} y $\dot{\mathbf{u}}$ representan el vector de desplazamientos nodales solución del problema de EF y su sensibilidad. Obviamente la ec. (6) es sólo válida en el caso de que las fuerzas aplicadas se supongan constantes con la variación de longitud de grieta.

Utilizando el estimador de error definido por (5) se puede obtener una solución mejorada en G dada por

$$G_{es} = G_{ef} + e_{es(G)} \quad (7)$$

donde G_{ef} puede ser obtenido tanto por (1) como por (3). El correspondiente error relativo estimado se define como

$$\eta_{es(G)} = \frac{e_{es(G)}}{G_{ef} + e_{es(G)}} \quad (8)$$

Con el fin de validar el estimador de error cuando se conoce la solución exacta al problema, es habitual definir el llamado índice de efectividad como

$$\theta_{(G)} = \frac{\eta_{es(G)}}{\eta_{ex(G)}} \quad (9)$$

que idealmente debe ser cercano a la unidad y donde el error relativo exacto $\eta_{ex(G)}$ se calcula así:

$$\eta_{\text{ex}(G)} = \frac{G_{\text{ex}} - G_{\text{ef}}}{G_{\text{ex}}} \quad (10)$$

4. VERIFICACIÓN NUMÉRICA

El ejemplo que sigue permite evaluar la fiabilidad del estimador propuesto y su convergencia a través de una secuencia de mallas refinadas sucesivamente a través de un proceso h -adaptativo. Consiste en una serie infinita de grietas colineales equiespaciadas de la misma longitud $2a$ sometidas a un estado de carga de Modo I en deformación plana (ver figura 2). La solución exacta a este problema viene dada por [1]:

$$G_{\text{ex}} = \frac{K_{\text{lex}}^2}{E} (1 - \nu^2), \quad K_{\text{lex}} = \sigma \sqrt{\pi a} \left[\frac{2b}{\pi a} \tan\left(\frac{\pi a}{2b}\right) \right]^{1/2} \quad (11)$$

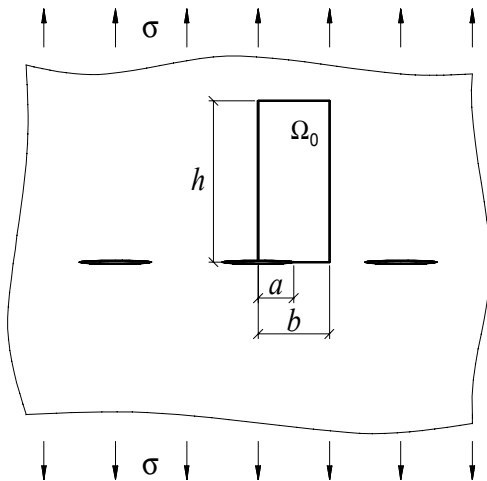


Fig. 2. Ejemplo numérico: Serie infinita de grietas colineales en Modo I. Se indica la porción de dominio Ω_0 modelizada mediante EF.

habiéndose utilizado $a = 1$, $b = 2$ (semidistancia entre puntos análogos de dos grietas consecutivas), $E = 10^7$, $\nu = 0.333$ y $\sigma = 100$. La altura del modelo de EF se tomó lo suficientemente grande ($h = 6$) como para suponer que la solución exacta dada por (11) es válida a efectos de comparación. La figura 3 muestra el modelo discretizado mediante elementos triangulares cuadráticos en estado deformado para algunas de las mallas adaptadas.

Los resultados obtenidos para el error relativo estimado $\eta_{\text{es}(G)}$ se muestran en la figura 4 comparados con el correspondiente error relativo exacto $\eta_{\text{ex}(G)}$, utilizando tanto elementos triangulares lineales como cuadráticos. Notar que el número de grados de libertad de la primera malla es mayor que el de la segunda debido al proceso h -adaptativo.

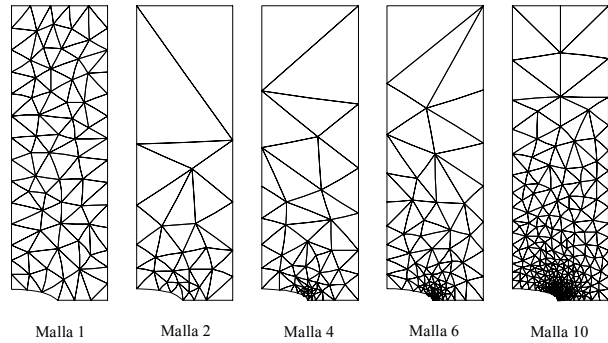


Fig. 3. Modelo de EF para el problema de serie infinita de grietas colineales en Modo I: Secuencia de mallas deformadas (elementos triangulares cuadráticos).

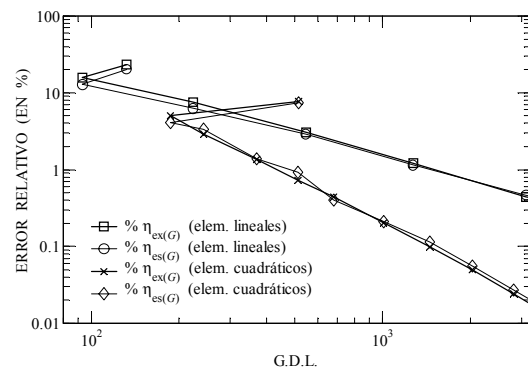


Fig. 4. Serie infinita de grietas colineales en Modo I: Errores relativos exactos y estimados en G (%) para la secuencia de mallas h -adaptadas (elementos lineales y cuadráticos).

La fiabilidad que presenta el estimador de error es elevada, como se enfatiza en la representación de los índices de efectividad de la figura 5. En esta figura se incluye además el índice de efectividad dado por otro estimador en G [16, 17], comprobándose la notable mejora introducida por el estimador aquí propuesto.

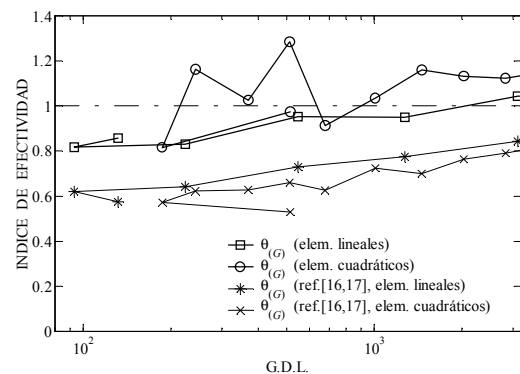


Fig. 5. Serie infinita de grietas colineales en Modo I: Índice de efectividad para la secuencia de mallas h -adaptadas (elementos lineales y cuadráticos). Se incluyen también los índices de efectividad calculados según [16, 17].

Como se observa en la figura 5, el índice de efectividad del estimador varía entre 0.8 y 1.2, siendo para algunas

de las mallas muy próximo a la unidad. Estas cotas para el índice de efectividad coinciden con las idóneas sugeridas por Szabó y Babuska [18] para todo estimador *a posteriori*.

La utilidad del estimador resulta patente en la figura 6, en la que se muestra el valor de G_{ex} dado por (11), el valor de G_{ef} calculado para cada malla según (1) (o equivalentemente según (3)), y el nuevo valor estimado de G dado por (7), es decir $G_{es} = G_{ef} + e_{es}(G)$.

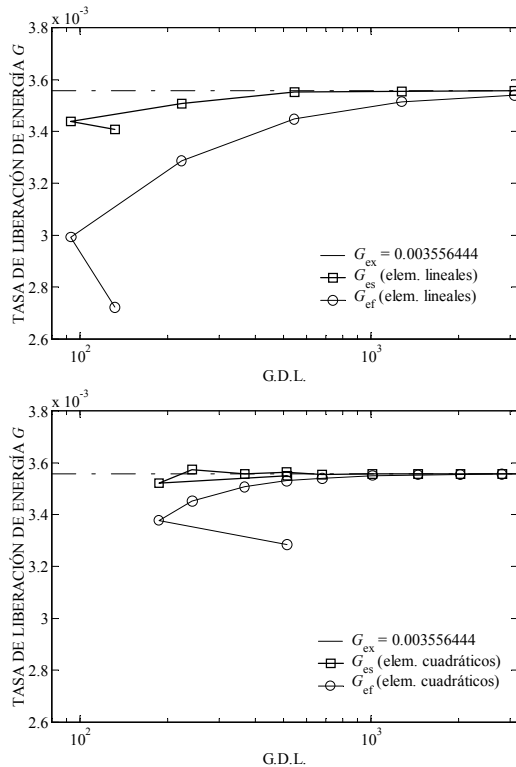


Fig. 6. Serie infinita de grietas colineales en Modo I: Valores de G_{ef} para cada malla obtenidos según el método EDI y nuevos valores estimados G_{es} según (7). Arriba: elementos lineales. Bajo: elementos cuadráticos.

Es posible cuantificar la mejora introducida en G calculando el error exacto de G_{es} a través de la expresión:

$$\eta_{ex}(G_{es}) = \frac{G_{ex} - G_{es}}{G_{ex}} \quad (12)$$

y de esta forma comparar con el error inicial de la solución de elementos finitos G_{ef} calculado a través de (10). Las tablas 1 y 2 comparan los errores relativos exactos cometidos en G_{ef} y en G_{es} para cada malla del proceso adaptativo (utilizando elementos lineales y cuadráticos, respectivamente).

Tabla 1. Comparación entre los errores relativos exactos de G_{ef} y de G_{es} (en %) para el proceso h -adaptativo con elementos lineales.

Malla	G.D.L.	$\eta_{ex}(G)$ (%)	$\eta_{ex}(G_{es})$ (%)
1	132	23.46	4.21
2	93	15.85	3.34
3	224	7.53	1.37
4	546	3.05	0.15
5	1271	1.21	0.06
6	3104	0.44	-0.02

Tabla 2. Comparación entre los errores relativos exactos de G_{ef} y de G_{es} (en %) para el proceso h -adaptativo con elementos cuadráticos.

Malla	G.D.L.	$\eta_{ex}(G)$ (%)	$\eta_{ex}(G_{es})$ (%)
1	515	7.65	0.21
2	187	5.01	0.97
3	243	2.90	-0.49
4	369	1.36	-0.03
5	511	0.72	-0.21
6	679	0.44	0.04
7	1009	0.20	-0.01
8	1455	0.10	-0.02
9	2031	0.05	-0.01
10	2825	0.02	-0.003

Los valores negativos indican una sobreestimación de G_{es} con respecto a G_{ex} . Notar que los valores tabulados están expresados en %, con lo que la reducción del error cometido al tomar como solución G_{es} en lugar de G_{ef} es muy notable, especialmente si se tiene en cuenta el bajo número de grados de libertad de las primeras mallas. Incluso con elementos lineales, el valor de G_{es} para la primera malla es aceptable ingenierilmente. En el caso de elementos cuadráticos el error exacto en G_{es} es $< 1\%$ en todas las mallas. Conviene señalar que no se han empleado elementos singulares.

Otros ejemplos numéricos dieron lugar a resultados similares, por lo que se puede concluir que el estimador presentado es válido en problemas de MFEL.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo se ha propuesto un estimador de error en G para problemas de MFEL analizados mediante EF. El estimador está basado en un análisis de sensibilidades de diseño de forma e implica resolver el correspondiente problema de sensibilidades además del cálculo de los campos mejorados a partir de la solución de EF. A través de un ejemplo numérico se ha constatado su alta fiabilidad. Además se ha mostrado

que este estimador mejora notablemente otros estimadores disponibles en la literatura.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido financiado por CICyT como parte del proyecto de investigación PB97-0696-C02-02.

REFERENCIAS

- [1] Kanninen, M.F. y Popelar, C.H., "Advanced Fracture Mechanics", Oxford Engineering Science Series. Oxford University Press, Nueva York (1985).
- [2] Parks, D.M., "A stiffness derivative finite element technique for determination of crack tip stress intensity factors", *Int J Fracture* **10**, 487-502 (1974).
- [3] Hellen, T.K., "On the method of virtual crack extensions", *Int J Numer Methods Eng* **9**, 187-207 (1975).
- [4] Rice, J.R., "A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks", *J Appl Mech* **35**, 379-386 (1968).
- [5] deLorenzi, H.G., "On the energy release rate and the J -integral for 3-D crack configurations", *Int J Fracture* **19**, 183-193 (1982).
- [6] deLorenzi, H.G., "Energy release rate calculations by the finite element method", *Eng Fract Mech* **21**(1), 129-143 (1985).
- [7] Li, F.Z., Shih, C.F. y Needleman, A., "A comparison of methods for calculating energy release rates", *Eng Fract Mech* **21**(2), 405-421 (1985).
- [8] Shih, C.F., Moran, B. y Nakamura, T., "Energy release rate along a three-dimensional crack front in a thermally stressed body", *Int J Fracture* **30**, 79-102 (1986).
- [9] Rybicki, E.F y Kanninen, M.F. "A finite element calculation of stress intensity factors by a modified crack closure integral", *Eng Fract Mech* **9**, 931-938 (1977).
- [10] Shivakumar, K.N., Tan, P.W. y Newman, J.C. Jr., "A virtual crack closure technique for calculating stress intensity factors for cracked three dimensional bodies", *Int J Fracture* **36**, R43-R50 (1988).
- [11] Haug, E.J., Choi, K.K. y Komkov, V., "Design Sensitivity Analysis of Structural Systems", volumen 177 de *Mathematics in Science and Engineering*, Academic Press Inc., Orlando, Florida (1986).
- [12] Zienkiewicz, O.C. y Zhu, J.Z., "A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis", *Int J Numer Methods Eng* **24**, 337-357 (1987).
- [13] Saliba, R., Vénere, M.J., Padra, C., Taroco, E., y Feijóo, R.A., "Shape sensitivity analysis and energy release rate of planar cracks embedded in three-dimensional bodies", en *Computational Mechanics: New Trends and Applications* (Ed. Idelsohn, S., Oñate, E., Dvorkin, E.), *Proceedings Congreso Buenos Aires, CIMNE, Barcelona* (1998).
- [14] Taroco, E., "First and second order shape sensitivity analysis in fracture", en *Computational Mechanics: New Trends and Applications* (Ed. Idelsohn, S., Oñate, E., Dvorkin, E.), *Proceedings Congreso Buenos Aires, CIMNE, Barcelona* (1998).
- [15] Zienkiewicz, O.C. y Zhu, J.Z., "The superconvergent patch recovery and a *posteriori* error estimates. Part I: The recovery technique", *Int J Numer Methods Eng* **33**, 1331-1364 (1992).
- [16] Fuenmayor, F.J., Oliver, J.L. y Ródenas, J.J., "Extension of the Zienkiewicz-Zhu error estimator to shape sensitivity analysis", *Int J Numer Methods Eng* **40**, 1413-1433 (1997).
- [17] Fuenmayor, F.J., Domínguez, J., Giner, E. y Oliver, J.L., "Calculation of the stress intensity factor and estimation of its error by a shape sensitivity analysis", *Fatigue Fract Eng Mater Struct* **20**(5), 813-828 (1997).
- [18] Szabó, B.A. y Babuska, I., "Finite Element Analysis" John Wiley & Sons, Inc., Nueva York (1991).