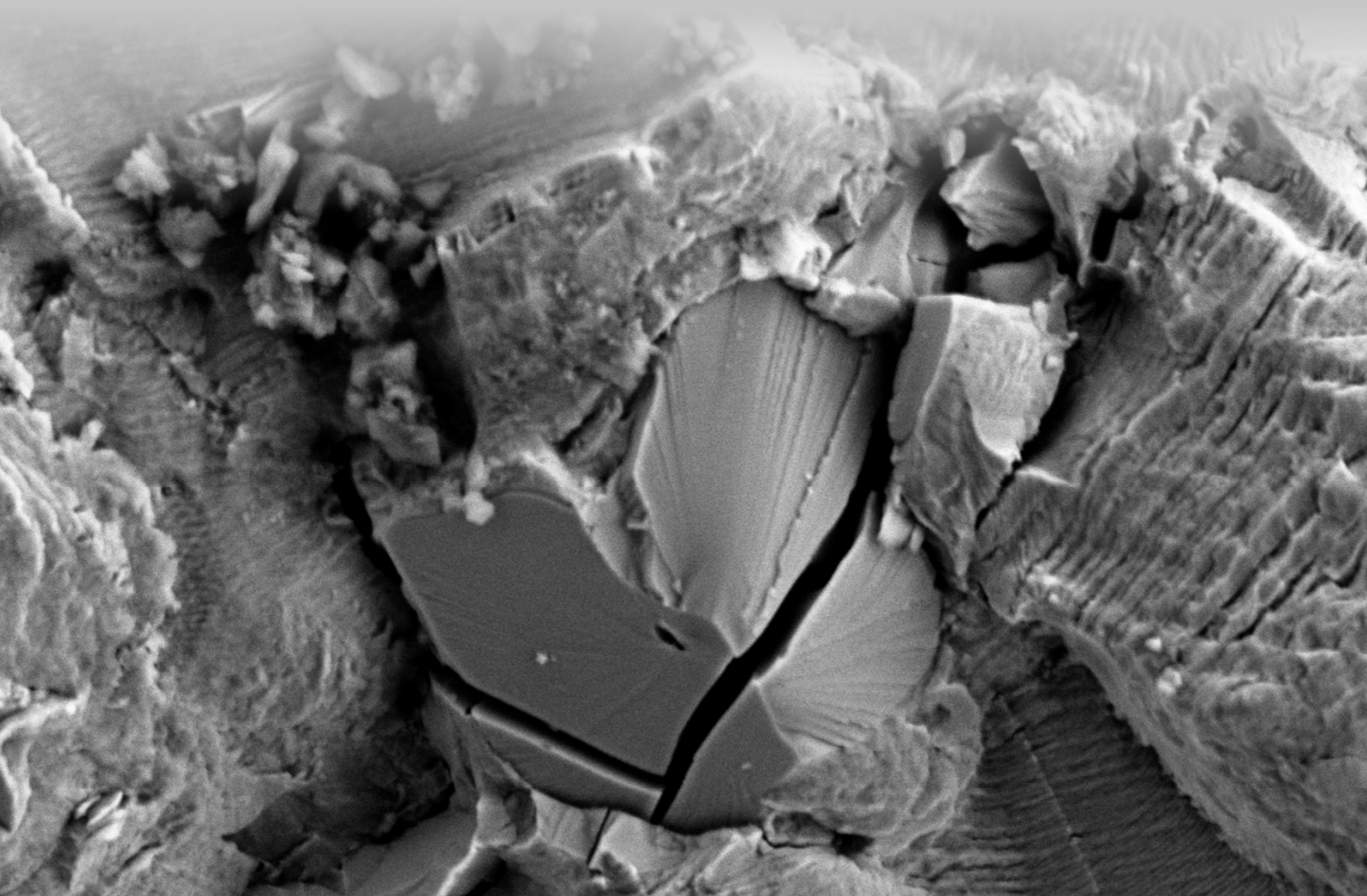




Revista Española de **MECÁNICA DE LA FRACTURA**



**Volumen 9
Junio 2025**

ISSN: 2792-4246

Editado por la Sociedad Española de Integridad Estructural
Grupo Español de Fractura

Fotografía titulada "CORAZÓN PARTÍO", autora María Moreno Rubio de la Universidad de Sevilla. 1er premio del concurso de Fotografía Científica organizado en la edición del año 2025 correspondiente 41 Congreso del Grupo Español de Fractura celebrado en Vitoria-Gasteiz del 26 al 28 de marzo de 2025.

Esta edición de la REVISTA ESPAÑOLA DE MECÁNICA DE LA FRACTURA contiene parte de las comunicaciones presentadas en el 41 Congreso del Grupo Español de Fractura GEF2025. Todos los textos de dichas ponencias se encuentran publicados en los volúmenes 9 y 10 de la revista.

Esta edición está editada por los miembros de la Junta Directiva de la Sociedad Española de Integridad Estructural – Grupo Español de Fractura SEIE-GEF, siendo sus miembros los siguientes:

Francisco GÁLVEZ DÍAZ-RUBIO (Presidente)

Alicia SALAZAR LOPEZ (Secretario)

Jon Ander ESNAOLA (Tesorero)

Sergio CICERO GONZÁLEZ

Miriam LORENZO-PEÑUELAS

Carlos NAVARRO PINTADO

Gonzalo RUÍZ LÓPEZ

Orlando SANTANA PÉREZ



Esta obra está bajo una licencia internacional [Creative Commons Atribución-NoComercial-CompartirIgual 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/).

Las publicaciones de esta revista son Creative Commons Atribución-NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional (CC BY-NC-SA 4.0)

El lector puede compartir, copiar y redistribuir el material en cualquier medio o formato, siempre y cuando cumpla con las siguientes condiciones:

1. **Atribución (BY):** Debe dar crédito adecuado al autor original proporcionando un enlace a la licencia y señalando se han realizado cambios.
2. **No Comercial (NC):** No puede utilizar el material con fines comerciales. Esto significa que no puede venderlo ni obtener ganancias directas de su uso.
3. **Compartir Igual (SA):** Si adapta, transforma o construye sobre el material, debe distribuir sus contribuciones bajo la misma licencia que el original.

Recuerda que esta licencia no afecta a los derechos legales del autor, como el derecho moral o las excepciones de uso justo.

PRESENTACIÓN

El contenido de los volúmenes 9 y 10 de la Revista Española de Mecánica de la Fractura corresponde a la recopilación de los trabajos del congreso anual de la Sociedad Española de Integridad Estructural del Grupo Español de Fractura (SEIE-GEF), en su edición número 41 celebrada en Vitoria-Gasteiz, del 26 al 28 de marzo de 2025.

Los congresos del Grupo Español de Fractura son reuniones científicas que se vienen celebrando anualmente desde el año 1984 de forma ininterrumpida, excepto en 2020 debido a la pandemia COVID. Estos encuentros se han convertido en una cita ineludible para todos los científicos y técnicos dedicados al estudio de la fatiga y fractura de materiales y elementos estructurales y representan una oportunidad excepcional para el intercambio de impresiones, presentación de avances y divulgación de los trabajos realizados por los investigadores de este apasionante campo de la ingeniería. Los congresos del GEF sirven, además, como un foro de intercambio de ideas y de resultados de investigación, en el que se fomenta especialmente la participación de los jóvenes investigadores.

Los primeros años las actas de los congresos se publicaron bajo el nombre de Anales de Mecánica de la Fractura, editándose desde 1984 hasta 2019 inclusive. En 2020 no hubo congreso y a partir de entonces, desde 2021 las publicaciones cambian de nombre a Revista Española de Mecánica de la Fractura, con dos volúmenes por año. Todos los volúmenes mencionados, desde 1984 hasta la actualidad, pueden consultarse en la página web de la sociedad www.gef.es.

La organización del presente congreso, en su 41 edición, se celebró en Vitoria-Gasteiz, del 26 al 28 de marzo de 2025 bajo la organización de Jon Ander Esnaola de la universidad de Mondragón, en coordinación con Iñigo Llavori y Borja Erice. Además, han contado con la ayuda inestimable de sus compañeros Idoia Urrutibeascoa, Miren Larrañaga, Irene Torca, Xuban Telleria, David Abedul, Asier Iglesias, Gurutz Cortabitarte, Eguzkiñe Martínez, Iratxe Agirre, Markel Zugazartaza y Haizea Legorburu. Quiero destacar su gran labor y empuje, y el éxito en la organización. De igual manera es necesario mencionar el entusiasmo de todos los asistentes y ponentes.

Quiero destacar también el enorme trabajo y empuje de la junta directiva de la sociedad. La dedicación durante muchos días, horas interminables, reuniones presenciales y virtuales. Por ello no quiero dejar de citar a Alicia Salazar, Sergio Cicero, Miriam Lorenzo, Gonzalo Ruiz López, Carlos Navarro Pintado, Orlando Santana, y Luis Távara, agradeciéndoles su trabajo y dedicación a esta sociedad, sin cuyo esfuerzo estas reuniones y publicaciones no serían posibles. He de hacer especial mención especial a Luis Távara, que durante varios años ha sido miembro de la junta directiva y Tesorero y que ahora deja su puesto. Durante este tiempo ha estado apoyando a la sociedad y trabajando por su éxito, por lo que estaremos siempre agradecidos por su trabajo. Su puesto en la junta lo ocupará a partir de ahora Jon Ander Esnaola, que ha demostrado un fuerte compromiso con esta sociedad.

Finalmente, destacar un especial reconocimiento al Prof. Jesús Rodríguez Pérez, de la Universidad Rey Juan Carlos de Madrid que, por su dedicación durante muchos años tanto a la Mecánica de la Fractura, como con sus contribuciones a la sociedad SEIE-GEF, ha recibido la Medalla del Grupo Español de Fractura, distinción que se otorga anualmente.

Y, para terminar, me gustaría seguir animándoos a continuar trabajando como hasta ahora, a seguir empujando a esta sociedad, y a mantener la tradición de celebrar un congreso anual que además de un importante foro de discusión científicas, constituye sobre todo una gran reunión de amigos.

Francisco Gálvez Díaz-Rubio

Presidente de la Sociedad Española de Integridad Estructural SEIE-GEF



Fotografía de grupo de los asistentes al 41 congreso GEF, celebrado en Vitoria-Gasteiz, del 26 al 28 de marzo de 2025

ÍNDICE (Volumen 9)

MÉTODOS Y MODELOS NUMÉRICOS Y ANALÍTICOS	1
Un modelo unitario para la definición analítica de la curva de velocidad de crecimiento de grieta basada en el modelo REX.	
<i>A. F. Cantelli, D. Díaz-Salamanca, E. Castillo, S. Blasón, M. Muñoz-Calvente</i>	3
Implementación en un código comercial del criterio acoplado de la mecánica de la fractura finita.	
<i>I. G. Garcia y V. Mantič</i>	9
Generation of Mode I stress intensity factor solutions for narrow elliptical-shaped cracks in round bars: A finite element approach.	
<i>U. Eibar, A. Dorronsoro, D. González, J. Alkorta, J.M. Martínez-Esnaola</i>	15
Meanfield-transition-state model for hydrogen diffusion in magnesium.	
<i>M. Molinos, M. Ortiz, M.P. Ariza</i>	21
Meanfield interatomic potential to study the segregation of copper in aluminium using a multiphase angular-dependent potential.	
<i>J. M. Recio-Lopez, M. Molinos, M. P. Ariza</i>	27
Modelización de la elastodifusividad del hidrógeno en ferrita.	
<i>G. Álvarez, J. Segurado, A. Ridruejo</i>	33
Predicción de múltiples despegues en las interfases fibra-matriz bajo carga transversal usando el principio de minimización de la energía total sujeto a una condición en tensiones.	
<i>J. M. Pimentel, M. Muñoz-Reja, V. Mantič, L. Távara</i>	39
Homogenización en láminas unidireccionales mediante modelos de inteligencia artificial basados en datos.	
<i>B. Barriga Machado, D. Infante García, A.R. Quiñonero Moya, J.E. Tarancón, E. Giner</i>	45
Selección de criterios de rotura en entallas en U mediante estadística Bayesiana	
<i>F. J. Gómez, D. Araya.</i>	51
Análisis del crecimiento de grietas en modo I+II en uniones adhesivas usando un nuevo elemento finito singular.	
<i>M.A Herrera-Garrido, L. Távara, M. Muñoz-Reja, V. Mantič</i>	57

Phase field fracture modelling of austenitic stainless steels in high-pressure gaseous hydrogen. <i>A. Díaz, R. Rodríguez-Aparicio, V. Arniella, J.M. Alegre, I.I. Cuesta</i>	63
Implementación mediante elementos finitos de la técnica phase-field para fractura en solid shells con comportamiento material inelástico. <i>A. J. Valverde, P. K. A. V. Kumar, A. Quintanas-Corominas, J. Reinoso</i>	69
Mejora de la metodología phase-field para la fractura dúctil mediante el uso de la técnica ees en problemas de bloqueo. <i>P. Olivares-Rodríguez, J. Reinoso, A. Quintanas-Corominas, I. G. García</i>	75
Predicciones computacionales de la fragilización por hidrógeno en tuberías soldadas destinadas al transporte de hidrógeno presurizado. <i>L. Castro, C. Betegón, E. Martínez-Pañeda</i>	81
Aplicación del campo de fases para predecir el efecto de la rugosidad superficial en la fatiga de alto ciclo. <i>S. Jimenez Alfaro, E. Martinez Pañeda</i>	87
Modelización numérica y validación experimental del spray quenching: Evolución de tensiones residuales y microestructural en sección de tubo. <i>G. Cortabitarte, A. Iglesias, X. Telleria, M. Martinez-Agirre, I. Llavori, M. Larrañaga, J. A. Esnaola</i>	93
Predicción numérica de dureza y tensiones residuales en engranes de acero templados por inducción. <i>A. Goñi, U. Segurajauregi, J. A. Esnaola, M. Areitioaurtena, M. J. Cabello</i>	99
Algoritmo de elementos finitos para problemas antiplanos con superficies de Gurtin-Murdoch. <i>M.A Herrera-Garrido, V. Mantič, S.G. Mogilevskaya</i>	105
Sobre el control de cálculos numéricos en casos de propagación simultánea de varias grietas en materiales casi-frágiles. <i>J. Planas, B. Sanz, J.M. Sancho</i>	113

FATIGA E INTERACCIÓN CON EL MEDIO AMBIENTE 119

- Ensayos de fatiga en soldaduras circunferenciales de una tubería HFI X60 empleada para gasoductos de transporte.**
I. Montero, M. Carboneras, J.C. Suárez 121
- Modelización de engranajes por elementos finitos para la evaluación de vida a fatiga considerando la influencia del temple por inducción.**
M. García, X. Olamendi, I. Mugarza, M. Escalero, A. Goñi, U. Segurajauregi 127
- Velocidad de crecimiento de grietas por fatiga en presencia de hidrógeno: influencia de variables de ensayo y de análisis.**
M. M. Llera, G. Alvarez, V. Arniella, S. Otero, F.J. Belzunce, C. Rodríguez 133
- Caracterización de curvas S-N en laminados de CFRP con distintas calidades de taladrado utilizando termografía infrarroja.**
J. V. Calvo, N. Feito, M.H. Miguelez, E. Giner 139
- Comportamiento a fatiga de unions atornilladas pretensadas galvanizadas en caliente: influencia de la geometría y las condiciones de pretensado.**
D. Díaz-Salamanca, Antonín Kanaval, M. Muñoz-Calvente, F. Pelayo, Jan Kanaval 145
- Una aproximación probabilística al comportamiento a fatiga de la Poliamida 12 procesada mediante sinterización selectiva por láser.**
D. Díaz-Salamanca, A. Salazar López, A. Cano Aragón, S. Blasón, J. Rodríguez Pérez, M. Muñoz-Calvente, A. Fernández-Canteli 151
- Papel del campo tensional remoto en la fisuración asistida por hidrógeno: Relación con el discurso cinematográfico y musical.**
J. Toribio 157
- Evaluación de la fatiga en uniones eje-cubo con Al7075-T651 y Scalmalloy. M.**
Moreno, D. Erena, J. Vázquez, C. Navarro 163
- Fatigue safety analysis of Aluminum cranksets produced by additive manufacturing.**
L. P. Borrego, J.S. Jesus, M. J. P. António, R. Fernandes, R. Branco, J.A.M. Ferreira, J.D.M. Costa 169

APLICACIONES Y CASOS PRÁCTICOS 175

- Análisis de componentes principales para la evaluación del envejecimiento de propulsantes sólidos de material compuesto.**
M. Martínez, R. López, Jesús Rodríguez, A. Salazar 177

Estudio de estructuras metálicas del patrimonio histórico mediante microscopía óptica.	
<i>L. Rodríguez, S. Ruiz, B. Mohamed, A. Morales</i>	183
Estudio de modos de fallo en electrodos debido a la exposición a descarga corona en corriente continua.	
<i>J. Jimenez-Aguirre, A. Ridruejo I, C. Muñoz-Rodríguez</i>	189
ENSAYOS EN MINIATURA	195
Análisis del comportamiento de aceros estructurales mediante el ensayo SPT en ambiente de hidrógeno.	
<i>S. Otero, S. Sampayo, G. Álvarez, M.M. Llera, C. Rodríguez</i>	197
Análisis de la fragilización por hidrógeno de aceros estructurales mediante SPT: carga electroquímica versus hidrógeno a presión.	
<i>S. Sampayo, S. Otero, M. M. Llera, G. Álvarez, C. Rodríguez</i>	203
Modelo para la estimación de la tensión umbral en ambiente agresivo mediante ensayos small punch en base a la técnica de carga por escalones.	
<i>A. Fernández, B. Arroyo, L. Andrea, J.A. Álvarez, F. Gutiérrez-Solana, S. Cicero.</i>	209
Análisis de fallos de ejes principales de aerogeneradores.	
<i>M. Sánchez, J. Gascón</i>	215

MÉTODOS Y MODELOS NUMÉRICOS Y ANALÍTICOS

AVANCES METODOLOGICOS EN EL CRECIMIENTO DE GRIETA POR FATIGA BASADOS EN UNA METODOLOGÍA UNITARIA

A. Fernández Canteli ¹, D. Díaz-Salamanca ^{1*}, E. Castillo Ron ², S. Blasón González ³, M. Muñiz-Calvente ¹

¹ Dpto. de Construcción e Ing.de Fabricación, Universidad de Oviedo, Campus de Viesques, 33203 Gijón, España

² Real Academia de Ingeniería de España,

³ Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM), Unter den Eichen 87, 12205 Berlin, Germany

* Persona de contacto: diazsdiego@uniovi.es

RESUMEN

Se propone una metodología unitaria para el análisis del fenómeno de crecimiento de grietas por fatiga como enfoque fenomenológico. En primer lugar, se deriva la expresión analítica de la curva $a - N$ a partir de los datos monitorizados mediante el modelo REX (retroextrapolación), empleando una función de distribución (fdd) de Weibull de cuatro parámetros. El supuesto de que el fenómeno de la grieta es un proceso de daño markoviano justifica la definición de la curva $a - N$ completa, a partir de la extrapolación hacia adelante y hacia atrás de los datos experimentales recopilados. A continuación, se obtienen las expresiones analíticas de da/dN y K_M en función de la longitud de la grieta, a . Finalmente, se define la relación analítica entre las variables precedentes, suponiendo una función de distribución de Gumbel de máximos. De este modo, se sientan las bases para una definición probabilística completa del campo $da/dN - K_M$. El procedimiento permite un seguimiento comparativo continuo en cada etapa del procedimiento entre los datos de los resultados experimentales y las soluciones extrapoladas derivadas del modelo analítico propuesto. La aplicación al crecimiento experimental de grietas confirma la validez del modelo.

PALABRAS CLAVE: Modelo de crecimiento de grieta, Curva $a - N$, Modelo REX, Curva $da/dN - K_M$, Solución analítica Gumbel.

ABSTRACT

A unitary methodology is proposed for the analysis of fatigue crack growth as a phenomenological approach. First, the analytical expression of the $a - N$ curve is derived from monitored data using the REX model (back-extrapolation), employing a four-parameter Weibull distribution function (cdf). The assumption that the crack phenomenon is a Markovian damage process justifies the definition of the complete $a - N$ curve, based on the forward and backward extrapolation of the collected experimental data. Analytical expressions for da/dN and K_M are then obtained as functions of the crack length, a . Finally, the analytical relationship between the preceding variables is defined, assuming a maximal Gumbel distribution function. This lays the groundwork for a complete probabilistic definition of the $da/dN - K_M$ field. The procedure allows for continuous comparative monitoring at each stage of the procedure between the data from the experimental results and the extrapolated solutions derived from the proposed analytical model. Application to experimental crack growth confirms the validity of the model.

KEYWORDS: Crack growth approach, $a - N$ curve, Back-extrapolation model, FCGR curve, Analytical Gumbel solution.

1. INTRODUCCIÓN

Desde la propuesta de solución de la curva FCGR de Paris-Erdogan, como relación lineal entre la velocidad de crecimiento de grieta y el factor de intensidad de tensiones (FIT), se han propuesto diferentes soluciones analíticas, en un intento de lograr buenos ajustes de los resultados experimentales más allá de la región de Paris. Hoepfner y colaboradores [1-3], contribuyen a un cambio radical al proponer soluciones empíricas del tipo de función de distribución (fdd) triparamétrica de Weibull (que los autores denominaban tetraparamétrica, al incluir un parámetro adicional para definir el límite superior asintótico) que permitían el ajuste completo de

la curva FCGR de tipo sigmoideal, correspondiente a las tres zonas I, II y III que la definen. Estos modelos permitían excelentes ajustes en diferentes tipos de aceros, aunque, paradójicamente, fueron perdiendo popularidad, tal vez por la aparición de la ecuación de NASGRO [4]. La propuesta de Castillo et al, como ajuste de fdd de Gumbel, [5]:

$$\frac{\log \Delta K - \log \Delta K_{th}}{\log \Delta K_{up} - \log \Delta K_{th}} = \exp \left[-\exp \left(\frac{\lambda_G - \log(da/dN)}{\delta_G} \right) \right] \quad (1)$$

aporta nuevos fundamentos que justifican el ajuste fenomenológico con dos teoremas trascendentales como alternativa a soluciones basadas en self-similarity. Entretanto, aparecen soluciones que incluyen el efecto

del cierre de grieta y el del nivel medio del factor de tensión, lo que favorece la tendencia actual de sustituir $\Delta\sigma$ por σ_M como variable de referencia en el estudio del fenómeno de crecimiento de grieta. La mayor parte de los modelos adolecen de inconsistencia dimensional y de la identificación de $\Delta K_{cr} = (1 - R)K_{IC}$ como la asíntota superior de la curva FCGR.

A pesar de su reconocimiento mundial, como la propuesta más popular para definir la curva FCGR, la ecuación NASGRO, definida como:

$$\frac{da}{dN} = C \left[\left(\frac{1-f}{1-R} \right) \Delta K \right]^n \frac{\left(1 - \frac{\Delta K_{th}}{\Delta K} \right)^p}{\left(1 - \frac{K_{max}}{K_C} \right)^q} \quad (2)$$

evidencia inconsistencias impropias de un modelo de referencia avanzado ampliamente aceptado, tales como:

- Inconsistencia dimensional.
- Evaluación independiente de las tres regiones características del campo $da/dN - K_M$.
- Consideración de los dos parámetros de Paris, C y m, para definir la región lineal, que están correlacionados entre sí.
- Definición gratuita de los dos parámetros del modelo, que definen la doble correspondencia asíntotica de la curva FCGR, a saber, ΔK_{th} correspondiente al rango comprendido entre 10^7 y 10^8 ciclos, según la normativa utilizada.
- Definición de ΔK_{cr} , a partir de K_{IC} .

Con todo, hasta el momento se echa en falta un enfoque unitario que abarque la definición analítica de la curva $a - N$ y su posterior transformación en la definición analítica de las curvas $da/dN - a$ y $da/dN - K_M$.

En este trabajo, el proceso de crecimiento de grietas se considera un fenómeno de daño que puede describirse como un proceso markoviano en el sentido dado por Bogdanoff-Kozin [6]. Se asume que ambas curvas $a - N$ y $da/dN - K_M$ son funciones muestrales estocásticas que, una vez normalizadas, se identifican como funciones de distribución (fdd) de la familia estadística de valores extremos. La excelente calidad de los ajustes confirma “sin fisuras” la metodología general aplicada.

2. LA METODOLOGÍA PROPUESTA

En el caso de ensayos realizados a partir de probetas prefisuradas, el modelo fenomenológico REX, propuesto por Blasón et al. [7,8], como alternativa al procedimiento EIFS, permite obtener una definición analítica completa de la curva $a - N$ de crecimiento de grieta, que incluye prospectivamente la etapa temprana de propagación, hasta el crecimiento asíntotico virtual, más allá de la interrupción del crecimiento estable de la grieta interrumpido por fallo de tenacidad a fractura cuando el

FIT alcanza el valor de K_{IC} . Este modelo, se basa en que los datos experimentales de crecimiento de grieta registrados en los ensayos representan sólo una fracción de una función muestral estocástica que puede extrapolarse, según el concepto de Bogdanoff-Kozin [6], hacia abajo y hacia arriba para reconstruir el proceso de daño completo en régimen de propagación, siguiendo el esquema mostrado en la Figura 1.

Esto sugiere el desarrollo de una metodología fenomenológica robusta y novedosa que contempla el crecimiento de grieta como un proceso unitario desde la definición de la curva $a - N$ hasta la completa definición de la curva FCGR, en el que las diferentes funciones intervinientes a lo largo del preceso de conversión se definen analíticamente.

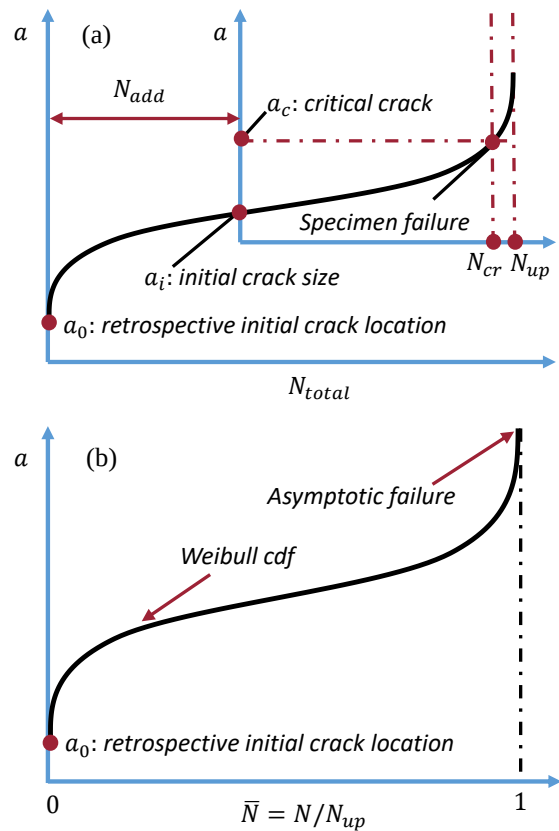


Figura 1. Representación esquemática del modelo REX [7,8]: (a) curva $a - N$ extendida y (b) curva $a - N$ normalizada como una fdd de Weibull.

La nueva metodología unitaria propuesta comprende los siguientes pasos: a) La aplicación del modelo REX con los datos registrados en los ensayos con probeta prefisurada para alcanzar la completa definición de la curva $a - N$; b) sus sucesivas transformaciones que permiten una racional definición en su zona superior y la obtención de la curva $da/dN - a$; c) la síntesis entre las curvas $da/dN - a$ y $K_M - a$, según la definición convencional entre FIT y tamaño de grieta y d) la definición analítica de la curva $da/dN - K_M$.

2.1 Definición analítica de la curva $a - N$ basada en el modelo REX

El modelo supone que los datos experimentales, recopilados a partir de la monitorización del crecimiento de grieta durante el ensayo, pertenecen a una función muestral estocástica [6,9], que, adecuadamente normalizada, se identifica como una función de distribución (fdd) de Weibull:

$$\bar{N} = \frac{N}{N_{up}} = 1 - \exp \left\{ - \left[\frac{a - a_0}{\delta_{W,REX}} \right]^{\beta_{W,REX}} \right\} \quad (3)$$

donde los parámetros del modelo, de acuerdo con la Figura 1, son: a_0 , la posible ubicación inicial de la grieta, identificada como el parámetro Weibull de localización; $\delta_{W,REX}$ y $\beta_{W,REX}$, los parámetros Weibull de escala y forma, respectivamente; N y $\bar{N}$ los ciclos aplicados y normalizados, respectivamente y N_{up} , el número total de ciclos hasta la rotura.

Un esquema de la metodología unitaria propuesta para alcanzar la completa definición de la curva FCGR de acuerdo con el modelo de Castillo et al [5] a partir de los datos experimentales de crecimiento de grieta, es decir, la curva $a - N$, se muestra en la Figura 2.

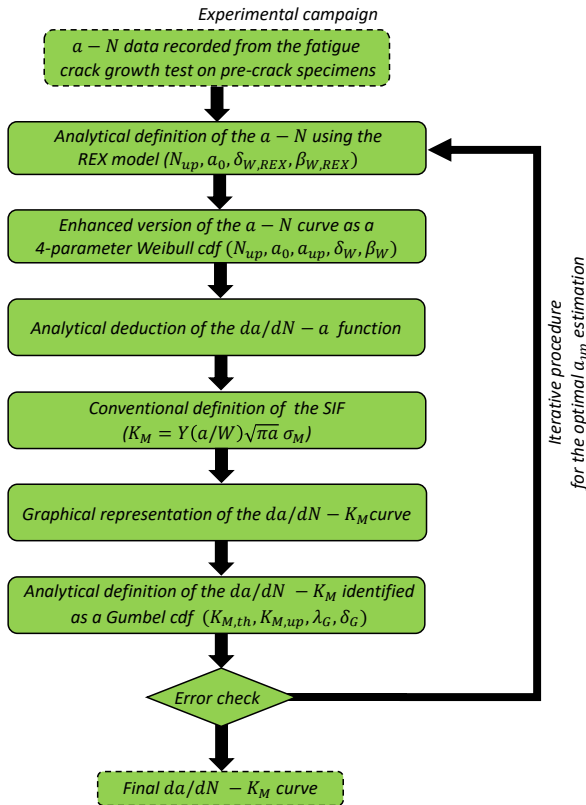


Figura 2. Diagrama de flujo que ilustra la aplicación de la metodología propuesta.

2.2 Definición de un tamaño de grieta corregido

Para evitar la contradicción de una tendencia asintótica inexistente del tamaño de grieta, según la Expresión (3), se propone una definición alternativa de la variable a :

$$a^* = \frac{a - a_0}{a_{up} - a} W \quad (4)$$

De la que se deduce la nueva expresión de $\bar{N}$:

$$\bar{N} = \frac{N}{N_{up}} = 1 - \exp \left\{ - \left[\frac{a^*}{\delta_W} \right]^{\beta_W} \right\} = 1 - \exp \left\{ - \left[\frac{a - a_0}{(a_{up} - a) \delta_W} \right]^{\beta_W} \right\} \quad (5)$$

donde a_0 , β_W y δ_W son el parámetro de localización (representando el tamaño inicial de la grieta), de forma y de escala de Weibull, respectivamente, y a_{up} es el valor de la grieta que precede a la rotura en un proceso virtual de crecimiento estable de grieta, que ignora la condición real de fallo cuando $K_M = K_{Ic}$.

Mientras que a_0 se puede determinar mediante una estimación previa con el modelo triparamétrico de Weibull, la estimación de a_{up} exige requiere un proceso iterativo, que se puede consultar en [10].

La Expresión (5) se puede interpretar como una función tetra-paramétrica de Weibull, de la que se deduce la función $da/dN - a$:

$$\frac{da}{dN} = \frac{\delta_W (a_{up} - a)^2}{N_{up} \beta_W (a_{up} - a_0)} \frac{\exp \left\{ \left[\frac{a - a_0}{\delta_W (a_{up} - a)} \right]^{\beta_W} \right\}}{\left[\frac{a - a_0}{\delta_W (a_{up} - a)} \right]^{\beta_W - 1}} \quad (6)$$

Aceptando un régimen elástico-lineal y recurriendo a K_M como FIT de referencia, en lugar de ΔK , se recurre a la expresión convencional $K_M = Y(a/W) \sqrt{\pi a} \sigma_M$, en la que $Y(a/W)$ es el factor geométrico para el tipo de ensayo empleado.

De ambas curvas, $da/dN - a$ y $K_M - a$, se obtienen, punto a punto, los datos que definen la curva FCGR. Su ajuste y expresión analítica se facilitan aplicando el modelo propuesto por Castillo et al [5], utilizando K_{GRV} como variable de referencia:

$$K_{GRV} = \frac{\log K_M - \log K_{M,th}}{\log K_{M,up} - \log K_{M,th}} \quad (7)$$

Lo que permite la definición analítica de la curva $da/dN - K_M$ como fdd de Gumbel de máximos:

$$\frac{\log K_M - \log K_{M,th}}{\log K_{M,up} - \log K_{M,th}} = \exp \left[- \exp \left(\frac{\lambda_G - \log(da/dN)}{\delta_G} \right) \right] \quad (8)$$

en la que λ_G y δ_G son los parámetros de localización y escala de Gumbel parameters, y $K_{M,th}$ y $K_{M,up}$ son los valores límites asintóticos de K_M .

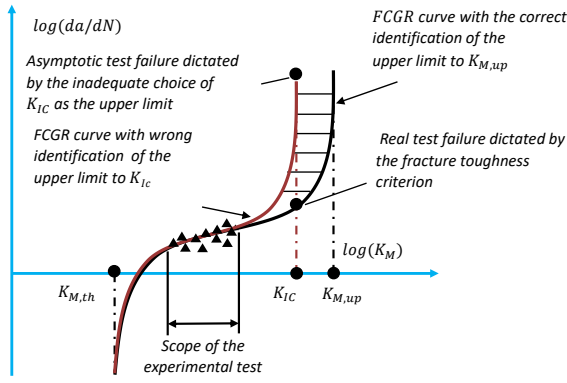


Figura 3. Ilustración esquemática de los dos enfoques FCGR: el tradicional basado en K_{IC} y el propuesto basado en $K_{M,up}$.

2.3 El procedimiento iterativo para la estimación fiable de K_{up}

La consideración apriorística de K_{IC} como un límite superior asintótico de la curva FCGR, es una solución adoptada en la práctica totalidad de los modelos actuales en la literatura [10]. Sin embargo, la definición correcta de la curva $da/dN - K_M$ exige la consideración de definir el fallo real por fatiga sobre la propia FCGR deducida a partir de $K_{M,up}$, ya sea durante el ensayo de crecimiento de grietas o en el diseño a fatiga, ver Fig. 4. Se debe tener presente, que K_{IC} es un valor, en principio, elegido como mero representativo del material, mientras que una definición probabilística de K_{IC} permitiría la predicción probabilística del fallo del componente utilizando la curva FCGR, basada en la definición de $K_{M,up}$, como aquí se propone. Como se comprueba, ésta es independiente de K_{IC} .

Para la estimación del valor inicial de la grieta, a_0 , se aplicó el modelo triparamétrico de Weibull, aceptando la validez del modelo REX, bajo el supuesto de que la zona baja de la curva $a - N$, y, en particular, a_0 , no queda afectada significativamente por la modificación del modelo REX para la mejora de la definición de la zona alta de la misma.

3. EJEMPLO DE APLICACIÓN

Con el fin de verificar la utilidad del modelo unitario propuesto, se evaluaron los resultados registrados en 17 ensayos de crecimiento de grieta, de una aleación de aluminio 2024-T351, publicada en [11], hasta la definición analítica de la curva FCGR. Las propiedades mecánicas del material son: módulo de Young, $E = 73100 \text{ MPa}$; límite elástico, $\sigma_{ys} = 324 \text{ MPa}$; tensión de rotura, $\sigma_u = 324 \text{ MPa}$, y tenacidad a la fractura, $K_{IC} = 26 - 37 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. Los ensayos se realizaron en probetas CT, de ancho, $W = 50 \text{ mm}$, espesor, $B = 12 \text{ mm}$ y longitud inicial prefisurada, $a_{pc} = 15 \text{ mm}$, bajo una carga de 4500 N, relación de tensiones $R=0.2$ y una frecuencia de 20 Hz.

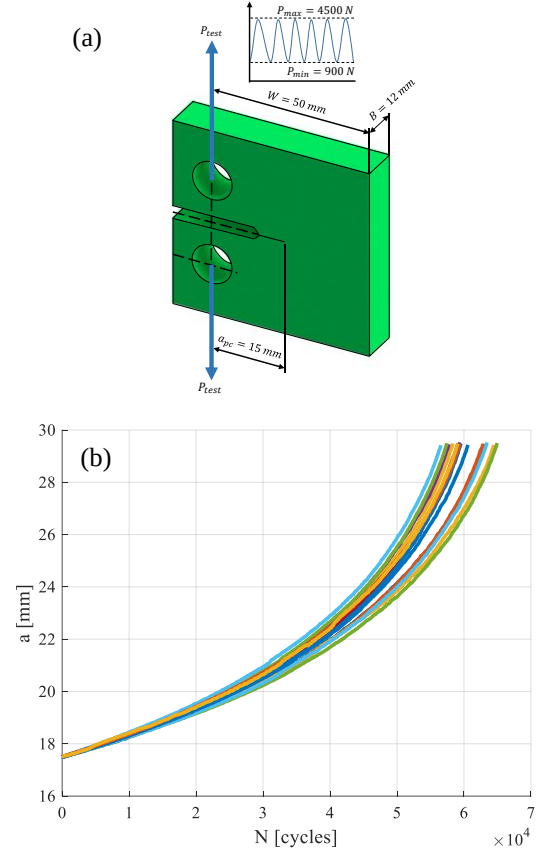


Figura 4. (a) Geometría de las probetas CT ensayadas, y b) curvas $a - N$ deducidas en la campaña experimental.

El proceso iterativo, aplicado para la estimación del valor límite de la grieta, a_{up} , previo a la ruptura virtual por crecimiento estable de la grieta, se inicia con una valor inicial de $a_{up} = 1.10 a_{ref}$, donde a_{ref} se identifica como $a_{cr} = \frac{1}{\pi} [K_{IC} / (Y(a/W) \sigma_M)]^2$, lo que se considera una estimación conservadora, sin mayor influencia que la relativa al número de iteraciones. El proceso de iteración aplicado queda reflejado en el diagrama de flujo de la Figura 2.

La Figura 5(a) muestra las curvas $a - \bar{N}$ del material, como solución de fdds tetraparamétricas de Weibull, en función de la vida normalizada $\bar{N} = N/N_{up}$, mientras que la Figura 5(b) se refiere a la , se aplica la vida total, sin normalizar. En el cálculo de K_M , se aplica la siguiente expresión convencional

$$K_M [\text{MPa}\sqrt{\text{m}}] = \frac{F_{max}}{B\sqrt{W}} Y(a/W) \frac{1}{\sqrt{1000}} \quad (9)$$

donde $Y(a/W)$ adopta el valor estándar referido a la geometría de probeta CT.

Una vez estimado el límite superior asintótico $K_{M,up}$ a partir del valor actual de a_{up} , se obtiene la expresión analítica de la curva $da/dN - K_M$ siguiendo el modelo fenomenológico propuesto por Castillo et al. [5], en el que la solución normalizada de la curva FCGR se

identifica como una función de distribución de Gumbel para máximos (véase la Figura 8). Esto, a su vez, permite implementar un nuevo valor de a_{up} mejorado en el proceso iterativo hasta que el error comparativo se considere aceptable, de acuerdo con el material. La Figura 6 representa la curva FCGR ajustada para el valor final estimado de a_{up} , de acuerdo con los datos experimentales.

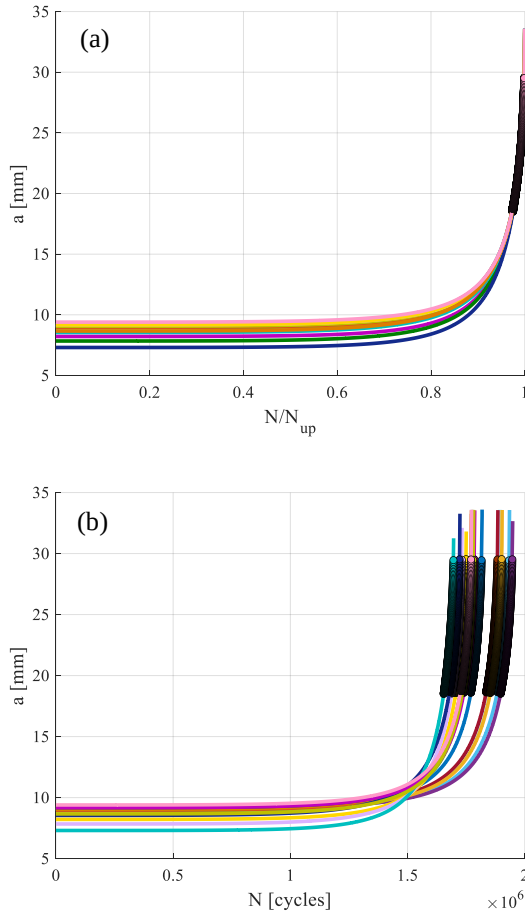


Figura 5. Curvas $a - N$ estimadas con el modelo tetraparamétrico de Weibull para las 17 probetas de la aleación de aluminio 2024-T351: (a) representación normalizada y (b) representación dimensional.

La Tabla 1 muestra los parámetros del modelo obtenidos con el presente procedimiento para todas las probetas del programa experimental de [11].

Se recuerda que se acepta el hecho de que diferentes curvas $a - N$, obtenidas para diferentes valores de la σ_M aplicada, dan lugar a una única curva FCGR.

4. DISCUSIÓN

La metodología propuesta en este trabajo se basa fundamentalmente en el concepto fenomenológico de Freudenthal [12] y en la suposición de que el proceso de crecimiento de grietas por fatiga es un fenómeno estocástico de evolución del daño, de acuerdo con

Bogdanoff-Kozin [6]. Por consiguiente, la degradación por fatiga se describe como la realización de un proceso representado por una función muestral, cuya definición analítica se obtiene como la función $a - N$, utilizando el modelo REX [7,8] junto con la curva FCGR correspondiente, basada en el modelo propuesto por Castillo et al. [5].

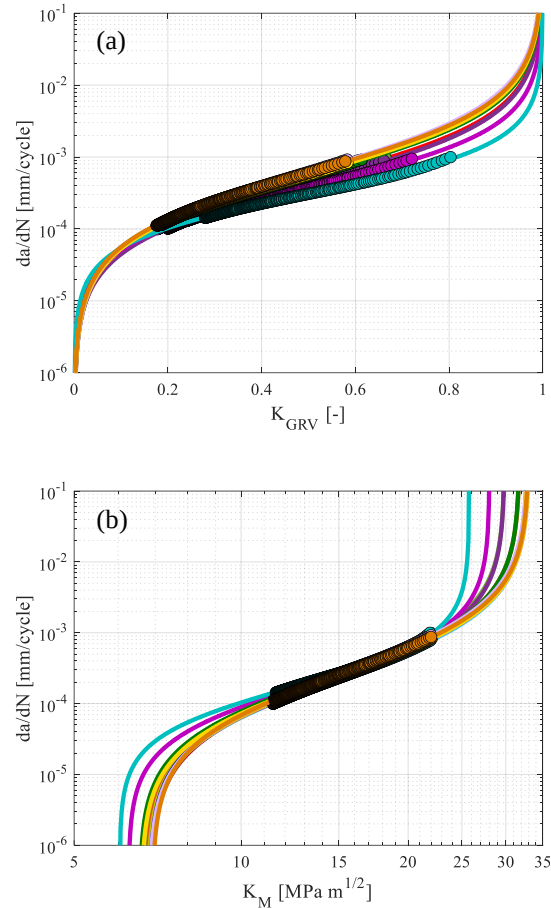


Figura 6. Curvas FCGR calculadas según el modelo de Castillo et al [5] para las 17 probetas de la muestra de aleación de aluminio 2024-T351: (a) representación normalizada e identificación como fdd de Gumbel y (b) representación dimensional.

Tabla 1. Parámetros del modelo de Gumbel obtenidos en las evaluaciones de todas las curvas FCGR en el programa experimental [11]

Specimen	λ_G	δ_G	K_{th}	K_{up}
1	-7.504	1.077	6.760	32.948
2	-7.457	1.104	6.855	32.984
3	-7.535	1.090	6.763	32.863
4	-7.658	1.024	6.715	29.849
5	-7.747	1.035	6.798	29.860
6	-7.465	1.098	6.808	33.101
7	-7.506	1.078	6.734	31.815
8	-7.446	1.071	6.828	32.872
9	-7.406	1.105	6.767	32.897
10	-7.947	0.897	6.413	27.212
11	-7.875	0.920	6.257	28.051
12	-7.505	1.062	6.552	31.770
13	-8.086	0.790	6.035	25.785
14	-7.413	1.091	6.822	32.928
15	-7.383	1.116	6.815	32.878
16	-7.473	1.079	6.602	32.951
17	-7.403	1.087	6.911	32.999

La función muestral que representa la evolución del daño resulta ser una función monótonamente creciente que varía en el rango $[0,1]$, una vez normalizada. Ésta se identifica, por definición, como una función de distribución que pertenece, aparentemente, a una familia desconocida. Sin embargo, los fenómenos estocásticos relacionados con la fractura y la fatiga presentan, en general, características, propias de valores mínimos y máximos, que se han confirmado con la idoneidad en la aplicación de familias estadísticas de extremos para el tratamiento de diferentes fenómenos de fatiga y fractura [9]. A su vez, si se supone el daño por fatiga como un proceso de Markov, la evolución de la grieta permite reconstruir la definición analítica, desde las etapas iniciales hasta las finales del proceso de crecimiento de la grieta, mediante el ajuste de los datos experimentales registrados durante el ensayo, incluso si éstos representan solo una información parcial de todo el proceso.

El modelo REX modificado establece las bases para una estimación correcta de la distribución de las duraciones de vida para cualquier tamaño de grieta inicial y final, $a_{i,dt}$ y $a_{f,dt}$, adoptados en el diseño de tolerancia al daño. El primero se diferencia del tamaño de la pregrieta, a_i , inducido en los ensayos de crecimiento de grieta monitorizados, mientras que el segundo se selecciona según los criterios específicos de tolerancia al daño. En el caso habitual, $a_{i,dt} < a_i$, lo que implica que una identificación de la distribución de vidas útiles en el fallo basada en las curvas $a - N$ del tamaño de pre-fisura, a_i , proporcionará una estimación no conservadora de la distribución de vidas útiles.

Por el contrario, dado que el modelo REX define la expresión analítica del curso completo de las curvas $a - N$, a partir de las curvas $a - N$ obtenidas para el tamaño de fisura inicial particular a_i , éste permite derivar una distribución fiable de la estimación de vida por fatiga para cualquier valor de $a_{i,dt}$ y $a_{f,dt}$ adoptado en el diseño de tolerancia al daño y, como resultado, una predicción fiable de la vida útil.

5. CONCLUSIONES

Las principales conclusiones que se derivan del presente trabajo son las siguientes:

- Se presenta una metodología unitaria para la definición analítica de la curva $da/dN - K_M$ curve. La propuesta se inicia con la aplicación del modelo REX en la evaluación de los resultados experimentales, $a - N$, registrados
- La curva $da/dN - K_M$ se define como una fdd de Gumbel de máximos que describe de forma unitaria las tres zonas de la propagación en el crecimiento de grieta.
- La definición analítica de las funciones intervinientes en el procedimiento propuesto permite definir la tendencia de curva más allá del ámbito de los resultados experimentales registrados. Ello garantiza

una estimación más fiable de la curva $da/dN - K_M$ y de sus valores límites $K_{M,th}$ y $K_{M,up}$ y con ello de la predicción de rotura.

- El procedimiento propuesto representa una firme base para una caracterización probabilística de los materiales en relación el crecimiento de grieta, y, por tanto, en el diseño bajo el criterio de tolerancia al daño.

REFERENCIAS

- [1] D.W. Hoepfner, W.E. Krupp. *Prediction of component life by application of fatigue crack growth knowledge*, Eng Fract Mech, 6 (1974) 47–70
- [2] G.E. Bowie, D.W. Hoepfner. *Numerical modeling of fatigue and crack propagation results*, Nucl. Metall. Proc, Vol 20, Part 2 (1976) 1171–1178
- [3] G.C. Salivar, D.W. Hoepfner. *A Weibull analysis of fatigue-crack propagation data from a nuclear pressure vessel steel* Eng Fract Mech, 12 (1979) 181–184
- [4] NASGRO. *Fatigue Crack Growth Computer Program NASGRO Version 3.0- Reference Manual* (2000)
- [5] E. Castillo, A. Fernández-Canteli, D. Siegle. *Obtaining S-N curves from crack growth curves: An alternative to self-similarity*, Int. J. Fract, 187 (2014) 159–172
- [6] J.L. Bogdanoff, F. Kozin. *Probabilistic models of damage accumulation*, John Wiley & Sons (1985)
- [7] S. Blasón, *Phenomenological approach to probabilistic models of damage accumulation. Application to the analysis and prediction of fatigue crack growth*, PhD Thesis, University of Oviedo (2019)
- [8] S. Blasón, A. Fernández-Canteli, C. Rodríguez, E. Castillo. *Retroextrapolation of crack growth curves using phenomenological models based on cumulative distribution functions of the generalized extreme value family*, Int. J. Fatigue, 141 (2020) 105897
- [9] A. Fernández-Canteli, E. Castillo, S. Blasón. *A methodology for phenomenological analysis of cumulative damage processes. Application to fatigue and fracture phenomena*, Int. J. Fatigue. 150 (2021) 106311
- [10] A. Fernández-Canteli, D. Díaz-Salamanca, E. Castillo, S. Blasón, M. Muñoz-Calvente. *Unitary phenomenological approach to the fatigue crack growth curve based on the analytical definition of the a-N curve*, Submitted to Int. J. Fatigue, Marzo, (2025)
- [11] C. Lapetra, J. Mayo, J. Domínguez. *The randomness of fatigue crack growth under constant-amplitude loads*, Fatigue Fract Eng Material Structures, 9 (1996) 589–600
- [12] A.M. Freudenthal. *The statistical aspect of fatigue of materials*, Proc R Soc London Ser A Math Phys Sci, 187 (1946) 416–429

IMPLEMENTACIÓN EN UN CÓDIGO COMERCIAL DEL CRITERIO ACOPLADO DE LA MECÁNICA DE LA FRACTURA FINITA

I.G. García*, V. Mantič

Departamento de Mecánica de Medios Continuos y Teoría de Estructuras, E.T.S. de Ingeniería, Escuela Politécnica Superior. Universidad de Sevilla
Camino de los Descubrimientos s/n, 41092 Sevilla, España

*Persona de contacto: israelgarcia@us.es

RESUMEN

El criterio acoplado de la mecánica de la fractura finita ha demostrado ser un criterio capaz de predecir la iniciación de grietas en multitud de problemas de interés. Por lo tanto, se trata de un buen complemento al criterio de Griffith, puesto que éste está limitado en cuanto a predecir la iniciación. Por su formulación, el criterio acoplado es capaz de predecir fácilmente soluciones con métodos analíticos o cuasianalíticos en problemas relativamente sencillos. Sin embargo, su implementación en un contexto puramente numérico está limitado a usuarios avanzados dentro de la propia comunidad de la mecánica de la fractura finita, al no existir una implementación universal. Este trabajo propone una implementación basada en un código comercial muy popular, facilitando su utilización a usuarios que no tengan necesariamente unos conocimientos avanzados de la mecánica de la fractura finita. Para ello, se implementa este criterio basándose en herramientas ya implementadas en los códigos comerciales, como XFEM, y englobando todo en el contexto de un problema de optimización multivariable, dentro de un código de Abaqus scripting en Python.

PALABRAS CLAVE: Criterio acoplado, Mecánica de la Fractura Finita, Iniciación de grietas

ABSTRACT

The coupled criterion of finite fracture mechanics has proven to be a criterion capable of predicting crack initiation in a wide range of problems of interest. Therefore, it is a good complement to Griffith's criterion, as it addresses one of its main limitations: the inability to predict crack initiation. Due to its formulation, the coupled criterion can easily predict solutions using analytical or quasi-analytical methods in relatively simple problems. However, its implementation in a purely numerical context is limited to advanced users within the finite fracture mechanics community, as there is no universal implementation. This work proposes an implementation based on a very popular commercial code, allowing users to use it without advanced knowledge of finite fracture mechanics. To achieve this, the criterion is implemented using advanced tools already available in commercial codes, such as XFEM, and framed within the context of a multivariable optimization problem. The implementation uses Abaqus scripting with a Python code.

KEYWORDS: Coupled criterion, Finite Fracture Mechanics, Crack Initiation

1. INTRODUCCIÓN

La iniciación de grietas ante cargas cuasiestáticas es un problema aún de difícil resolución, sin que exista un amplio consenso en la comunidad, ni sobre las herramientas teóricas para abordarlo, ni sobre las propiedades que intervienen en él. En las últimas décadas se han venido utilizando diferentes herramientas, como los modelos de zona cohesiva o los modelos de phase field. Cabe destacar, como, para este último, la iniciación sigue siendo un problema abierto.

Una de las propuestas que ha abordado la iniciación con resultados más exitosos ha sido el criterio acoplado de la mecánica de la fractura finita (CA-MFF) [1]. Este criterio se basa en la idea de que una grieta se inicia cuando

se cumplen las dos condiciones siguientes de forma simultánea: a) en la zona donde la grieta se inicia las tensiones han superado un umbral crítico (criterio tensional) y b) el balance energético entre los estados previos y posterior a la iniciación de la grieta es termodinámicamente admisible (criterio energético).

El CA-MFF se ha aplicado a problemas de iniciación de grietas muy diversos, tanto en materiales como en estados de carga, presentando buenas predicciones, ver revisiones en [2–4]. Además, este criterio permite dar una interpretación física a los resultados, a la influencia de los diferentes parámetros y a la transición entre diferentes regímenes de comportamiento.

En la literatura se pueden encontrar varias propuestas pa-

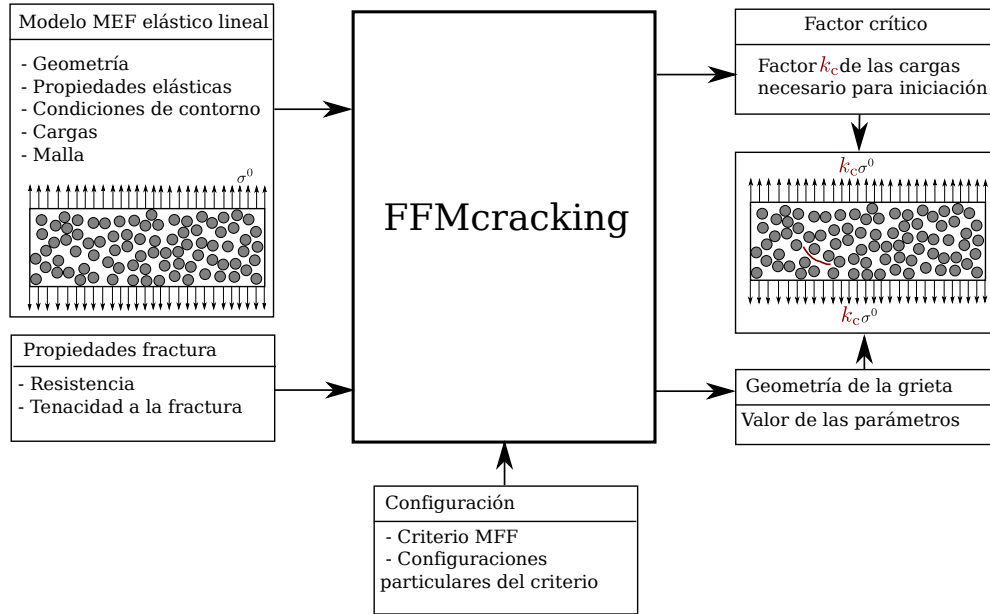


Figura 1: Esquema de la implementación en Abaqus.

ra implementar el CA-MFF de forma computacional: Cornetti y Mantič [5] propusieron una metodología computacional en la que se utilizaba una ley cohesiva cuyos umbrales críticos se hacen depender del cumplimiento del CA-MFF. Este enfoque fue ampliamente desarrollado y extendido por Muños-Reja y otros [6]. En un enfoque totalmente diferente, Li y Leguillon [7] presentaron una implementación computacional basada en la eliminación de elementos a partir del CA-MFF, presentando buenas predicciones para problema que no se habían podido estudiar mediante el CA-MFF hasta ese momento. Formulando el CA-MFF a partir del Principio de Mínima Energía Potencial Total, como teorizado por Mantič [8], Ambikakumari y otros [9] presentaron una implementación numérica que permitía alcanzar una nivel de versatilidad y precisión óptimos en problemas complejos.

Si bien estas implementaciones han mostrado buenos resultados, queda por resolver una de las consecuencias parciales de la ausencia de una implementación numérica del CA-MFF: la barrera que supone para su extensión a la comunidad no especializada en el mismo. En ese sentido, es necesaria una implementación que tenga como objetivo principal su facilidad de uso y su robustez para poder ser usada incluso como una caja negra por aquellos interesados en un acercamiento parcial a las posibilidades del CA-MFF.

Así, en este artículo se desarrollan los primeros pasos de una implementación (FFMcracking) cuyo objetivo es permitir su uso a un público no especializado. Para ello, la primera implementación se basará en Simulia Abaqus. El objetivo es minimizar la complejidad de la entrada a archivos .inp que puede generar cualquier usuario básico

de esta aplicación, y a propiedades de resistencia y tenacidad a la fractura. En la figura 1 se presenta un esquema del código desde el punto de vista del usuario.

El artículo se organiza como sigue: En la sección 2 se plantea el CA-MFF como un problema de optimización, para facilitar su implementación automática y robusta. Una vez planteado el problema de optimización, la evaluación de la función objetiva se presentará en la sección 3 y la adaptación del algoritmo de optimización en la sección 4. Finalmente, en la sección 5 se presenta un ejemplo de aplicación.

2. EL CRITERIO ACOPLADO COMO UN PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN

Sea un sólido sometido a un sistema de cargas y condiciones de contorno. Se pretende evaluar para qué nivel de cargas se inicia una grieta y qué forma y tamaño tendrá esa grieta.

De acuerdo al CA-MFF, como se postula en [1], se iniciará una grieta de tamaño finito cuando se cumplan los dos siguientes criterios de forma simultánea:

- Criterio tensional: Las tensiones en aquellos puntos que formarán parte de la nueva grieta S_c iniciada deben superar un umbral crítico. De forma simplificada, esta condición se puede expresar como:

$$\sigma(\mathbf{x}) \geq \sigma_c \quad \forall \mathbf{x} \in S_c, \quad (1)$$

donde σ es la tensión normal en cada punto $\mathbf{x}$ a la superficie de nueva grieta S_c , y σ_c es la resistencia

del material. Este criterio se puede extender sin dificultad a otros criterios tensionales o a otras condiciones [2]. El código presentado está listo para contener todas estas extensiones, que forma parte de los desarrollos futuros.

- Criterio energético: El balance energético entre los estados inmediatamente anterior y posterior a la iniciación de la grieta tiene que cumplir el Primer Principio de la Termodinámica:

$$\Delta\Pi + \Delta E_k + \Gamma = 0, \quad (2)$$

donde $\Delta\Pi$ y ΔE_k son los cambios en energía potencial y energía cinética respectivamente y Γ es la energía disipada. Asumiendo un estado inicial cuasiestático,

$$\Delta\Pi \geq \Gamma. \quad (3)$$

Puesto que para que se verifique el CA-MFF es necesario que se cumplan los dos criterios de forma simultánea, y asumiendo que se parte de un estado de cargas nulo, la carga crítica para la que se iniciará la grieta será el mínimo valor que cumpla los dos criterios para alguna geometría de la grieta iniciada.

Así, partiendo de un estado de cargas ya dado por el usuario, para una cierta geometría de grieta de iniciación S_c le corresponde un valor del factor k a esas cargas que permite cumplir con el criterio tensional $k^{SC}(S_c)$ y con el criterio energético $k^{EC}(S_c)$. La condición de que ambos se tienen que cumplir lleva a que para cada geometría de grieta iniciada S_c haya que tomar la condición más restrictiva, lo que equivale a tomar el máximo de las dos funciones para cada S_c , que daría el valor $k^{CC}(S_c)$ del factor necesario según el CA-MFF para que se inicie una grieta de geometría S_c :

$$k^{CC}(S_c) = \max\{k^{SC}(S_c), k^{EC}(S_c)\}. \quad (4)$$

Puesto que se parte de un estado inicial sin carga, la grieta se iniciará con la geometría que minimize $k^{CC}(S_c)$, con lo que el problema se puede plantear de forma general como un problema de optimización de la forma siguiente:

$$k_c = \min_{S_c \in S} k^{CC}(S_c) = \min_{S_c \in S} \left(\max\{k^{SC}(S_c), k^{EC}(S_c)\} \right), \quad (5)$$

donde S es el espacio de geometrías de grietas iniciadas admisible.

3. EVALUACIÓN AUTOMÁTICA DE LA FUNCIÓN OBJETIVO EN ABAQUS

El problema de optimización planteado en (5) requiere de la evaluación de la función objetivo, que se compone a su vez de dos funciones correspondientes a los dos criterios. La evaluación de estas funciones de forma automática se describe a continuación.

3.1. Criterio tensional - k^{SC}

El criterio tensional (1) requiere la evaluación de las tensiones en los puntos $\mathbf{x} \in S_c$ antes de la iniciación. Para el sistema de cargas y geometría recogido en el archivo de entrada .inp suministrado por el usuario, estas tensiones se pueden obtener a partir de la ejecución de ese archivo sin modificar. Una vez resuelto, se define un Path correspondiente a S_c y finalmente se extraen las tensiones en ese Path.

Las tensiones $\tilde{\sigma}$ obtenidas mediante ese procedimiento corresponderán a las tensiones correspondientes al nivel de cargas suministrado por el usuario a través del archivo .inp. Asumiendo linealidad en el material y en el resto de modelizaciones del sistema, si las cargas se multiplican por un factor k , el valor de las tensiones debería ser $k\tilde{\sigma}$ y por lo tanto el criterio tensional en (1) se podría escribir como:

$$k\tilde{\sigma}(\mathbf{x}) \geq \sigma_c \quad \forall \mathbf{x} \in S_c, \quad (6)$$

con lo cual la condición para el factor k que permitiría cumplir el estado tensional k^{SC} se escribe como:

$$k^{SC}(S_c) = \frac{\sigma_c}{\max_{\mathbf{x} \in S_c} (\tilde{\sigma}(\mathbf{x}))}. \quad (7)$$

Esta expresión puede fácilmente extenderse para tener en cuenta criterios más complejos.

3.2. Criterio energético - k^{EC}

El criterio energético (3) requiere de la obtención del cambio de energía potencial $\Delta\Pi(S_c)$ y de la energía disipada $\Gamma(S_c)$ en la iniciación de la grieta.

El valor de $\Delta\Pi(S_c)$ se puede obtener a partir del estudio de los siguientes problemas.

- Problema 1: Modelo sin grieta que corresponde al suministrado por el usuario en el archivo de entrada y ya resuelto para la evaluación del criterio tensional. De este problema se extraería el valor de las fuerzas nodales $\tilde{\mathbf{F}}^{(2)}$ y los desplazamientos nodales $\tilde{\mathbf{u}}^{(2)}$ en aquellos nodos en los que se han impuesto condiciones de contorno.
- Problema 2: Modelo con grieta que corresponde al suministrado por el usuario en el archivo de entrada, que se modifica de forma automática para introducir una grieta de geometría S_c con XFEM (con lo que la malla suministrada por el usuario se reutiliza) y se resuelve. De este problema se extraería el valor de las fuerzas nodales $\tilde{\mathbf{F}}^{(2)}$ y desplazamientos nodales $\tilde{\mathbf{u}}^{(2)}$ en aquellos nodos en los que se han impuesto condiciones de contorno.

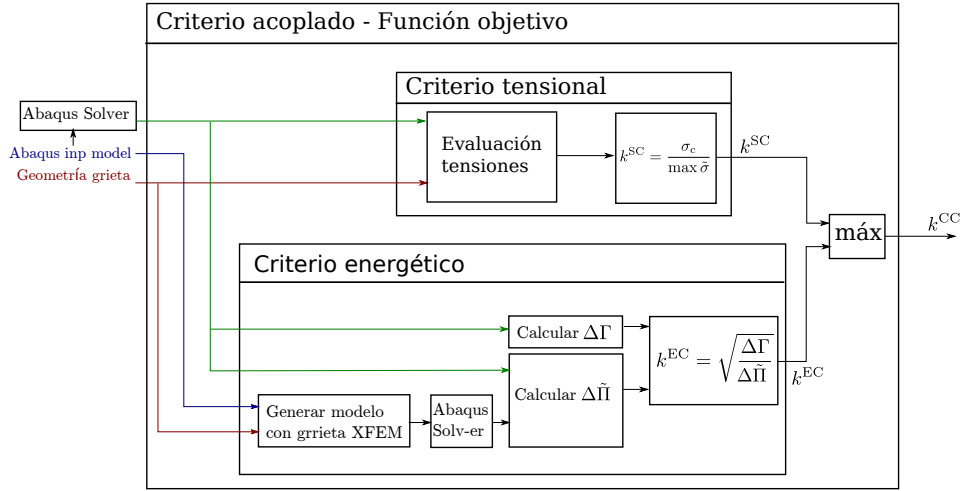


Figura 2: Esquema de la evaluación automática de la función objetivo en Abaqus.

Asumiendo comportamiento lineal, el cambio de energía potencial $\Delta\tilde{\Pi}(\mathbf{S}_c)$ se puede obtener como:

$$\Delta\tilde{\Pi}(\mathbf{S}_c) = \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{F}}^{(1)} \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{(2)} - \tilde{\mathbf{F}}^{(2)} \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{(1)}). \quad (8)$$

Si se multiplican las cargas externas por un factor k , el cambio de energía potencial $\Delta\Pi$ para ese nuevo nivel de carga sería:

$$\Delta\Pi(\mathbf{S}_c) = k^2 \Delta\tilde{\Pi}(\mathbf{S}_c). \quad (9)$$

En cuanto al valor de la energía disipada Γ , este valor se puede obtener a partir del valor de la tenacidad a la fractura G_c suministrado por el usuario y el área S_c correspondiente a la superficie $\mathbf{S}_c$,

$$\Gamma(\mathbf{S}_c) = G_c S_c. \quad (10)$$

Esta expresión se puede extender de forma sencilla para tener en cuenta la influencia de la mixticidad del modo de fractura y otros conceptos.

Introduciendo las expresiones de $\Delta\Pi(\mathbf{S}_c)$ de (9) y $\Gamma(\mathbf{S}_c)$ de (10) en la condición derivada del balance (3) se obtiene el factor crítico correspondiente al criterio energético:

$$k^{EC}(\mathbf{S}_c) = \sqrt{\frac{\Gamma(\mathbf{S}_c)}{\Delta\tilde{\Pi}(\mathbf{S}_c)}}. \quad (11)$$

4. OPTIMIZACIÓN

Una vez establecida la función objetivo y su forma de calcularla de forma automática con Abaqus, la resolución del CA-MFF se reduce a minimizar esa función objetivo $k^{CC}(\mathbf{S}_c)$ para el valor óptimo de geometría de la iniciación de la grieta $\mathbf{S}_c$.

La geometría de la iniciación de la grieta $\mathbf{S}_c$ que se ha tratado hasta ahora de forma abstracta puede parametrizarse para el procedimiento de optimización. La geometría $\mathbf{S}_c$ estará determinada por unos parámetros $a_i \in A$, cuyo número dependerá de la hipótesis que se haga sobre la geometría de la grieta iniciada. Por ejemplo, si se asume dirección y punto de inicio de la grieta en un problema plano, el problema se reducirá a encontrar sólo un parámetro: la longitud. En general, el problema de optimización se puede expresar como:

$$k_c = \min_{a_i \in A} k^{CC}(a_i) = \min_{a_i \in A} \left(\max \{k^{SC}(a_i), k^{EC}(a_i)\} \right), \quad (12)$$

por lo que ahora el problema consiste en minimizar en función de esos parámetros.

Una vez parametrizada $\mathbf{S}_c$ se puede caracterizar la función objetivo con el fin de seleccionar el algoritmo de optimización. Las principales características de esta función objetivo son las siguientes: a) Medio-alto coste de evaluación, b) No se puede asegurar la convexidad, c) Derivada de la función objetivo no disponible, d) Suave sólo a trozos.

Puesto que alguna de estas características van a depender de la elección de parámetros del usuario, dentro del objetivo de maximizar la robustez y la usabilidad, se selecciona un algoritmo de optimización bayesiana, ver un resumen en [10], que debería aportar robustez en todas las circunstancias y ser adecuado para funciones objetivo costosas.

Aunque hay multitud de librerías en Python de algoritmos de optimización bayesiana, y las últimas versiones de Abaqus permiten cargar librerías externas de Python,

para no limitar la versión de Abaqus, se implementa una propia. En esta implementación se emplea un kernel de base radial, y sobre ese kernel se construye el modelo surrogado basado en un proceso gaussiano estimando la media y la varianza de la aproximación a partir de una matriz de covarianza. Para la elección de los siguientes candidatos a ser evaluados en la función objetivo, se utiliza una función de mejora esperada, que puntúa la posibilidad de mejora.

Esto es una implementación bastante estándar de este criterio, lo cuál presenta de base unas buenas condiciones para el problema de optimización que surge del CA-MFF en esta implementación. La excepción, es la incapacidad de este algoritmo de captar puntos no suaves. Para solucionar esto se consideran dos modelos surrogados separados para el criterio tensional y para el criterio energético, que sí que presentan en general suavidad. Esta modificación se encuentra detallada en [11].

5. EJEMPLO DE APLICACIÓN

Con el objetivo de ilustrar el funcionamiento de la implementación, se estudia un problema clásico sencillo: la iniciación de una grieta en un placa con un taladro circular sometida a una tensión remota uniaxial. Los datos del problema se puede observar en la figura 3.

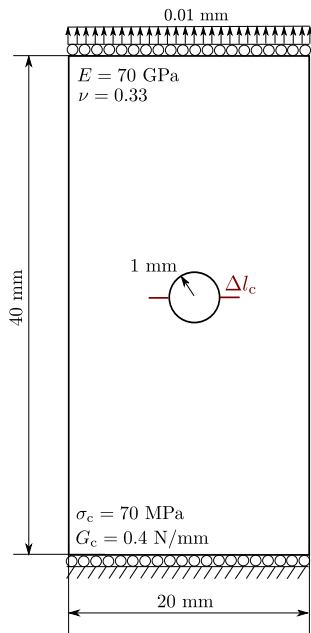


Figura 3: Esquema del problema de aplicación.

De esta problema se ha generado un modelo plano en Abaqus, con una malla uniforme de 163.751 nodos representando la mitad derecha de la geometría e imponiendo las condiciones de simetría correspondientes. Adicionalmente se ha impuesto un desplazamiento vertical de valor 0,01mm en la frontera superior y se han restringido los desplazamientos verticales en el contorno inferior. Para la

generación del modelo en Abaqus se puede usar la interfaz gráfica habitual y generar un archivo de entrada .inp al final del proceso usando la opción Write Input en el menú de Jobs una vez generado el Job.

La configuración del análisis con FFMcracking consiste en configurar un archivo de entrada .py donde se hace referencia a la ruta del archivo .inp del modelo sin grieta y se incluye las propiedades de fractura y resistencia necesarias, en este caso el valor de σ_c y G_c mostrados en figura 3. Además, en este caso, se asume que la grieta se inicia en el borde del taladro y sigue una dirección horizontal, lo que reduce los parámetros definiendo la grieta a uno: la longitud de la grieta en su iniciación, que se denominará Δl .

Una vez configurado, FFMcracking implementa el procedimiento y la optimización descritas en las secciones anteriores. Los resultados intermedios y finales del proceso de optimización se pueden observar en la figura 4. Estos resultados muestran en primer lugar que el procedimiento numérico de la función objetivo es muy preciso mostrando un buen acuerdo con los resultados teóricos existentes para este problema. Además, en lo que respecta al proceso de optimización, se puede observar que tras 15 evaluaciones, la aproximación de las curvas del criterio tensional y del criterio energético es bastante precisa en la zona cercana al mínimo. Tras estas evaluaciones de partida, se evalúa la varianza de la distribución de probabilidad para una malla densa del parámetro, y se calcula la mejora esperada sobre la aproximación en función de esa varianza y del valor medio. A partir de esa función se estima cuál es el mejor candidato como punto a evaluar. Este proceso se repite hasta que se cumpla un criterio de parada. A efecto de prueba, en este caso el criterio de parada ha sido llegar a 15 iteraciones.

6. CONCLUSIONES

Los resultados muestran que la implementación presentada es una buena herramienta para facilitar el uso del criterio acoplado de la mecánica de la fractura finita de forma robusta y ágil, incluso para aquellos expertos no especializados en la mecánica de la fractura finita.

La implementación presenta muchos puntos de extensión, desarrollo y mejora, entre los que cabe señalar: Extensión a geometrías de grietas de iniciación determinadas por más parámetros; inclusión del efecto de la mixticidad de fractura en la disipación de energía y de las tensiones tangenciales en el criterio tensional; continuación de la propagación; extensión para tener en cuenta otros criterios de la mecánica de la fractura, como aquellos de la teoría de distancias críticas; y paralelización del código, lo cuál es muy natural en el contexto de la optimización bayesiana. Estos desarrollos se pueden seguir en el repositorio de FFMcracking. [11].

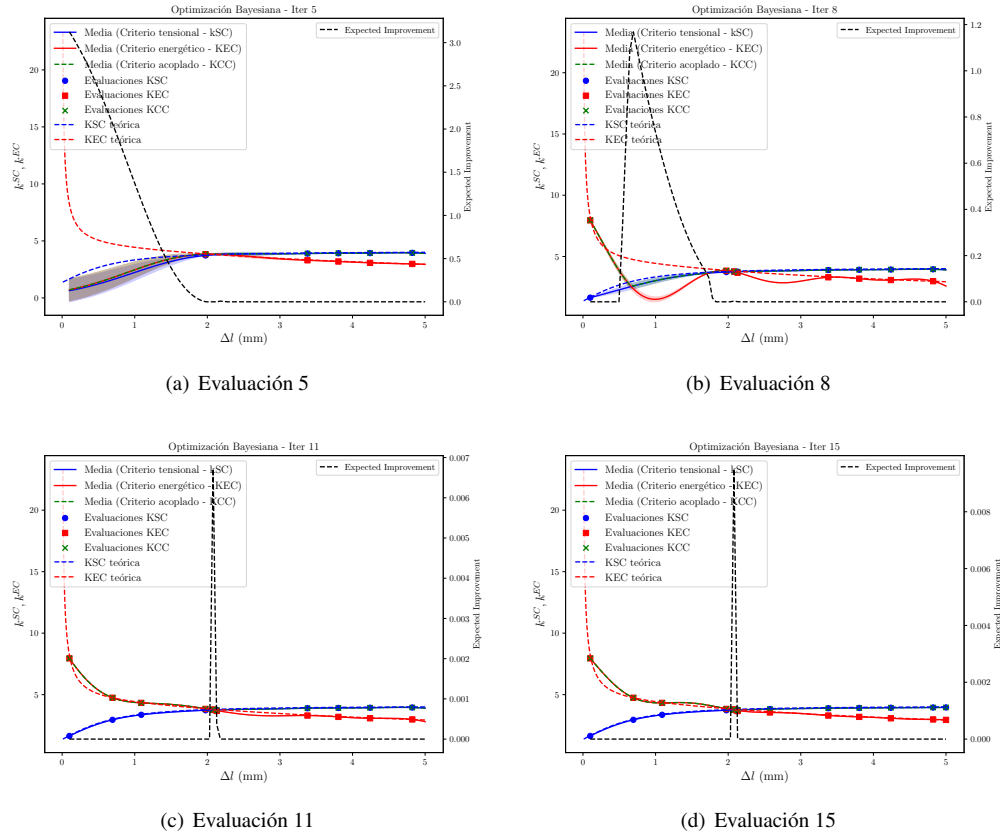


Figura 4: Resultados obtenidos para el ejemplo de aplicación.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece la financiación de la Agencia Estatal de Investigación (Proyecto PID2020-117001GB-I00 AEI 10.13039/501100011033).

REFERENCIAS

- [1] D. Leguillon. Strength or toughness? A criterion for crack onset at a notch. *European Journal of Mechanics and Solids*, 21(1):61–72, 2002.
- [2] I. G. García. *Crack initiation in composites at micro and meso scales. Development and applications of finite fracture mechanics*. PhD thesis, School of Engineering, University of Seville, 2014.
- [3] P. Weissgraeber, D. Leguillon, and Becker W. A review of finite fracture mechanics: crack initiation at singular and non-singular stress raisers. *Archive of Applied Mechanics*, 86:375–401, 2016.
- [4] A. Doitrand, T. Duminy, H. Girard, and X. Chen. A review of the coupled criterion. *Journal of Theoretical, Computational and Applied Mechanics*, Nov 2024.
- [5] P. Cornetti, V. Mantič, and A. Carpinteri. Finite Fracture Mechanics at elastic interfaces. *International Journal of Solids and Structures*, 49:1022–1032, 2012.
- [6] M. Muñoz-Reja, L. Távara, V. Mantič, and P. Cornetti. A numerical implementation of the coupled criterion of finite fracture mechanics for elastic interfaces. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 108:102607, 2020.
- [7] Jia Li and Dominique Leguillon. Finite element implementation of the coupled criterion for numerical simulations of crack initiation and propagation in brittle materials. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 93:105–115, 2018.
- [8] V. Mantič. Application of finite fracture mechanics to composites: Crack onset in a stretched open hole polymer plate with nonlinear behaviour. 2014.
- [9] K. Ambikakumari, V. Mantič, M. Muñoz-Reja, and L. Távara. Implementación en Abaqus de la minimización de la energía total bajo una condición de tensión para predecir el inicio y la propagación de grietas en materiales homogéneos frágiles. In *Revista española de mecánica de la fractura*, volume 5. Grupo Español de Fractura, 2023.
- [10] Peter I. Frazier. A tutorial on bayesian optimization. <https://arxiv.org/abs/1807.02811>, 2018.
- [11] I.G. García. FFMcracking. <https://github.com/israelgarcia86/FFMcracking>, 2025.

Generation of Mode I Stress Intensity Factor Solutions for Narrow Elliptical-Shaped Cracks in Round Bars: A Finite Element Approach

U. Eibar^{1,2*}, A. Dorronsoro^{1,2}, D. González^{1,2}, J. Alkorta^{1,2}, J.M. Martínez-Esnaola^{1,2}

¹ CEIT-Basque Research and Technology Alliance (BRTA), Manuel Lardizabal 15, 20018 Donostia/San Sebastián, España.

² Universidad de Navarra, Tecnun, Manuel Lardizabal 13, 20018 Donostia/San Sebastián, España.

* Persona de contacto: ueibar@ceit.es

RESUMEN

Los procedimientos avanzados de mantenimiento predictivo, cada vez más utilizados en la industria, tienen que hacer uso en muchos casos de análisis de tolerancia al daño que simulan la propagación de grietas en componentes y estructuras en base a leyes de la Mecánica de la Fractura. Este tipo de mantenimiento programado aporta beneficios significativos, al determinar los tiempos óptimos de reemplazo de componentes críticos, evitando también fallos catastróficos en la infraestructura de estudio. Este trabajo pretende ahondar en las capacidades de simulación de propagación de grieta combinando herramientas analíticas y numéricas. La Mecánica de la Fractura Elástica Lineal (MFEL) permite analizar la propagación de grietas conjugando los campos de tensiones remotos en el sólido con los Factores de Intensidad de Tensiones (FITs) obtenidos para configuraciones específicas de grietas, aplicando posteriormente leyes de propagación de grietas, como la ley de Paris. De esta manera se evitan procedimientos más complejos y computacionalmente costosos, como el Método Extendido de Elementos Finitos (XFEM). Hasta la fecha, la utilización de FITs tabulados ha facilitado en gran medida el cálculo de la propagación de grietas en diversas geometrías y condiciones de carga. Particularizando al tipo de componente estudiado en este trabajo, la literatura sobre barras redondas presenta una amplia gama de geometrías de grieta, incluyendo grietas circulares, grietas elípticas en forma de almendra y en forma de hoz, así como grietas rectas. Estas geometrías son especialmente relevantes para condiciones de carga de tracción y flexión en Modo I. No obstante, los autores consideran que no existe aún suficiente trabajo alrededor del cálculo de FITs para grietas con formas elípticas estrechas. Aunque en estadios de la propagación más avanzados las formas típicas se aproximen más a la circular, generar estas soluciones para una cierta gama de geometrías de grieta podría ser de gran interés para aquellos casos en los que la forma inicial pueda tener una gran variabilidad. Es por ello que el trabajo presenta soluciones de FITs para el Modo I para grietas de forma elíptica “estrecha” (alto factor de forma profundidad vs. longitud superficial) obtenidas mediante el Método de los Elementos Finitos (MEF).

PALABRAS CLAVE: Factores de Intensidad de Tensiones (FITs), Método de los Elementos Finitos (MEF), Mecánica de la Fractura Elástica Lineal (MFEL).

ABSTRACT

Advanced predictive maintenance procedures, increasingly used in the industry, often require damage tolerance analysis, which simulates the propagation of cracks in components and structures based on the laws of Fracture Mechanics. This type of scheduled maintenance provides significant benefits by determining the optimal times for replacing critical components and also preventing catastrophic failures in the infrastructure under study. This work aims to delve into the crack propagation simulation capabilities by combining analytical and numerical tools. Linear Elastic Fracture Mechanics (LEFM) allows for the analysis of crack propagation by combining remote stress fields in the solid with Stress Intensity Factors (SIFs) obtained for specific crack configurations, subsequently applying crack propagation laws such as Paris' Law. This approach avoids more complex and computationally expensive procedures like the Extended Finite Element Method (XFEM). To date, the use of tabulated SIFs has greatly facilitated the calculation of crack propagation in various geometries and loading conditions. Focusing on the type of component studied in this work, the literature on round bars presents a wide range of crack geometries, including circular cracks, almond-shaped and sickle-shaped elliptical cracks, as well as straight cracks. These geometries are especially relevant for Mode I tension and bending loading conditions. However, the authors consider that there is still a lack of SIF solutions for narrow elliptical-shaped cracks. Even if in more advanced stages of propagation the typical shapes approximate circular forms, generating these solutions for a certain range of crack geometries could be of great interest for cases where initial shape may have great variability. Therefore, the work presents Mode I SIF solutions for “narrow” (high depth to surface length aspect ratio) elliptical-shaped cracks obtained through the Finite Element Method (FEM).

KEYWORDS: Stress Intensity Factors (SIFs), Finite Element Method (FEM), Linear Elastic Fracture Mechanics (LEFM).

1. INTRODUCTION

In engineering and materials science, accurately predicting the lifetime of components subjected to cyclic loading is essential for ensuring safety and reliability. Traditionally, the S-N curve approach, known as the Wöhler curve [1], has been widely used to assess fatigue life. This classic method involves plotting the stress amplitude against the number of cycles to failure, providing a straightforward way to estimate fatigue life based on empirical data. However, this approach has several limitations that can lead to inaccuracies in certain situations. S-N curves typically do not consider the presence and growth of cracks, which can be critical for predicting the actual failure of materials under cyclic loading.

In contrast, fracture mechanics provides a more detailed analysis of fatigue, emphasising the initiation and propagation of cracks. This method provides insights into crack growth behaviour, enabling engineers to predict failure more accurately and establish more effective maintenance schedules. Despite its complexity, the fracture mechanics approach offers a more comprehensive understanding of material fatigue, particularly in scenarios where crack propagation plays a crucial role.

For high-value studies, predicting potential failures or improper functioning is essential to enhance productivity and economic efficiency. One effective way to accomplish this is by analysing crack propagation through established crack propagation laws, such as Paris' law [2]. In this context, the stress intensity factors (SIFs) generated by the crack are necessary to carry out the calculations. To obtain them, two different approaches can be highlighted: the extended finite element method (XFEM) and the standard finite element method (FEM).

The XFEM-based linear elastic fracture mechanics (LEFM) approach implemented in Abaqus allows for continuous crack growth analysis from start to finish, eliminating the need for remeshing, which is required in standard FEM. Both the XFEM and standard FEM approaches provide similar accuracy for simple geometries; however, their accuracy decreases as the complexity of the geometry increases [3]. Considering the ease of meshing a crack in a round bar and the simplicity of the standard FEM approach compared to the XFEM approach, the latter has been chosen to generate SIF solutions in this work.

The motivation for this study lies behind the SUREWAVE project (surewave.eu), which aims to develop a floating concrete breakwater to protect an offshore floating photovoltaic (FPV) farm. Since buoyancy is required, a novel lightweight concrete has been developed. An earlier study related to this project examined the interface modelling between the high-

performance concrete and the lightweight concrete [4]. To ensure the overall safety of the structure and to analyse the mechanical behaviour of the reinforced concrete, crack propagation in the reinforcing rebars is calculated using a crack propagation algorithm based on the superposition principle.

This paper is structured as follows. First, an explanation and formulation of the superposition principle within the framework of linear elastic fracture mechanics is given. Next, the creation of the Abaqus finite element (FE) model is discussed. Following this, the procedures and parameters used to generate new SIF solutions are outlined. Finally, the obtained results are presented and discussed, concluding with some brief remarks.

2. LINEAR ELASTIC FRACTURE MECHANICS

For linear elastic materials, the individual components of stress, strain, and displacement can be superimposed. This same approach can be applied to stress intensity factors (SIFs) as long as the mode of loading remains consistent [5]. The stress intensity factor, which is related to the energy release rate, is a parameter that describes the stresses, strains and displacements in the vicinity of a crack tip [6]. In linear elastic materials, the condition at the crack tip is fully characterised by the stress intensity factor.

Linear elastic fracture mechanics (LEFM) provides a framework for analysing crack propagation by integrating remote stress fields in a solid with SIFs under local loading, as illustrated in Figure 1.

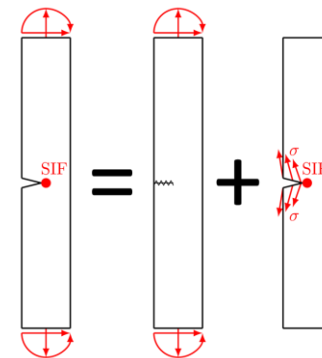


Figure 1: Superposition principle within the framework of linear elastic fracture mechanics.

Based on the SIFs for local elementary loading cases, SIF solutions for more complex loading situations can be obtained using superposition, subsequently applying a crack propagation law to determine the final failure.

For simple structures and crack geometries, the literature offers several solutions [7-9]. However, some solutions still need to be generated. FEM is commonly employed to obtain these solutions, typically based on the calculation of the J-integral, fitting to local displacement fields or the use of special global-local elements.

The J-integral is an alternative expression for the energy release rate, represented as a contour integral for an elastic medium (not necessarily linear). One of its significant properties is its invariance with respect to any integration contour surrounding the crack front. This characteristic allows the J-integral to be regarded as a parameter for crack propagation and enables its relationship with SIFs [5] in linear elasticity. In the case of plane strain, this relationship is given by:

$$J = \frac{1-\nu^2}{E} (K_I^2 + K_{II}^2), \quad (1)$$

where J is the J-integral, ν is Poisson's ratio, E is Young's modulus, and K_I and K_{II} are the stress intensity factors for mode I and II, respectively.

This work aims to generate pure mode I stress intensity factors, K_I . In this context, the contributions from modes II and III are excluded, which enables the calculation of K_I .

$$K_I = \sqrt{\frac{JE}{1-\nu^2}} \quad (2)$$

To relate stress intensity factors to crack geometry and stress state, the expression below can be used:

$$K_I = F\sigma\sqrt{\pi a}, \quad (3)$$

where F is the geometric correction factor, σ is the stress in the direction normal to the crack surface and a is the crack depth.

Solving the geometric correction factor from (3):

$$F = \frac{K_I}{\sigma\sqrt{\pi a}}. \quad (4)$$

The geometric correction factor relates crack geometry and loading conditions to the SIF; this study aims to derive an analytical expression for this parameter in the case of narrow surface cracks in round bars.

3. FINITE ELEMENT MODEL

The corrugates of the rebars have been omitted to analyse the crack propagation in reinforcement rebars, considering the model as a round bar. To validate the FE model, two different approaches have been considered: first, the invariance of the J-integral is examined; second, the SIF solutions are compared to existing solutions in the literature.

Due to the symmetry of the rebar and the geometry of the crack, only a quarter of the round bar is sufficient to be modelled. This characteristic can be considered in Abaqus, allowing the results of the J-integral to be adjusted to accurately reflect the actual system. As shown

in Figure 2, one of the symmetry planes aligns with the crack plane, the XY plane, while the other symmetry plane is oriented perpendicularly to the crack plane in the YZ plane.

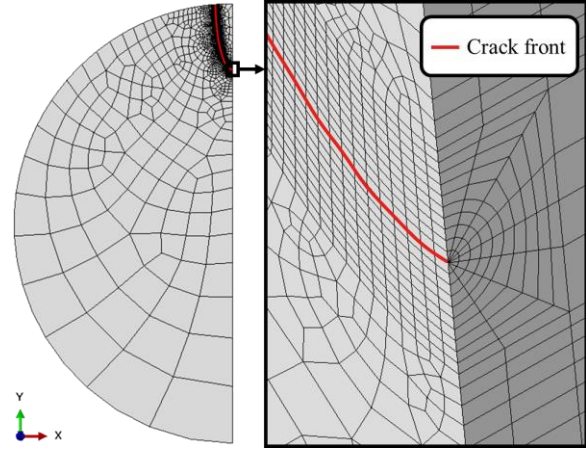


Figure 2: Spider web meshing of the crack front.

For the material used in the study, the round bar is assumed to consist of a homogeneous and isotropic material that exhibits linear elastic behaviour. This material is defined by its Young's modulus (E) and Poisson's ratio (ν).

To further refine the study, two loading cases have been considered: uniform tension and pure bending. Although the stress field of a round bar can be decomposed into a summation of seven elementary loading cases, as mentioned in [9], an accurate approximation for reinforcement rebars can be achieved through the superposition of the loading cases illustrated in Figure 3. Loads are applied at the free surface, specifically the crack surface, while boundary conditions are fixed at the remaining surfaces along the symmetry planes.

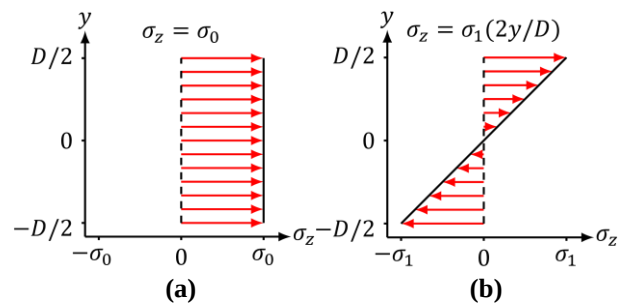


Figure 3: Tension (a) and bending (b) loading conditions. (Adapted from [9])

It is important to note that this model is not a standard FE model; it features special wedge elements along the crack front, as illustrated in Figure 2. Quadratic elements are used throughout the model, but the midpoints of the wedge elements along the crack front have been adjusted to a quarter distance from the crack tip. This adjustment (Figure 4) causes the shape functions to mimic the square-root singularity ($r^{-1/2}$) of the stress field near the crack tip.

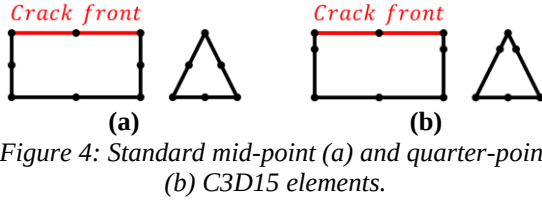


Figure 4: Standard mid-point (a) and quarter-point (b) C3D15 elements.

Once these modifications are carried out, the commercial software Abaqus calculates the J-integral along the crack front at the nodes of the elements for various contours in the spider web pattern. Most of the available SIF solutions for round bars compared in [7] use the virtual crack extension [10] and domain integral methods [11], and only a few of them use the stiffness derivative finite element technique [12] to generate SIF solutions with FEM. The first two methods are used in this work since Abaqus is based on them to calculate the J-integral.

The solutions generated by the FE model are compared to the ones presented by Shin and Cai [8] to validate the model, as their method appears to be the best 3-parameter (crack shape ratio, crack depth ratio and relative crack front position) option according to [7]. Furthermore, Aursand and Skallerud [9] have recently introduced a three-parameter solution that applies to a broad range of crack-shape ratios, so they have been considered as well. To ensure a consistent comparison, the analysis was limited to the ranges specified in Table 1.

Table 1: Parameters to define the FE model for the validation.

Parameter	Symbol	Range
Crack-shape ratio	a/b	[0, 1]
Relative crack depth	a/D	[0.05, 0.6]
Relative crack front position	γ	[0, 1]

Figure 5 illustrates the various measures influencing crack shape and depth, facilitating a better understanding of the parameters highlighted in Table 1.

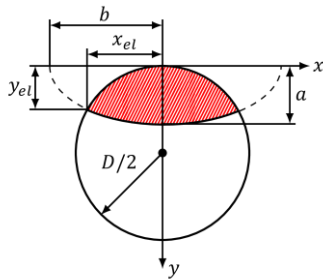


Figure 5: Parametric description of a round bar with an elliptical crack.

Regarding the relative position at the crack front, it is a normalised parameter that ranges between the two ends of the half crack front. A value of 1 refers to the point of the crack on the surface of the bar, while a value of 0 indicates the deepest point of the crack.

$$\gamma = x/x_{el} \quad (5)$$

Figure 6 illustrates the appearance of cracks for different crack-shape ratios for existing SIF solutions.

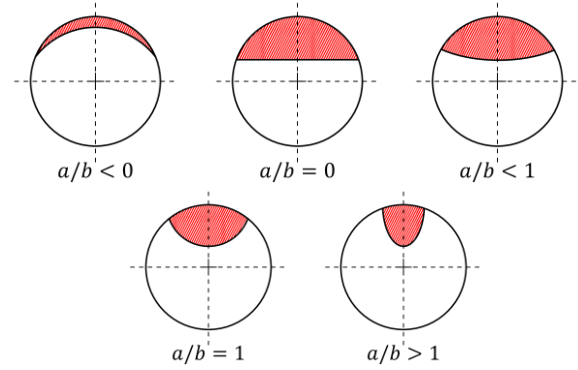


Figure 6: Available SIF solutions in the literature. Adapted from [7,9].

4. GENERATION OF NEW SIF SOLUTIONS

Until now, SIFs have been available for crack-shape ratios $a/b \leq 2$ [7-9]. However, "narrow" elliptical-shaped cracks, characterised by a high depth-to-surface length aspect ratio (Figure 7) have not yet been studied. To mitigate the significant economic and environmental risks associated with a potential catastrophic failure of the FPV panels farm, it has been decided to expand the variety of SIF solutions in round bars to address a wider range of scenarios.

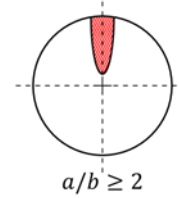


Figure 7: Crack geometry of new SIF solutions.

New crack-shape ratios have been considered, while the relative crack depth and position at the crack front remain similar to those in Table 1. The new ranges of these parameters are shown in Table 2.

Table 2: Parameters to define the FE model for the generation of new SIF solutions.

Parameter	Symbol	Range
Crack-shape ratio	a/b	[2, 5]
Relative crack depth	a/D	[0.06, 0.5]
Relative crack front position	γ	[0, 1]

However, the definition of the relative crack front position has changed (6). Due to the shape of the ellipse, using the X axis can result in significant changes to the geometric correction factor for small increments of γ . Therefore, the Y axis is used for situations where $a/b \geq 2$.

$$\gamma = \left(\frac{y - y_{el}}{a - y_{el}} \right) \quad (6)$$

To evaluate the validity of the results, it is essential to review certain concepts related to linear elastic fracture mechanics. As noted in Section 2, the J-integral is expected to be invariant when considered as a crack parameter. Consequently, the values for each node should be consistent along any contour. Eight different contours surrounding the spider web were analysed, and this consistency was generally observed at almost every point, except at the deepest point of the crack (due to boundary conditions) and the locations closest to the bar surface. As indicated by Benthem [13,14], this discrepancy may occur because the conventional definition of the SIF may not be applicable within a near-surface boundary layer due to the appearance of additional stress singularities.

5. RESULTS

As mentioned in Section 4, some specific positions are excluded from the evaluation of the SIFs, and only the remaining nodes are utilised for fitting. Specifically, the deepest 1% of nodes at the crack front and the 5% of nodes closest to the surface are disregarded. The decision to set the threshold at 5% is based on two reasons: first, it relates to the variance of the J-integral, as previously discussed; and second, a sudden drop in SIF values is observed as the upper bound is approached, even though the numerical computations of the contour integrals converge to a solution.

5.1. FE model validation

Once the property of invariance of the contour integrals is verified and the results are filtered, the model's accuracy is assessed. As shown in Figure 8, the SIFs generated by Shin and Cai [8] and Aursand and Skallerud [9] are quite similar to those obtained with the FE model presented in this work. The results have not been fitted to a polynomial equation because the existing solutions are already as accurate as the new results. Additionally, Aursand and Skallerud [9] took into account the curvature of the round bar, which makes their solution more comprehensive and flexible.

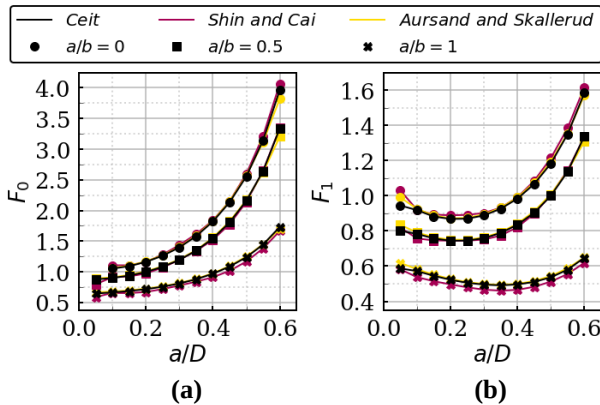


Figure 8: Comparison of Geometric Correction Factors (F) for tension (a) and bending (b) loading cases for $\gamma = 0$.

The results plotted in Figure 8 correspond to the deepest point of the crack for tension and pure bending loading cases, but the similarity remains consistent along the whole crack front.

5.2. Generation of new SIF solutions

After validating the finite element model, new stress intensity factor solutions were generated. Specifically, 598 simulations were run to simulate crack shape ratios between 2 and 5, and crack depth ratios between 0.06 and 0.5, see Figure 9. Analysing Figure 9 reveals some noteworthy trends. First and foremost, higher values of geometric correction factors are observed for surface points compared to the deepest point of the crack. This indicates that cracks are more likely to propagate near the surface rather than deepen, ultimately tending to form a circular crack after several cycles. This observation aligns well with the principles of fracture mechanics, providing additional validation of the results. Furthermore, it is evident that as the crack shape ratio increases, the geometric correction factor decreases in both tension and pure bending loading cases. Finally, as expected, it should be noted that uniform tension loading appears to be more damaging than pure bending loading.

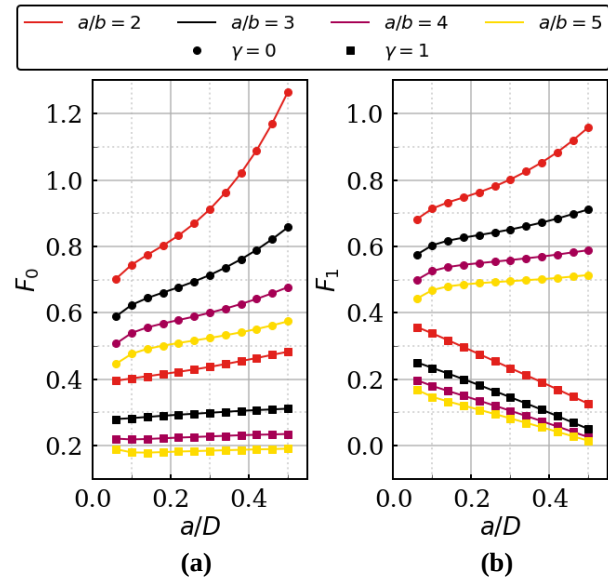


Figure 9: Generation of Geometric Correction Factors (F) for tension (a) and bending (b) loading cases for $a/b \geq 2$.

To account for the problem's variability across the wide range of the three parameters, these results have been fitted to a 9th-order polynomial equation (7).

$$F = \sum_{i=0}^9 \sum_{j=0}^{9-i} \sum_{k=0}^{9-i-j} C_{ijk} (a/b)^i (a/D)^j \gamma^k \quad (7)$$

The fitting has been applied to the crack front points specified above, resulting in the error shown in Figure 10. The coefficients needed for the summation of the fitted geometric correction factor have been uploaded to [15].

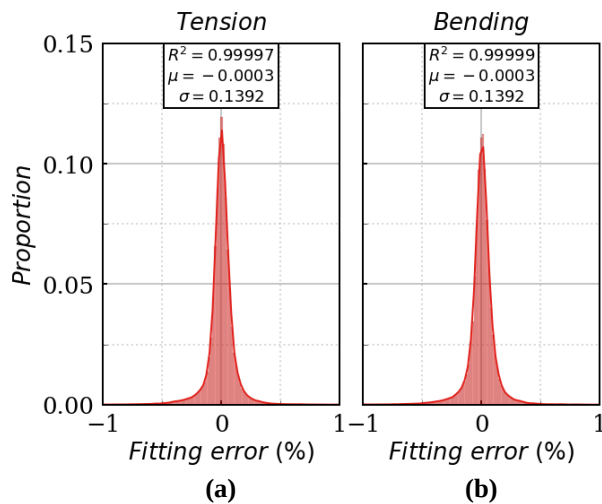


Figure 10: Fitting error for the tension (a) and bending (b) loading cases.

6. CONCLUSIONS

The generation of mode I stress intensity factor solutions for narrow elliptical-shaped cracks in round bars has been presented. The study compares existing solutions with those generated by the FE model as validation, generating afterwards new solutions for crack-shape ratios between 2 and 5, and crack depth ratios between 0.06 and 0.5.

The FE model has been demonstrated to be sufficiently accurate and capable of producing existing solutions with high precision. The validation of the J-integral's invariance, along with comparisons to existing SIF solutions and alignment with the principles of elastic linear fracture mechanics, allows for the confident use of this model to generate new SIF solutions.

It is noteworthy that geometric correction factors decrease with the crack shape ratio. For narrow, elliptical-shaped cracks, crack propagation appears to be slower based on this study's findings. Additionally, the observation that the minimum value occurs at the deepest point indicates that cracks tend to evolve into shapes closer to circular.

Concerning the polynomial fitting of the results, the accuracy of the fitting and the publication of the coefficients enable other users to reproduce the results generated in this work with ease and precision.

ACKNOWLEDGEMENTS

This study is part of the SUREWAVE project, funded by the European Union with 529 GA No. 101083342.

REFERENCES

[1] A. Wöhler. *Über die Festigkeitsversuche mit Eisen und Stahl*, Zeitschrift für Bauwesen, 20 (1870), 73–106.

[2] P. Paris, F. Erdogan. *A Critical Analysis of Crack Propagation Laws*, Journal of Basic Engineering, 85 (1963), 528–533.

[3] K. Rege, H.G. Lemu. *A review of fatigue crack propagation modelling techniques using FEM and XFEM*, IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 276 (2018), 012027.

[4] U. Eibar, A. Dorronsoro, J.M. Martínez-Esnaola. *Challenges in modelling concrete-to-concrete interfaces: a comparison of cohesive zone solutions*, Revista Española de Mecánica de la Fractura, 8 (2024), 87–92.

[5] T.L. Anderson. *Fracture Mechanics: Fundamentals and Applications* (4th edition), CRC Press, (2017).

[6] G.R. Irwin. *Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate*, Journal of Applied Mechanics, 24 (1957), 361–364.

[7] J. Toribio, N. Álvarez, B. González, J.C. Matos. *A critical review of stress intensity factor solutions for surface cracks in round bars subjected to tension loading*, Engineering Failure Analysis, 16 (2009), 794–809.

[8] C.S. Shin, C.Q. Cai. *Experimental and finite element analyses on stress intensity factors of an elliptical surface crack in a circular shaft under tension and bending*, International Journal of Fracture, 129 (2004), 239–264.

[9] M. Aursand, B.H. Skallerud. *Mode I stress intensity factors for semi-elliptical fatigue cracks in curved round bars*, Theoretical and Applied Fracture Mechanics, 112 (2021), 102904.

[10] D.M. Parks. *The Virtual Crack Extension Method for Nonlinear Material Behavior*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 12 (1977), 353–364.

[11] C.F. Shih, B. Moran, T. Nakamura. *Energy release rate along a three-dimensional crack front in a thermally stressed body*, International Journal of Fracture, 30 (1986), 79–102.

[12] D.M. Parks. *A stiffness derivative finite element technique for determination of crack tip stress intensity factors*, International Journal of Fracture, 10 (1974), 487–502.

[13] J.P. Benthem. *State of stress at the vertex of a quarter-infinite crack in a half-space*, International Journal of Solids and Structures, 13 (1977), 479–492.

[14] J.P. Benthem. *The quarter-infinite crack in a half space; Alternative and additional solutions*, International Journal of Solids and Structures, 16 (1980), 119–130.

[15] U. Eibar, Data for: *Generation of mode I stress intensity factor solutions for narrow elliptical-shaped cracks in round bars: a finite element approach*, Mendeley Data, V1 (2025), <https://dx.doi.org/10.17632/sdxwvmrk3t.1>

MEANFIELD-TRANSITION-STATE MODEL FOR HYDROGEN DIFFUSION IN MAGNESIUM

M. Molinos^{1*}, M. Ortiz², M.P. Ariza¹

¹Escuela Técnica Superior de Ingeniería, Universidad de Sevilla, Sevilla 41092, Spain

²Division of Engineering and Applied Science, California Institute of Technology, Pasadena, CA, 91125, USA

* Persona de contacto: mmolinos@us.es

RESUMEN

Las aleaciones de magnesio (Mg) tienen una serie de propiedades que las hacen deseables para su uso en aplicaciones mecánicas o como material de almacenamiento de hidrógeno debido al coste favorable y a las altas densidades gravimétrica y volumétrica del hidrógeno. Sin embargo, la susceptibilidad de dichas aleaciones a los fenómenos de fragilización por hidrógeno da lugar a baja ductilidad y tenacidad a temperatura ambiente, pudiendo limitar sus potenciales aplicaciones.

Con el fin de obtener capacidades predictivas que permitan una comprensión completa de estos fenómenos, es esencial establecer un modelo de difusión de hidrógeno en Mg con resolución a escala atómica. Dentro de este marco, se propone una aproximación teórica y numérica para capturar el comportamiento a largo plazo del sistema bajo diferentes condiciones de presión-temperatura.

El modelo propuesto permite resolver sistemas macrocanónicos fuera de equilibrio aplicando el formalismo de máxima entropía. A su vez, resuelve el comportamiento meso-dinámico del sistema a través de la ecuación de Fokker-Planck calibrada mediante energías de barrera obtenidas a través de teoría del estado de transición. El modelo resultante recibe el nombre de Dinámica Molecular Difusiva (DMD) el cual es validado, verificado y posteriormente empleado para analizar la difusión de hidrógeno en nano-materiales.

PALABRAS CLAVE: Difusión de Hidrógeno, Almacenamiento de Hidrógeno, Magnesio, Modelos atomísticos, Diffusive Molecular Dynamics.

ABSTRACT

Magnesium (Mg) alloys possess a range of properties that make them desirable for mechanical applications or as hydrogen storage materials, thanks to their favorable cost and the high gravimetric and volumetric densities of hydrogen. However, their susceptibility to hydrogen embrittlement phenomena results in low ductility and toughness at room temperature, potentially limiting their practical applications.

In order to obtain predictive capabilities to gain a complete understanding of these phenomena, it is essential to establish a model of hydrogen diffusion in Mg with atomic scale resolution. Within this framework, a theoretical and numerical approach is proposed to capture the long-term behaviour of the system under different pressure-temperature conditions.

The proposed model addresses non-equilibrium macrocanonical systems using the maximum entropy formalism. Additionally, it captures the meso-dynamic behavior of the system through the Fokker-Planck equation, calibrated using barrier energies obtained via transition state theory. This resulting model, called Diffusive Molecular Dynamics (DMD), is validated, verified, and subsequently employed to analyze hydrogen diffusion in nanomaterials.

KEYWORDS: Hydrogen diffusion, Hydrogen storage, Magnesium, Atomistic models, Diffusive Molecular Dynamics.

1. INTRODUCCIÓN

Comprender la transformación de fase en disoluciones metal-gas es un proceso clave en aplicaciones de conversión y almacenamiento de energía. Concretamente, las aleaciones de magnesio (Mg) ofrecen propiedades deseables, como baja densidad, facilidad de mecanizado y alta resistencia específica. Estas

características las hacen ventajosas para su uso como contenedores de almacenamiento de hidrógeno. Sin embargo, su susceptibilidad al fenómeno de fragilización por hidrógeno (HE) conlleva una baja ductilidad y una reducida tenacidad a la fractura a temperatura ambiente, lo que puede limitar sus potenciales aplicaciones. Por otro lado, los datos experimentales de este proceso son escasos y con cierta dispersión. Con lo que el análisis

numérico de este fenómeno es un recurso atractivo para mejorar nuestra comprensión del fenómeno.

Una posibilidad es analizar el fenómeno usando las herramientas desarrolladas desde el enfoque de la mecánica de medios continuos [1,2,3]. Estas aproximaciones permiten simular la difusión de hidrógeno en metales y su posterior fragilización a una escala mesoscópica. Sin embargo, están limitados al uso de fórmulas empíricas que han de ser calibradas mediante datos experimentales. Por otro lado, son incapaces de capturar de forma precisa los cambios de fase del material a medida que evoluciona el sistema con la entrada o salida de hidrógeno.

Esto último es de especial relevancia ya que investigaciones experimentales [4,5,6,7] sugieren que la difusividad del hidrógeno varía en función de la temperatura ambiente y la estequiometría de la mezcla (cercana al Mg o al MgH₂). Es decir, en las distintas etapas del proceso de (des)hidrogenación del magnesio.

A diferencia del enfoque continuo, los modelos basados en *Molecular Dynamics* (MD) son capaces de analizar el cambio de fase a escala atómica, al igual que no requieren de calibración experimental. Sin embargo, se encuentran limitados a tener que integrar las ecuaciones de gobierno con pasos de tiempo del orden de los picosegundos, varios órdenes de magnitud por debajo del proceso de difusión del hidrógeno, lo que hace que este método no permita ser predictivo en el rango de tiempo que demandan las aplicaciones reales [8,9].

Con la motivación de alcanzar tiempos de escala difusiva en simulaciones con resolución atómica surge el marco computacional denominado *Diffusive Molecular Dynamics* (DMD) [9,10,11,12]. La idea fundamental en la que se basa DMD es la suposición de que la escala temporal en la que ocurre la difusión es mucho mayor que la de las transiciones de estado microscópicas, es decir, las vibraciones térmicas de los átomos. A su vez, admitiendo que dichas vibraciones térmicas son de naturaleza browniana [13]. Permite que en una escala de tiempo intermedia, las variables de estado microscópicas puedan considerarse como variables aleatorias y por lo tanto, poder introducir el formalismo de la mecánica estadística para obtener un sistema de ecuaciones de equilibrio. Por otro lado, para poder considerar la cinética del sistema en la escala macroscópica se introduce una ecuación de difusión discreta, *Master Equation*, [14], obtenida a través de la ecuación de Fokker-Planck y calibrada con energías de barrera obtenidas a través de teoría de estado crítico [13].

En comparación con los modelos de MD establecidos [8], DMD ofrece una ventana de simulación temporal más amplia, ya que no resuelve explícitamente las vibraciones térmicas ni las transiciones microscópicas individuales. DMD se ha aplicado previamente a la nano-indentación y la sinterización [15], la evolución de dislocaciones [16], el crecimiento de nano-huecos [17],

las interacciones soluto-defecto [18], la litografía del silicio [14], e hidruros metálicos [10,19].

2. RELACIONES DE EQUILIBRIO DEL SISTEMA MgH₂

Consideremos una estructura cristalina hexagonal compacta (hcp) en la cual se distinguen sitios de la red y sitios intersticiales. Los sitios de la red se encuentran ocupados por átomos de Mg (I_{Mg}), mientras que los sitios intersticiales pueden estar ocupados o no por átomos de H (I_H). En cada sitio $i \in I_H$, definimos una función de ocupación n_i tal que

$$n_i = \begin{cases} 1 & \text{si el sitio } i \text{ está ocupado por H.} \\ 0 & \text{si el sitio } i \text{ no está ocupado.} \end{cases} \quad (1)$$

Los micro-estados del sistema quedan definidos por el vector de ocupaciones $\{n\} = (n_i)_{i \in I_H}$ y el vector del espacio de fase $\{z\} \equiv (q_i, p_i)_{i \in I_{Mg} \cup I_H}$, donde q_i y p_i son respectivamente las posiciones y momentos instantáneos.

Basándonos en la suposición de la separación de escalas y suponiendo un sistema ergódico, las variables de estados descritas tienen una distribución de probabilidad conjunta caracterizada por la función de densidad $\rho(z, n)$. La cual puede ser determinada recurriendo al principio de máxima entropía de Jayne [20,21]. Es decir, ρ queda determinada por ser la función de probabilidad que maximiza la entropía de la información

$$\max_{\{z\}, \{n\}} S[\rho] = -k_B \langle \log \rho \rangle. \quad (2)$$

A la que se le incorporan las dos siguientes restricciones macroscópicas enunciadas de forma local

$$\langle h_i - \mu_i n_i \rangle = e_i \quad \text{y} \quad \langle n_i \rangle = \chi_i. \quad (3)$$

Donde k_B es la constante de Boltzmann, h_i y μ_i son respectivamente el Hamiltoniano y el potencial químico locales del sitio i . Por otro lado, e_i y χ_i son la energía y la fracción molar esperadas o macroscópicas. Por otro lado, $\langle \cdot \rangle$ es un operador que realiza el promedio en el espacio de fase $\{z\}$ para una variable cualquiera.

Mediante el uso del método de los multiplicadores de Lagrange, se introducen las restricciones (3) dentro del problema de optimización enunciado en la ecuación (2), lo cual nos permite obtener la siguiente función de probabilidad de densidad

$$\rho = \frac{1}{\Xi} e^{-\{\beta\}^T \{h\} + \{\gamma\}^T \{n\}}. \quad (4)$$

Donde Ξ es la función partición del sistema, la cual garantiza la propiedad $\langle 1 \rangle = 1$. Por otro lado, $\{\beta\}$ y $\{\gamma\}$ son sendos multiplicadores de Lagrange que permiten imponer las restricciones macroscópicas. La ecuación (4) puede ser interpretada como la función de densidad de probabilidad de un sistema o colectividad *macro-*

canónica donde, $T_i = \frac{1}{k_B \beta_i}$ y $\mu_i = k_B T_i \gamma_i$ pueden ser descritos como la temperaturas y potencial químico absolutos del sitio i . En los desarrollos posteriores, se considera una temperatura ambiente T uniforme. A continuación, definimos la *entropía libre macrocanónica* Φ , la cual se obtiene de sustituir la función de densidad de probabilidad (4) en (2) y aplicar la transformación de Legendre para llegar a

$$\Phi(\{\beta\}, \{\gamma\}) = \max_{\rho} \mathcal{L}[\rho, \{\beta\}, \{\gamma\}] = k_B \log \Xi(\{\beta\}, \{\gamma\}). \quad (5)$$

Por otro lado, el Hamiltoniano local h_i es típicamente no-lineal, lo que implica que la obtención de las variables termodinámicas del sistema (e.g., e_i y Ξ) es generalmente una tarea inabordable de forma analítica. Esta limitación puede ser sorteada formulando (5) de forma variacional siguiendo [11]. Apelando a la arbitrariedad de las funciones de prueba usadas en el cálculo variacional, se define un hamiltoniano de prueba h_0 ,

$$\bar{h}_i(q_i, p_i) = \frac{\kappa_i}{2} |q_i - \bar{q}_i|^2 + \frac{1}{2m_i} |p_i - \bar{p}_i|^2. \quad (6)$$

El cual sigue la estructura de un oscilador armónico centrado en la posición media $\bar{q}_i$ y con una constante de muelle $\kappa_i = k_B T / \bar{\sigma}_i^2$ obtenida a partir de un análisis asintótico [13]. Por otro lado, $\bar{p}_i$ representa el valor medio de la cantidad de movimiento en el sitio i .

La simplicidad de este hamiltoniano de prueba o variacional, nos permite obtener sendas expresiones analíticas para las funciones de densidad de probabilidad y de partición ρ_0 y Ξ_0 . Finalmente, aplicando la expresión variacional de (5) es

$$\min_{\{q\}, \{\bar{\sigma}\}, \{p\}} \mathcal{L}_0[\{h_0\}, \{\gamma\}] = k_B \log \Xi_0 + \frac{1}{T} \langle V^{ADP} \rangle_0 + \frac{1}{2} N k_B - k_B \sum_{i \in I_H} \gamma_i \frac{e^{\bar{\gamma}_i}}{1 + e^{\bar{\gamma}_i}}. \quad (7)$$

Donde $V^{ADP}(\{q\}, \{n\})$ hace referencia a un potencial interatómico de tipo *Angular Dependent Potential* (ADP), el cual resulta conveniente para describir de forma precisa las interacciones angulares existentes en sistemas intersticiales hcp como es el caso de Mg-H_x, [10,22].

Lecuaciones de Euler-Lagrange que permiten minimizar el lagrangiano $\mathcal{L}_0$ son

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial q_i} = \frac{\partial \langle V \rangle_0}{\partial q_i} = 0, \\ \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial p_i} = 0 \rightarrow \bar{p}_i = 0, \\ \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \bar{\sigma}_i} = -\frac{3}{\bar{\sigma}_i} + \frac{1}{T} \frac{\partial \langle V \rangle_0}{\partial \bar{\sigma}_i} = 0, \\ \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \bar{\gamma}_i} = k_B \frac{e^{\bar{\gamma}_i}}{(1 + e^{\bar{\gamma}_i})^2} \left(\beta \frac{\partial \langle V \rangle_0}{\partial \chi_i} - \gamma_i + \bar{\gamma}_i \right) = 0. \end{cases} \quad (8)$$

Las ecuaciones resultantes son las llamadas ecuaciones de equilibrio quasi-estático *meanfield* que nos permiten obtener los valores promedio o macroscópicos del sistema $\{\bar{q}, \bar{\sigma}, \bar{p}, \bar{\gamma}\}$.

Obsérvese que a través del formalismo de la mecánica estadística y las integrales de fase, hemos podido integrar la coordenada temporal asociada a las oscilaciones térmicas, por lo que no aparece de forma explícita en las ecuaciones resultantes.

3. MESODINÁMICA

La formulación descrita en el apartado anterior resuelve un sistema en equilibrio. Para permitir la evolución temporal del sistema, en el siguiente apartado añadiremos una ecuación de gobierno para describir el comportamiento difusivo en una escala mesoscópica siguiendo la misma metodología adoptada en [11].

Para ello empezamos por describir la evolución en el tiempo de una masa situada en un sitio i través de la siguiente ecuación de balance genérica

$$\dot{\chi}_i - \sum_{\langle i,j \rangle} F_{ij} = 0, \forall i \in I_H \quad (9)$$

donde se parte de imponer la conservación de la masa de forma local, para ello se tiene que respetar también que $F_{ij} = F_{ji}$ para cumplir la conservación del flujo. A partir del formalismo Fokker-Planck [23] es posible derivar la siguiente expresión explícita para F_{ij}

$$F_{ij} = \chi_j (1 - \chi_i) f_{ji} - \chi_i (1 - \chi_j) f_{ij}, \quad (10)$$

donde f_{ij} viene dado como una relación tipo Arrhenius

$$f_{ij} = \nu_i e^{-\beta E_{b,i \rightarrow j}} \quad (11)$$

en la cual ν_i la frecuencia de salto y $E_{b,i \rightarrow j}$ la energía de barrera para mover una masa de hidrógeno de un sitio i a un sitio j . Introduciendo la expresión (13) para el flujo F_{ij} en la ecuación (9) se obtiene la siguiente ecuación discreta de transporte de masa

$$\dot{\chi}_i = \sum_{\langle i,j \rangle} f_{ji} - f_{ij} \quad (12)$$

El valor de $E_{b,i \rightarrow j}$ puede ser incorporado tomando valores de mediciones experimentales [9], [19] o ser calculado de forma explícita durante las simulaciones. Un enfoque habitual en las simulaciones atomísticas es el método del *Nudged Elastic Band* (NEB), el cual permite obtener la trayectoria de mínima entre posiciones de equilibrio, identificando el estado de transición [24]. Alternativamente, la teoría del estado de transición (*transition state theory*, TST) se emplea para estimar tasas de difusión a partir de la energía de activación [25]. Ambos métodos, aunque precisos, conllevan una gran carga computacional.

Alternativamente, es posible usar TST sustituyendo el potencial real mediante un potencial bi-parabólico calibrado mediante los valores *meanfield* obtenidos de las ecuaciones de equilibrio, por lo que se llega a un modelo

simplificado que consiste en buscar el valor máximo en un polinomio de 5º orden

$$E(\xi) = c_0 + c_1\xi + c_2\xi^2 + c_3\xi^3 + c_4\xi^4 + c_5\xi^5, \quad (13)$$

$\xi \in [0,1]$ es una coordenada generalizada que representa el camino realizado por un átomo de hidrógeno de un sitio i ($\xi = 0$) a un sitio j ($\xi = 1$). Por otro lado, los coeficientes de ajuste del polinomio se obtienen de imponer las condiciones de consistencia de cero, primer y segundo orden en los sitios i y j . La principal ventaja de este método es que permite evaluar energías de barrera de forma precisa a un coste computacional muy inferior al de las otras alternativas ya que se calibra usando valores *meanfield* determinados anteriormente.

4. VALIDACIÓN Y VERIFICACIÓN DEL MODELO

En este apartado presentamos tres ejemplos de validación y verificación del potencial ADP termalizado o *meanfield* (TADP). Todos los modelos de este apartado se han realizado bajo condiciones de contorno periódicas y adoptando la siguiente entropía libre sujeta a las restricciones nPT,

$$\arg \max_{F, \sigma} \{T \mathcal{L}_0[T, \{h_0\}, \{\gamma\}] - V_0 p J\}, \quad (14)$$

donde V_0 es el volumen de la celda de cálculo periódica en su configuración de referencia, p es la presión macroscópica y $J = \det F$, es el jacobiano del gradiente de deformaciones F . El correspondiente sistema de ecuaciones de Euler-Lagrange se resuelve empleando el algoritmo “critical point line search” implementado en la librería PETSc/TAO usando (p,J,T) como parámetros de control. Por otro lado, para la evaluación numérica de la integral *meanfield* del potencial ADP se han considerado dos estrategias de cálculo diferentes, por un lado integración por cuadratura de Gauss-Hermite de tercer orden y por otro lado, cuadratura de Multipolos, ver Molinos et al. [10] para un análisis más detallado de ambas aproximaciones.

4.1. Curvas de expansión térmica

Para este apartado se ha seleccionado el cálculo de las curvas de expansión térmica para el Mg (hcp) y el MgH₂ (rutilo), siendo esta una propiedad de equilibrio anarmónica. La figura 1 compara la dependencia calculada del coeficiente de expansión térmica del HCP Mg a presión cero con la temperatura. Las predicciones de TADP se verifican frente a los cálculos MD reportados por Smirnova et al. [22] y se validan frente a los datos experimentales de Austin [26]. Como puede verse en la figura 1, los resultados de TADP concuerdan estrechamente con MD en todo el rango de temperatura considerado. Además, ambos concuerdan con los datos experimentales hasta aproximadamente 400K, pero a

partir de ahí se desvían cada vez más. Esta discrepancia sugiere limitaciones de precisión de los potenciales ADP de Smirnova et al. [22] a altas temperaturas.

La figura 2 muestra una comparación similar de la dependencia de temperatura computada del coeficiente de expansión térmica del rutilo MgH₂ a presión cero con los cálculos MD y *ab initio* de Junkaew et al. [27], Moser et al. [28]; Kelkar et al. [29]. Como puede verse en la figura, el TADP coincide estrechamente con MD en todo el rango de temperaturas, y con los datos *ab initio* por encima de ~300K, pero, como era de esperar, se desvía del cálculo *ab initio* a baja temperatura, donde los efectos cuánticos no son despreciables.

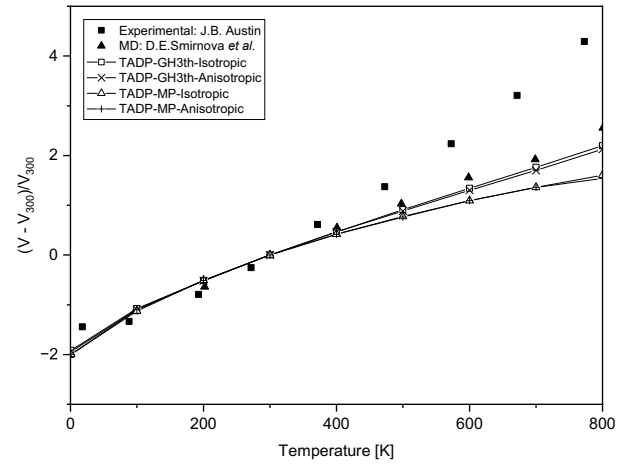


Figura 1. HCP Mg. Dependencia del coeficiente de expansión térmica con la temperatura a presión cero utilizando cuadratura con multipolos (MP) y cuadratura Gauss-Hermite de tercer orden (GH3th). A modo de comparación, se muestran cálculos de dinámica molecular de Smirnova et al. [22] y datos experimentales de Austin [26].

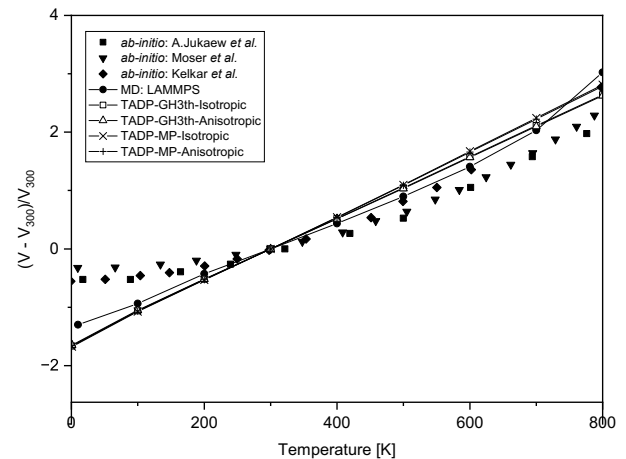


Figura 2. Rutilo MgH₂. Dependencia del coeficiente de expansión en función de la temperatura a presión cero mediante cuadratura por multipolos (MP) y cuadratura de Gauss-Hermite de tercer orden (GH3th). A modo de comparación, se muestran cálculos de dinámica molecular de Smirnova et al. [22] y cálculos *ab initio* (Junkaew et al. [27]; Kelkar et al. [29]; Moser et al. [28]).

5. CONCLUSIONES

Hemos aplicado la teoría del estado de transición [13] para la derivación de una *Master Equation* a nivel atómico para el transporte de masa a partir de potenciales interatómicos empíricos dentro del marco de DMD [10,11]. Por otro lado, se ha validado y verificado el potencial termalizado TADP para el caso de magnesio puro (hcp) y su hidruro más común MgH_2 (rutilo). Se ha empleado para ello la obtención de curvas de expansión térmica, donde se aprecia la habilidad del modelo para capturar correctamente dicha evolución. El sistema Mg-H es especialmente difícil debido a que las transiciones de fase HCP-rutilo que se producen durante la hidratación, que dan lugar a complejas estructuras relacionadas con el transporte de hidrógeno y que comprometen la capacidad de almacenamiento y la integridad estructural del sistema. Una caracterización completa de los sistemas de hidruros requiere, por tanto, la simulación predictiva de fenómenos mecánicos y difusivos fuertemente acoplados que abarcan escalas de tiempo atómicas y macroscópicas, un reto computacional mucho más allá de la MD pero accesible a la DMD. Estas y otras extensiones del presente trabajo se sugieren como áreas de investigación futuras.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero del Ministerio de Ciencia e Innovación (ref:PID2021-124869NB-I00). M. Molinos agradece el apoyo del Ministerio de Ciencia e Innovación de España por su beca postdoctoral (ref:FJC2021-046501-I), así como a la Universidad de Sevilla por el apoyo económico para su estancia de investigación en el Instituto Tecnológico de California a través de una ayuda de Plan Propio (ref: SOL2024-29786). M. Ortiz agradece el apoyo de la *Deutsche Forschungsgemeinschaft* (DFG, Fundación Alemana para la Investigación) a través del proyecto 211504053 - SFB 1060; el proyecto 441211072 - SPP 2256; y el proyecto 390685813 - GZ 2047/1 - HCM.

REFERENCIAS

- [1] S. Jothi, N. Winzer, T. N. Croft, y S. G. R. Brown, «Meso-microstructural computational simulation of the hydrogen permeation test to calculate intergranular, grain boundary and effective diffusivities», *J Alloys Compd*, vol. 645, n.o S1, pp. S247-S251. 2015.
- [2] A. Díaz, A. Zafra, E. Martínez-Pañeda, J. M. Alegre, J. Belzunce, y I. I. Cuesta, «Simulation of hydrogen permeation through pure iron for trapping and surface phenomena characterisation», *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, vol. 110. 2020.
- [3] T. Das, E. Legrand, S. v. Brahimi, J. Song, y S. Yue, «Evaluation of material susceptibility to hydrogen embrittlement (HE): An approach based on experimental and finite element (FE) analyses», *Eng Fract Mech*, vol. 224, 2020.
- [4] J. F. Fernández y C. R. Sánchez, «Rate determining step in the absorption and desorption of hydrogen by magnesium», *J Alloys Compd*, vol. 340, n.o 1-2, pp. 189-198, 2002.
- [5] X. Yao, Z. H. Zhu, H. M. Cheng, y G. Q. Lu, «Hydrogen diffusion and effect of grain size on hydrogenation kinetics in magnesium hydrides», *J Mater Res*, vol. 23, n.o 2, pp. 336-340, 2008.
- [6] J. Čermák y L. Král, «Hydrogen diffusion in Mg-H and Mg-Ni-H alloys», *Acta Mater*, vol. 56, n.o 12, pp. 2677-2686, 2008.
- [7] C. Nishimura, M. Komaki, y M. Amano, «Hydrogen permeation through magnesium», *J Alloys Compd*, vol. 293-295, pp. 329-333. 1999.
- [8] C. D. Spataru et al., «Statistically averaged molecular dynamics simulations of hydrogen diffusion in magnesium and magnesium hydrides», *Phys Rev Mater*, vol. 4, n.o 10, p. 105401, 2020.
- [9] X. Sun, P. Ariza, M. Ortiz, y K. G. Wang, «Long-term atomistic simulation of hydrogen absorption in palladium nanocubes using a diffusive molecular dynamics method», *Int J Hydrogen Energy*, vol. 43, n.o 11, pp. 5657-5667, 2018.
- [10] M. Molinos, M. Ortiz, y M. P. Ariza, «Thermalized and mixed meanfield ADP potentials for magnesium hydrides», *Mechanics of Materials*, vol. 199, p. 105175, 2024.
- [11] G. Venturini, K. Wang, I. Romero, M. P. Ariza, y M. Ortiz, «Atomistic long-term simulation of heat and mass transport», *J Mech Phys Solids*, vol. 73, pp. 242-268, 2014.
- [12] X. Sun, M. P. Ariza, M. Ortiz, y K. G. Wang, «Acceleration of diffusive molecular dynamics simulations through mean field approximation and subcycling time integration», *J Comput Phys*, vol. 350, pp. 470-492, 2017.
- [13] J.H.Weiner, «Statistical Mechanics of Elasticity».

- [14] J. P. Mendez, M. Ponga, y M. Ortiz, «Diffusive molecular dynamics simulations of lithiation of silicon nanopillars», *J Mech Phys Solids*, vol. 115, pp. 123-141, 2018.
- [15] J. Li, S. Sarkar, W. T. Cox, T. J. Lenosky, E. Bitzek, y Y. Wang, «Diffusive molecular dynamics and its application to nanoindentation and sintering», *Phys Rev B Condens Matter Mater Phys*, vol. 84, n.o 5, p. 054103. 2011.
- [16] S. Sarkar, J. Li, W. T. Cox, E. Bitzek, T. J. Lenosky, y Y. Wang, «Finding activation pathway of coupled displacive-diffusional defect processes in atomistics: Dislocation climb in fcc copper», *Phys Rev B*, vol. 86, n.o 1, p. 141115, 2012.
- [17] M. P. Ariza, I. Romero, M. Ponga, y M. Ortiz, «HotQC simulation of nanovoid growth under tension in copper», *Int J Fract*, vol. 174, n.o 1, pp. 75-85, 2012.
- [18] E. Dontsova, J. Rottler, y C. W. Sinclair, «Solute-defect interactions in Al-Mg alloys from diffusive variational Gaussian calculations», *Phys Rev B*, vol. 90, n.o 17, p. 174102, nov. 2014.
- [19] X. Sun, M. P. Ariza, M. Ortiz, y K. G. Wang, «Atomistic modeling and analysis of hydride phase transformation in palladium nanoparticles», *J Mech Phys Solids*, vol. 125, pp. 360-383, 2019.
- [20] E. T. Jaynes, «Information Theory and Statistical Mechanics. I», *Physical Review*, vol. 106, n.o 4, p. 620, 1957.
- [21] E. T. Jaynes, «Information Theory and Statistical Mechanics. II», *Physical Review*, vol. 108, n.o 2, p. 171, 1957.
- [22] D. E. Smirnova, S. V. Starikov, y A. M. Vlasova, «New interatomic potential for simulation of pure magnesium and magnesium hydrides», *Comput Mater Sci*, vol. 154, pp. 295-302, 2018.
- [23] S. Chandrasekhar, «Stochastic Problems in Physics and Astronomy», *Rev Mod Phys*, vol. 15, n.o 1, p. 1, 1943.
- [24] G. Henkelman, B. P. Uberuaga, y H. Jónsson, «A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths», *J Chem Phys*, vol. 113, n.o 22, pp. 9901-9904. 2000.
- [25] G. H. Vinbyard, «Frequency factors and isotope effects in solid state rare processes», *SoE& Pergamon Press*, 1957.
- [26] J. B. Austin, «A Vacuum Apparatus for Measuring Thermal Expansion at Elevated Temperatures, with Measurements on Platinum, Gold, Magnesium and Zinc», *J Appl Phys*, vol. 3, n.o 5, pp. 240-267, 1932.
- [27] A. Junkaew, B. Ham, X. Zhang, y R. Arróyave, «Ab-initio calculations of the elastic and finite-temperature thermodynamic properties of niobium- and magnesium hydrides», *Int J Hydrogen Energy*, vol. 39, n.o 28, pp. 15530-15539, 2014.
- [28] D. Moser et al., «The pressure-temperature phase diagram of MgH₂ and isotopic substitution», *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 23, n.o 30, 2011.
- [29] T. Kelkar, D. G. Kanhere, y S. Pal, «First principles calculations of thermal equations of state and thermodynamical properties of MgH₂ at finite temperatures», *Comput Mater Sci*, vol. 42, n.o 3, pp. 510-516, 2008.

MEANFIELD INTERATOMIC POTENTIAL TO STUDY THE SEGREGATION OF COPPER IN ALUMINUM USING A MULTIPHASE ANGULAR-DEPENDENT POTENTIAL

J. M. Recio-Lopez¹, M. Molinos¹, M. P. Ariza^{1*}

¹Escuela Técnica Superior de Ingeniería de la Universidad de Sevilla - Departamento de Mecánica de Medios Continuos y Teoría de Estructuras, Camino de los Descubrimientos s/n, Sevilla 41092, Spain.

*Persona de contacto: mpariza@us.es

RESUMEN

En pleno siglo XXI, las aleaciones de aluminio (Al) y cobre (Cu) siguen siendo ampliamente utilizadas debido a su elevada resistencia específica, derivada de la baja densidad del aluminio y del aumento de resistencia aportado por el cobre. Sin embargo, estas aleaciones presentan baja resistencia a la corrosión a causa de la segregación de cobre en la matriz de aluminio. Para la descripción de este fenómeno se requiere de modelos atomísticos avanzados capaces de predecir la interacción entre átomos de ambas especies y así obtener información de la evolución del sistema ante la presencia de diferentes defectos puntuales, lineales o superficiales y bajo condiciones termo-químico-mecánicas realistas.

Este trabajo establece el fundamento de un modelo atomístico multiescala para estudiar la segregación de cobre en aleaciones basadas en aluminio, teniendo en cuenta una aproximación de campo medio para el potencial del sistema (potencial termalizado), en el que las interacciones atómicas se han modelado considerando un potencial dependiente de ángulo (PDA), potencial que describe con mayor fidelidad la interacción entre dos átomos diferentes al considerar los efectos introducidos por dipolos y cuadrupolos. Los resultados han sido comparados con datos experimentales o con simulaciones de dinámica molecular (DM) para verificar y validar este potencial.

PALABRAS CLAVE: modelado atomístico, aleación de aluminio y cobre, potencial interatómico dependiente de ángulo.

ABSTRACT

In the current 21st century, aluminum (Al) and copper (Cu) alloys are still widely used due to their high specific strength, derived from the low density of aluminum and the increase of strength provided by copper. However, these alloys exhibit low corrosion resistance because of the segregation of copper in the aluminum matrix. Advanced atomistic models are required for the description of this phenomenon. These models must be capable of predicting the interaction between atoms of both species and thus providing information about the evolution of the system in the presence of different point, linear or surface defects and under realistic thermo-chemo-mechanical conditions.

This work establishes the foundation of a multiscale atomistic model to study the segregation of copper in aluminum-based alloys, taking into account a meanfield approximation for the system potential (thermalized potential), in which the atomic interactions have been modeled considering an angular-dependent potential (ADP), which describes more faithfully the interaction between two different atoms when considering the effects introduced by dipoles and quadrupoles. The results have been compared with either experimental data or molecular dynamics (MD) simulations to verify and validate this potential.

KEYWORDS: atomistic modeling, aluminum and copper alloy, interatomic angular-dependent potential.

1 INTRODUCTION

The most common applications of wrought Al-Cu alloys [1] are in the aerospace, automotive and space industries, to manufacture screw machine products, appliance parts and trim, ordnance, automotive, electronic, fasteners, hardware, machine parts; aircraft and truck frames, aircraft structures, cylinders and pistons, machine parts or rocket structures. The applications of casting Al-Cu alloys [1] are machine tool construction, electrical engineering, engine piston heads, integral engine blocks, bearings or also in the aerospace industry. These alloys typically contain between

2-10% Cu by weight, i.e., between 0.86-4.51% Cu by atomic percentage, with minor additions of other elements. Cu provides a considerable increase in strength and facilitates precipitation hardening. However, the introduction of Cu also increases susceptibility to solidification cracking what reduces weldability, ductility and corrosion resistance.

Consequently, we deem necessary this study in order to analyze, understand and prevent these problems, which aims to obtain a sophisticated multiscale atomistic model to study copper segregation in aluminum-based alloys. Considering the Jaynes' principle of maximum

entropy [2, 3] and the Gibbs-Bogoliubov inequality [4, 5, 6], a meanfield approximation for the system potential (thermalized potential) is carried out, where the atomic interactions have been modeled taking into account an angular-dependent potential (ADP). This type of potential more faithfully describes the interaction between two different atoms when considering the angular effects introduced by dipoles and quadrupoles.

2 THEORETICAL FRAMEWORK

The objective is to find the probability distribution that maximizes the theoretical entropy of the system. For this purpose, the point of starting of our theoretical framework is the Jaynes' maximum entropy principle of classical equilibrium statistical mechanics [2, 3] and the variational meanfield theory, based on the Gibbs-Bogoliubov inequality [4, 5, 6] arriving to a formalism for systems away from equilibrium. According to Venturini [7, 8] the aim of the non-equilibrium formalism is to take into account the thermal oscillations and mass transport without solving the equations of motion or tracking individual vibrations of the particles. In this way, the variables selected for each particle i in our system are the average or expected position $\bar{\mathbf{q}}_i$, its standard deviation σ_{q_i} , defined from $\langle |\mathbf{q}_i - \bar{\mathbf{q}}_i|^2 \rangle = 3\sigma_{q_i}^2$, and the atomic fractions $\mathbf{x}_i$.

2.1 Maximum entropy and equilibrium constraints

Let be, in a general way, a system consisting of N particles and M chemical species, e.g., a substitutional solid solution of atoms. For each particle $i = 1, \dots, N$, and each species $\aleph = 1, \dots, M$, in order to describe the occupancy of each site n_i , it is defined the species occupancy index

$$n_{i\aleph} = \begin{cases} 1, & \text{if site } i \text{ is occupied by species } \aleph \\ 0, & \text{if any other case} \end{cases} \quad (1)$$

These occupancy also verify the following constraints for substitutional systems:

$$n_i = \sum_{k=1}^M n_{ik} = 1, \text{ for } i = 1, 2, \dots, N \quad (2)$$

namely, each site is always occupied by at least one species. The microscopic states of the system are defined by the position $\{\mathbf{q}\} = (\mathbf{q}_i)_{i=1}^N$, momentum $\{\mathbf{p}\} = (\mathbf{p}_i)_{i=1}^N$ and occupancy $\{\mathbf{n}\} = (\mathbf{n}_i)_{i=1}^N$ arrays of all particles in the system, being $\mathbf{n}_i = (n_{ik})_{k=1}^M$ the local occupancy array at site i . The definitions (1) and (2) are equivalent to considering that the occupancy index $\mathbf{n}_i$ belongs to the set

$$\mathcal{O}_{NM} = \left\{ n_{i\aleph} = \{0, 1\}, \text{ such that } \sum_{\aleph=1}^M n_{i\aleph} = 1, \right. \\ \left. \forall i = 1, 2, \dots, N \text{ and } \forall \aleph = 1, 2, \dots, M \right\} \quad (3)$$

Thus, the expected or macroscopic value of a magnitude $f(\{\mathbf{q}\}, \{\mathbf{p}\}, \{\mathbf{n}\})$ is given by the phase average

$$\langle f \rangle = \sum_{\{\mathbf{n}\} \in \mathcal{O}_{NM}} \frac{1}{h^{3N}} \int_{\Gamma} f \rho(\{\mathbf{q}\}, \{\mathbf{p}\}, \{\mathbf{n}\}) dq dp \quad (4)$$

where $\Gamma = (\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)^N = \mathbb{R}^{6N}$, is the phase space, h is the Planck's constant [9], h^{3N} represents the unit volume of a phase space state in a system of distinguishable particles [10, 11], and

$$dq dp = \prod_{i=1}^N \prod_{j=1}^3 dq_{ij} dp_{ij} \quad (5)$$

is the element of phase space volume. The function $\rho(\{\mathbf{q}\}, \{\mathbf{p}\}, \{\mathbf{n}\})$ is the probability density which satisfies the normalization condition

$$\langle 1 \rangle = 1 \quad (6)$$

The Jaynes' maximum entropy principle establishes that the probability density function $\rho(\{\mathbf{q}\}, \{\mathbf{p}\}, \{\mathbf{n}\})$, subject to the constraints on the system, maximizes the theoretical entropy

$$S[\rho] = -k_B \langle \log \rho \rangle \quad (7)$$

where k_B is the Boltzmann's constant [9]. For a system of distinguishable particles the energy of the system can be expressed through its Hamiltonian $\mathcal{H}$, which is a summation of the local Hamiltonians $\mathcal{H}_i$ of each particle i

$$\mathcal{H}(\{\mathbf{q}\}, \{\mathbf{p}\}, \{\mathbf{n}\}) = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i(\{\mathbf{q}\}, \{\mathbf{p}\}, \{\mathbf{n}\}) \quad (8)$$

Suppose that are known both the expected particle energies E_i

$$\langle \mathcal{H}_i \rangle = E_i, \text{ for } i = 1, 2, \dots, N \quad (9)$$

and the expected particle atomic fractions $x_{i\aleph}$

$$\langle n_{i\aleph} \rangle = x_{i\aleph}, \text{ for } i = 1, 2, \dots, N \\ \text{and } \aleph = 1, 2, \dots, M \quad (10)$$

Note that due to the constraint (2), the atomic fractions satisfies

$$\sum_{\aleph=1}^M x_{i\aleph} = 1, \text{ for } i = 1, 2, \dots, N \quad (11)$$

Introducing the constraints (6), (9), and (10) in (7) by means of Lagrange multipliers $k_B \lambda$, $k_B \{\beta\} = (k_B \beta_i)_{i=1}^N$ and $k_B \{\gamma\} = (k_B \gamma_i)_{i=1}^N$ with $\gamma_i = (\gamma_{i\aleph})_{\aleph=1}^M$ respectively, leads to the Lagrangian functional¹

$$\mathcal{L}[\rho, \lambda, \{\beta\}, \{\gamma\}] = S[\rho] - k_B \lambda \langle 1 \rangle \\ - k_B \{\beta\}^T \langle \{\mathcal{H}\} \rangle + k_B \{\gamma\}^T \langle \{\mathbf{n}\} \rangle \quad (12)$$

where $\langle \{\mathcal{H}\} \rangle \equiv \langle (\mathcal{H}_i) \rangle_{i=1}^N$ and $\langle \{\mathbf{n}\} \rangle \equiv \langle (\mathbf{n}_i) \rangle_{i=1}^N$.

¹The term associated with the multiplier $\gamma_{i\aleph}$ has been chosen with that sign to obtain a positive value of the multiplier.

Maximizing the Lagrangian functional with respect to ρ as a variational optimization problem ($\delta\mathcal{L}/\delta\rho = 0$) and solving

$$\rho = \frac{e^{-\{\beta\}^T\{\mathcal{H}\} + \{\gamma\}^T\{\mathbf{n}\}}}{e^{(1+\lambda)}} = \frac{e^{-\{\beta\}^T\{\mathcal{H}\} + \{\gamma\}^T\{\mathbf{n}\}}}{\Xi} \quad (13)$$

where Ξ is the partition function of the system, which is determined after calculating the multiplier λ through (6)

$$\Xi = \sum_{\{\mathbf{n}\} \in \mathcal{O}_{NM}} \frac{1}{h^{3N}} \int_{\Gamma} e^{-\{\beta\}^T\{\mathcal{H}\} + \{\gamma\}^T\{\mathbf{n}\}} dq dp \quad (14)$$

This probability density given in (13) can be interpreted as the non-equilibrium generalization of the grand canonical probability density function. Moreover, as in the equilibrium case, this function is unique because of the concavity of the entropy and the linearity of constraints [12]. Also, by analogy with equilibrium statistical mechanics [6, 11, 13], β_i is related to the absolute temperature T_i at site i according to

$$\beta_i = \frac{1}{k_B T_i} \quad (15)$$

and $\gamma_{i\aleph}$ to the chemical potential $\mu_{i\aleph}$ of species $\aleph$ at site i according to

$$\gamma_{i\aleph} = \beta_i \mu_{i\aleph} = \frac{\mu_{i\aleph}}{k_B T_i} \quad (16)$$

which are determined through the constraints (9) and (10), respectively. Substituting (13) in (7) it is obtained the theoretical entropy of the system as

$$S[\rho] = k_B \{\beta\}^T \{\mathbf{E}\} - k_B \{\gamma\}^T \{\mathbf{x}\} + k_B \log \Xi \quad (17)$$

with $\{\mathbf{E}\} = (E_i)_{i=1}^N$, $\{\mathbf{x}\} = (\mathbf{x}_i)_{i=1}^N$, and $\mathbf{x}_i = (x_{i\aleph})_{\aleph=1}^M$.

2.2 Variational meanfield approximation theory

Due to the nonlinearity of the functions in the system it is necessary to introduce a variational meanfield approximation theory through the Gibbs-Bogoliubov inequality [4, 5]. This inequality establishes for a trial Hamiltonian $\mathcal{H}_0$ that

$$F \leq F_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 \quad (18)$$

where F is the Helmholtz free energy and F_0 the Helmholtz free energy of the trial system. Under isothermal conditions, i.e., $T_i = T$ for $i = 1, 2, \dots, N$, is convenient to work with the grand canonical free entropy potential $\Phi = S - E/T + G/T$. For this potential the relation (18) taking into account (15) becomes

$$\Phi \geq \Phi_0 - k_B \beta_i \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = \mathcal{F}(\mathcal{H}_0) \quad (19)$$

being $\mathcal{F}(\mathcal{H}_0)$ the Bogoliubov functional. Therefore, the optimal Hamiltonian is the one that maximizes

²It has been taken into account in (24) that the summation for all occupancy is equal to the summation for all possible states of the set $\mathcal{O}_{NM}$ and, that the integral $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$. See, for example, the appendix of notes in [15] for more detail of the integral.

³The equipartition theorem is not valid below the Debye temperature, when quantum effects are significant.

⁴It has been applied that the integral $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}/2$. See, for example, the appendix of notes in [15] for more detail of the integral.

the Bogoliubov functional. Following Venturini et al. [7, 8] it is considered a trial local Hamiltonian $\mathcal{H}_{0i}$ corresponding to a simple harmonic oscillator of the way

$$\mathcal{H}_{0i} = \frac{|\mathbf{p}_i - \bar{\mathbf{p}}_i|^2}{2m_i(\mathbf{n}_i)} + \frac{m_i(\mathbf{n}_i)\omega_i^2 |\mathbf{q}_i - \bar{\mathbf{q}}_i|^2}{2} \quad (20)$$

which depends on the frequency of the simple harmonic oscillator ω_i , its mass $m_i(\mathbf{n}_i)$, its instantaneous position $\mathbf{q}_i$ and momentum $\mathbf{p}_i$, and on the average, expected or macroscopic values of its position $\bar{\mathbf{q}}_i$ and momentum $\bar{\mathbf{p}}_i$. Unlike Venturini et al. [7, 8] and Sun et al. [14], which consider the value of m_i to be constant in the Hamiltonian, we go one step further by including the dependence of the mass at site i on the occupancy, since by definition

$$m_i(\mathbf{n}_i) = \sum_{\aleph=1}^M n_{i\aleph} A_{\aleph} \quad (21)$$

The trial density ρ_0 , is obtained substituting in (13) the definition of the local Hamiltonian (20), resulting

$$\rho_0 = \frac{e^{-\{\beta\}^T\{\mathcal{H}_0\} + \{\gamma\}^T\{\mathbf{n}\}}}{\Xi_0} \quad (22)$$

with a partition function Ξ_0 given by

$$\Xi_0 = \sum_{\{\mathbf{n}\} \in \mathcal{O}_{NM}} \frac{1}{h^{3N}} \int_{\Gamma} e^{-\{\beta\}^T\{\mathcal{H}_0\} + \{\gamma\}^T\{\mathbf{n}\}} dq dp \quad (23)$$

which integrating results²

$$\Xi_0 = \prod_{i=1}^N \left(\frac{1}{\hbar \beta_i \omega_i} \right)^3 \sum_{\aleph=1}^M e^{\gamma_{i\aleph}} \quad (24)$$

being $\hbar = h/2\pi$ the Planck's constant reduced.

In order to determine the Lagrange multiplier β_i , the constraints (9) are applied besides to the equipartition theorem of classical Statistical Thermodynamics³, considering the probability density ρ_0 . In this way is obtained that

$$\langle \mathcal{H}_{0i} \rangle_0 = \left\langle \frac{|\mathbf{p}_i - \bar{\mathbf{p}}_i|^2}{2m_i} \right\rangle_0 + \left\langle \frac{m_i \omega_i^2 |\mathbf{q}_i - \bar{\mathbf{q}}_i|^2}{2} \right\rangle_0 = \frac{3}{\beta_i} \quad (25)$$

showing that the variables σ_{q_i} and σ_{p_i} do not appear directly in the energy, so it is necessary to estimate these variables separately from (4)⁴:

$$\langle |\mathbf{q}_i - \bar{\mathbf{q}}_i|^2 \rangle_0 = 3\sigma_{q_i}^2 = \frac{3}{\beta_i \omega_i^2} \left\langle \frac{1}{m_i} \right\rangle_0 \quad (26)$$

and

$$\langle |\mathbf{p}_i - \bar{\mathbf{p}}_i|^2 \rangle_0 = 3\sigma_{p_i}^2 = \frac{3}{\beta_i} \langle m_i \rangle_0 \quad (27)$$

where $\langle m_i \rangle_0$ is the expected mass at site i defined by

$$\langle m_i \rangle_0 = \sum_{\aleph=1}^M x_{i\aleph} A_{\aleph} \quad (28)$$

and $\langle 1/m_i \rangle_0$ the reduced mass at site i defined by

$$\left\langle \frac{1}{m_i} \right\rangle_0 = \sum_{\aleph=1}^M \frac{x_{i\aleph}}{A_{\aleph}} \quad (29)$$

Solving σ_{q_i} in (26) and σ_{p_i} in (27) it is found that

$$\sigma_{q_i} = \sqrt{\frac{1}{\beta_i \omega_i^2} \left\langle \frac{1}{m_i} \right\rangle_0} \quad (30)$$

$$\sigma_{p_i} = \sqrt{\frac{\langle m_i \rangle_0}{\beta_i}} \quad (31)$$

Therefore, from (31) the multiplier β_i is expressed as

$$\beta_i = \frac{\langle m_i \rangle_0}{\sigma_{p_i}^2} \quad (32)$$

and eliminating β_i from (30) and (31) it is obtained the frequency ω_i

$$\omega_i = \frac{\sigma_{p_i}}{\sigma_{q_i}} \sqrt{\frac{\langle 1/m_i \rangle_0}{\langle m_i \rangle_0}} \quad (33)$$

Likewise to β_i , the multiplier $\gamma_{i\aleph}$ is obtained by imposing the constraints (10), what results in

$$x_{i\aleph} = e^{\gamma_{i\aleph}} \left(\sum_{\beth=1}^M e^{\gamma_{i\beth}} \right)^{-1} \quad (34)$$

where $e^{\gamma_{i\aleph}}$ is the fugacity of the species $\aleph$ at site i . According to thermodynamics [6, 11, 13] the chemical potential of the species $\aleph$ at site i can be defined by

$$\mu_{i\aleph} = \left(\frac{\partial G}{\partial n_{i\aleph}} \right)_{T, P, \underline{n}_{i\aleph}} \quad (35)$$

where $\underline{n}_{i\aleph} = \{n_{i\beth}, n_{j\beth}\}$ with $\beth = 1, 2, \dots, M$ and $\beth \neq \aleph$, with $j = 1, 2, \dots, N$ and $j \neq i$, and with $\beth = 1, 2, \dots, M$, being G the Gibbs free energy determined as

$$G = \sum_{i=1}^N \sum_{\aleph=1}^M \mu_{i\aleph} n_{i\aleph} \quad (36)$$

The chemical potential of, e.g., the species $\aleph = 1$, from (35) provides

$$\mu_{i1} = \left(\frac{\partial G}{\partial n_{i1}} \right)_{T, P, \underline{n}_{i1}} \quad (37)$$

According to (2) it is also true that

$$\begin{aligned} \mu_{i1} &= \left(\frac{\partial G}{\partial n_{i1}} \right)_{T, P, \underline{n}_{i1}} = \sum_{\aleph=2}^M \left(\frac{\partial G}{\partial n_{i\aleph}} \right)_{T, P, \underline{n}_{i\aleph}} \cdot \left(\frac{\partial n_{i\aleph}}{\partial n_{i1}} \right) = \\ &= -\mu_{i2} - \mu_{i3} - \dots - \mu_{iM} \end{aligned} \quad (38)$$

Consequently, the following relation for the multiplier $\gamma_{i\aleph}$ is obtained according to (16) and (38)

$$\sum_{\aleph=1}^M \gamma_{i\aleph} = 0 \quad (39)$$

Solving in (34) the multiplier $\gamma_{i\aleph}$ taking into account (39) leads to

$$\gamma_{i\aleph} = \log x_{i\aleph} - \frac{1}{M} \sum_{\beth=1}^M \log x_{i\beth} \quad (40)$$

Substituting (32), (33) and (40) in (24) it is obtained that

$$\Xi_0 = \prod_{i=1}^N \prod_{\aleph=1}^M \left(\frac{\sigma_{p_i}^2}{\hbar \langle m_i \rangle_0} \frac{\sigma_{q_i}^2}{\hbar \langle 1/m_i \rangle_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{x_{i\aleph}} \right)^{\frac{1}{M}} \quad (41)$$

and replacing (15) and (31) in (41) leads to

$$\Xi_0 = \prod_{i=1}^N \prod_{\aleph=1}^M \left(\frac{\sigma_{q_i}^2 k_B T}{\hbar^2 \langle 1/m_i \rangle_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{x_{i\aleph}} \right)^{\frac{1}{M}} \quad (42)$$

Finally, considering the Al-Cu system, with $M = 2$ species, $\aleph = 1$ for Al, $\aleph = 2$ for Cu, and from (11) and (29), the partition function of the system becomes

$$\Xi_0 = \prod_{i=1}^N \left(\frac{\frac{\sigma_{q_i}^2 k_B T}{\hbar^2}}{\frac{x_{iAl}}{A_{Al}} + \frac{1-x_{iAl}}{A_{Cu}}} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{x_{iAl}(1-x_{iAl})} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (43)$$

Once the probability distribution ρ_0 and the partition function Ξ_0 of the system have been determined, it is possible to optimize and solve the problems with our model, considering the meanfield approximation of the potential or thermalized potential $\langle V \rangle_0$. The determination of this thermal average is carried out using the Gauss-Hermite quadrature rule. See [7] for more details.

3 ANGULAR-DEPENDENT POTENTIAL (ADP)

The angular-dependent potential (ADP) was developed by Mishin et al. [16, 17] and it is an extension of the Embedded Atom Method (EAM) formalism, suggested by Daw and Baskes [18, 19, 20], adding angular-dependent dipole and quadrupole terms, which represent the dipole and quadrupole distortions of the local atomic environment by introducing angular forces.

According to Mishin et al. [16, 17], the expression of this potential is the following:

$$V(\{\mathbf{q}\}, \{n\}) = V^\phi + V^F + V^\mu + V^\lambda \quad (44)$$

with V^ϕ the pair interaction energy term, V^F the embedding electron density energy term, V^μ the dipole- μ contribution term and V^λ the quadrupole- λ contribution term. The potential terms should be corrected in our formulation including occupancy indexes. Therefore, according to [16, 17] and (2), the terms are defined as

$$V^\phi = \sum_i \sum_{i \neq j} \frac{1}{2} n_i n_j \phi_{ij}(r_{ij}) \quad (45)$$

$$V^F = \sum_i n_i F_i(\bar{\rho}_i) \quad (46)$$

$$V^\mu = \sum_i \frac{1}{2} (\boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{\mu}_i) \quad (47)$$

$$V^\lambda = \sum_i \frac{1}{2} \left((\boldsymbol{\lambda}_i : \boldsymbol{\lambda}_i) - \frac{1}{3} (\boldsymbol{\lambda}_i : \mathbf{I})^2 \right) \quad (48)$$

being

$$n_i = n_{iAl} + n_{iCu} \quad (49)$$

The function ϕ_{ij} is the pair interaction potential, which depends only on the scalar distance r_{ij} between atom i and atom j and on their chemical species i and j . The function $F_i(\bar{\rho}_i)$ is the embedding energy of atom i in the host electron density $\bar{\rho}_i$ induced at site i by all other atoms of the system, where the host electron density $\bar{\rho}_i$ is defined as

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i} n_j \rho_j(r_{ij}) \quad (50)$$

where $\rho_j(r_{ij})$ is the electron density function assigned to atom j . The first two terms in equation (44) constitute the functional form of the regular EAM [18, 19, 20] and have a central-force character, that is, do not depend on angles between interatomic bonds. The novelty of this ADP is in the interactions with a non-central character, represented by the last two terms in (44), which depend on the dipole vectors

$$\boldsymbol{\mu}_i = \sum_{j \neq i} n_i n_j u_{ij}(r_{ij}) \mathbf{r}_{ij} \quad (51)$$

and the quadrupole tensors

$$\boldsymbol{\lambda}_i = \sum_{j \neq i} n_i n_j w_{ij}(r_{ij}) \mathbf{r}_{ij} \otimes \mathbf{r}_{ij} \quad (52)$$

The terms (47) and (48) introduce two additional pairwise functions, $u_{ij}(r)$ and $w_{ij}(r)$, which represent angular-dependent forces. These functions for the Al-Cu system are obtained of the Interatomic Potentials Repository (IPR) of the National Institute of Standards and Technology (NIST) of the U.S.A. [21], as indicated in [17].

4 RESULTS AND CONCLUSIONS

The linear thermal expansion ε obtained with our model have been compared with experimental (exp.) data and MD results [22] for pure Al, pure Cu and the Al_2Cu alloy (phase θ in the Al-Cu diagram). The linear thermal expansion ε to the temperature T is defined as the unitary variation of the lattice parameter at that temperature a_T respect to a reference value a_{300} , corresponding to the temperature of 300 K, namely

$$\varepsilon(T) = \frac{a_T - a_{300}}{a_{300}} \quad (53)$$

The Figures 1, 2 and 3 show the values found for the linear thermal expansion of pure Al, of pure Cu and of the Al_2Cu alloy in %.

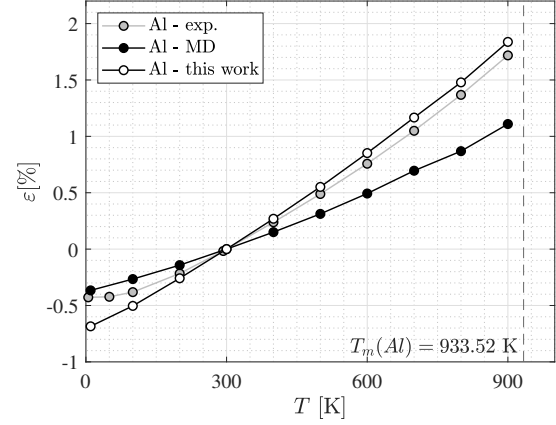


Figure 1. Linear thermal expansion of pure Al in %. $T_m(\text{Al})$ denotes the Al melting temperature.

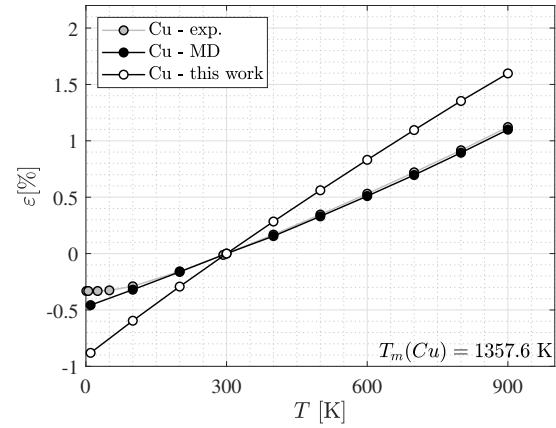


Figure 2. Linear thermal expansion of pure Cu in %. $T_m(\text{Cu})$ denotes the Cu melting temperature.

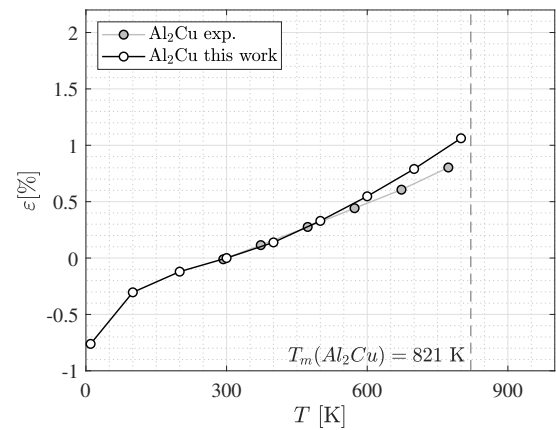


Figure 3. Linear thermal expansion of Al_2Cu in %. $T_m(\text{Cu})$ denotes the Al_2Cu melting temperature.

These preliminary results show that for Al, our model approaches the exp. data, adapted from [23], in the temperature range 200-900 K, with a maximum relative error about 7%. For low temperatures, outside this range,

the values move away. MD values do not fit the exp. data. The results for Cu reveal that MD values approach the exp. data quite well, while our model does not fit. Finally, the results for Al₂Cu alloy, reveal a good fit in the range 300-500 K, with a maximum relative error of about 1%. Out of this range the error increases.

In conclusion, we consider that further simulations with different alloys are necessary to verify the fit and implementation of the ADP to this system.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors wish to express their gratitude for the support received to Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades of Spain (PID2021-124869NB-I00) to University of Sevilla and to Centro Informático Científico de Andalucía (CICA).

Este trabajo de investigación es parte de la ayuda PRE2021-097266, financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y por el FSE+.



REFERENCES

- [1] J. G. Kaufman. *Introduction to Aluminum Alloys and Tempers*. ASM International, 2000.
- [2] E. T. Jaynes. Information theory and statistical mechanics. *Physical review*, 106(4):620–630, 5 1957.
- [3] E. T. Jaynes. Information theory and statistical mechanics II. *Physical Review*, 108(2):171–190, 10 1957.
- [4] A. Isihara. The Gibbs-Bogoliubov inequality. *Journal of Physics A: General Physics*, 1:539–548, 5 1968.
- [5] J. M. Yeomans. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Oxford Science Publications, 1992.
- [6] H. B. Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. John Wiley & Sons, 2nd edition, 1985.
- [7] G. N. Venturini. *Topics in Multiscale Modeling of Metals and Metallic Alloys*. PhD thesis, Caltech, 10 2010.
- [8] G. Venturini, K. Wang, I. Romero, M. P. Ariza, and M. Ortiz. Atomistic long-term simulation of heat and mass transport. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 73:242–268, 12 2014.
- [9] Eite Tiesinga, Peter J. Mohr, David B. Newell, and Barry N. Taylor. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2018*. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 50(3):033105, 9 2021.
- [10] T. L. Hill. *An Introduction to Statistical Thermodynamics*. Dover Publications, 1986.
- [11] L. A. Girifalco. *Statistical Mechanics of Solids*. Oxford University Press, 2000.
- [12] R. T. Rockafellar. *Convex Analysis*. Princeton University Press, 1970.
- [13] R. Kubo. *Thermodynamics*. North-Holland Publishing Company, 1968.
- [14] Xingsheng Sun, Kevin G. Wang, Pilar Ariza, Rakesh K. Kapania, and Gary D. Seidel. *A Computational Framework for Long-Term Atomistic Analysis of Solute Diffusion in Nanomaterials*. PhD thesis, Virginia Tech, 10 2018.
- [15] F. Reif. *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. Mc Graw-Hill, 1965.
- [16] Y. Mishin, M. J. Mehl, and D. A. Papaconstantopoulos. Phase stability in the Fe-Ni system: Investigation by first-principles calculations and atomistic simulations. *Acta Materialia*, 53(15):4029–4041, 9 2005.
- [17] F. Apostol and Y. Mishin. Interatomic potential for the Al-Cu system. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 83(5):054116, 2011.
- [18] M. S. Daw and M. I. Baskes. Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals. *Phys. Rev. Lett.*, 50(17):1285–1288, 4 1983.
- [19] M. S. Daw and M. I. Baskes. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Phys. Rev. B*, 29(12):6443–6453, 6 1984.
- [20] S. M. Foiles, M. I. Baskes, and M. S. Daw. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Phys. Rev. B*, 33(12):7983–7991, 6 1986.
- [21] NIST. National Institute of Standards and Technology. <https://www.ctcms.nist.gov/potentials>. Consulted: 8th may 2025.
- [22] A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger, D. S. Bolintineanu, W. M. Brown, P. S. Crozier, P. J. in 't Veld, A. Kohlmeyer, S. G. Moore, T. D. Nguyen, R. Shan, M. J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, and S. J. Plimpton. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Comp. Phys. Comm.*, 271:108171, 2022.
- [23] Y. S. Touloukian and C. Y. Ho. *Thermophysical Properties of Matter - The TPRC Data Series. Volume 12. Thermal Expansion - Metallic Elements and Alloys*. Thermophysical Properties Research Center (TPRC), 1970.

MODELIZACIÓN DE LA ELASTODIFUSIVIDAD DEL HIDRÓGENO EN FERRITA.

Gonzalo Álvarez^{1*}, Javier Segurado¹, Álvaro Ridruejo¹

¹ Departamento de Ciencia de Materiales. Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Caminos Canales y Puertos. Universidad Politécnica de Madrid. C/ Profesor Aranguren 3, 28040 Madrid-España

* Persona de contacto: g.alvarezm@upm.es

RESUMEN

Para poder evitar la fragilización por hidrógeno y evaluar la susceptibilidad de un material a la misma es necesario conocer la evolución del hidrógeno interno en el material. Con este propósito, se ha desarrollado un modelo multiescala basado en un modelo de Monte Carlo cinético orientado a objetos basado en red (OKMC) y un solver mecánico basado en *phase field*. Este código se ha utilizado para caracterizar la elastodifusividad del hidrógeno en ferrita (BCC-Fe). El código desarrollado simula el transporte de hidrógeno para obtener el coeficiente de difusión en función de la tensión y temperatura local, permitiendo calcular el tensor elastodifusivo. Para concluir, se aporta una fórmula analítica para la evaluación del tensor de difusividad local del hidrógeno en función de las condiciones locales de tensión y temperatura.

PALABRAS CLAVE: Hidrógeno, Elasto-difusividad, Dislocaciones.

ABSTRACT

In order to assess hydrogen embrittlement, it is important to predict the evolution of an internal hydrogen distribution in the material over time. To this aim, a multiscale model has been developed based on a lattice-based, object-oriented kinetic Monte Carlo (OKMC) code and a mechanical solver based on a phase field formulation. This model has been used to evaluate the elasto-diffusivity of hydrogen in ferrite (BCC-Fe). The code developed here simulates hydrogen diffusion as a function of both local stress and temperature, allowing the assessment of the elasto-diffusivity tensor. To conclude, an analytical formula to evaluate the local diffusion tensor as a function of the temperature and stress conditions is also provided.

KEYWORDS: Hydrogen, elasto-diffusion, lattice defects.

1. INTRODUCCIÓN

En presencia de hidrógeno, varios materiales metálicos muestran una reducción significativa en su tenacidad a fractura. Este fenómeno es conocido como fragilización por hidrógeno fue observado por primera vez por Johnson en 1874 [1] y ha sido ampliamente estudiado durante el último siglo, describiendo exhaustivamente sus efectos macroscópicos de forma empírica. Sin embargo, a pesar de los esfuerzos en caracterizar este fenómeno de degradación desde el punto de vista mecanístico, la comunidad no ha alcanzado aún un consenso sobre el proceso por el cual la presencia de hidrógeno produce una disminución de la energía plástica disipada durante el proceso de rotura. Hasta la fecha se han descrito múltiples micro mecanismos capaces de explicar la reducción de tenacidad en ciertas condiciones. Entre ellos, destaca la reducción de la energía cohesiva del material (HID) [2, 3, 4], el aumento de la movilidad local de las dislocaciones (LHEDM) [5, 6], la reducción local de las barreras energéticas para la nucleación de

dislocaciones (AIDE) [7, 8], vacantes (HESIV) [9, 10], grietas (HIFF) [11, 12], o múltiples defectos (Defactant concept) [13, 14] y la promoción de transformaciones de fase (HIPT) [15, 16]. Estos mecanismos han sido históricamente agrupados en cinco modelos diferentes: El modelo de transformación de fase inducida por hidrógeno (HIPT) para materiales que lo presentan [15, 16], o según el carácter de la fractura local, el modelo de decohesión inducida por hidrógeno (HEDE), el cual considera una inhibición de la plasticidad local [17, 18], el modelo de aumento de la plasticidad local debido al hidrógeno (HELP) [19, 20], el modelo secuencial (HELP → HEDE) [21, 11] y el modelo sinérgico (HELP + HEDE) [22, 21]. Con evidencias experimentales apoyando el predominio de cada uno de ellos en distintos metales y condiciones.

Para poder predecir correctamente el comportamiento de un material en presencia de hidrógeno, es necesario poder entender que efecto induce el hidrógeno en los diferentes mecanismos. El problema principal reposa en la naturaleza multiescala de esos mecanismos, los cuales

comprenden procesos atomísticos ($\tau \approx 10^{-15}$ s, $\lambda \approx 10^{-10}$ m) y procesos característicos de la física de medios continuos ($\tau \approx 10^{-10}$ s, $\lambda \approx 10^{-7}$ m).

Para ello se propone el uso de un modelo de Monte Carlo cinético orientado a objetos (OKMC) como marco de integración de escalas [23]. Este marco permitirá evaluar el movimiento de los átomos móviles de hidrógeno en el material. Este movimiento viene caracterizado por dos parámetros: el vector de desplazamiento, caracterizado para el entorno de cada defecto y una frecuencia, la cual es resultado de una tasa de intento, y una barrera energética que superar. La barrera energética a superar, a su vez, tiene múltiples contribuciones, tanto de corto (caracterizadas por DFT), como de largo alcance (caracterizadas por los campos elásticos).

El objetivo de este trabajo se centra en la evaluación del efecto que tienen los campos tensionales de largo alcance en el proceso de difusión del hidrógeno. Para ello se ha acoplado al código de OKMC un solver mecánico basado en FFT en el que los múltiples defectos han sido introducidos mediante un modelo de phase-field. La inclusión del solver permite la caracterización de los campos mecánicos locales para cualquier configuración de defectos con condiciones arbitrarias de contorno, permitiendo evaluar las contribuciones mecánicas a las barreras difusivas. Permitiendo la caracterización del efecto de la elastodifusividad del hidrógeno en ferrita.

2. METODOLOGÍA

La elastodifusividad del hidrógeno en ferrita ha sido estudiada mediante el uso de un código de Monte Carlo cinético orientado a objetos (okMC) para la simulación del movimiento del hidrógeno libre en presencia de los campos de influencia tanto de otros átomos de hidrógeno circundantes como de otros defectos (vacantes) o campos remotos. Para ello se han evaluado los campos elásticos en un monocristal de ferrita en presencia de un campo de tensión media remoto mediante el uso de un solver espectral en el cual los defectos se han incluido mediante un modelo de *phase-field* [23].

2.1. Monte Carlo Cinético

En el modelo propuesto, los únicos defectos móviles son los átomos intersticiales de hidrógeno y las vacantes. Estos defectos pueden moverse entre sitios de alta simetría de la red cristalina (octaédricos o tetraédricos) [25]. El movimiento de los defectos puntuales se produce a una frecuencia descrita por la teoría del estado de transición [24a, 24b], dada por la expresión (1).

$$v_{ij} = v_{0ij} \cdot \exp\left(\frac{-E_{ij}^{eff}}{k_B T}\right), \quad (1)$$

donde la constante preexponencial (v_{ij}^0) es la frecuencia de intento de la transición j del defecto i y el factor

exponencial es el cociente entre la barrera energética efectiva de la transición $\{j\}$ y la energía térmica $k_B T$.

La selección de la transición a ejecutar en cada paso de tiempo se selecciona aleatoriamente, con una probabilidad asociada a cada transición igual a la ratio entre frecuencia de dicha transición y la frecuencia acumulada del sistema según la expresión (2).

$$p_{ij} = \frac{v_{ij}}{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} v_{ij}} \quad (2)$$

El paso de tiempo (Δt) entre sucesos viene determinado por una distribución de Poisson con frecuencia media igual a la frecuencia acumulada de sistema según la expresión (3).

$$\Delta t = \frac{-\log \mathfrak{R}}{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} v_{ij}}, \quad (3)$$

donde $\mathfrak{R}$ representa un número pseudo aleatorio que sigue una distribución uniforme en el intervalo [0,1)

2.2. Barrera de difusión

La barrera de difusión efectiva de una transición ha sido dividida de forma aditiva en cuatro términos diferente según la expresión (4).

$$E^{eff} = E^0 + \Delta E^\mu + \Delta E^\sigma + \Delta E^{\nabla\sigma} \quad (4)$$

Aquí el término E^0 representa la barrera de transición para un defecto aislado en ausencia de tensiones externas, ΔE^μ hace referencia a la modificación de la barrera debida a la modificación del campo de potencial químico por la presencia de los defectos circundantes, ΔE^σ a la modificación de la barrera debida al estado tensional en la posición de partida y $\Delta E^{\nabla\sigma}$ a la modificación proveniente de las diferencias de energía de interacción elásticas entre la configuración inicial y la configuración de transición.

Los valores de E^0 , ΔE^μ y ΔE^σ han sido obtenidos a partir de cálculos de DFT [26], mientras que el valor de $\Delta E^{\nabla\sigma}$ se obtiene mediante la evaluación de los campos elásticos mediante el solver mecánico [23].

2.3. Campos elásticos.

La evaluación de los campos elásticos se ha llevado a cabo mediante la resolución de los campos elásticos mediante un solver espectral derivado de FFTMad [27], en el que los defectos han sido incluidos como una polarización en base a eigendeformaciones, las cuales son obtenidas mediante un modelo de *phase-field* [28, 23]. En este modelo, las eigendeformaciones locales vienen determinadas por el sumatorio de los productos de los valores locales de los campos de fase ($\phi^a(\mathbf{x})$) con su tensor de deformación normalizada (Λ^a) según la expresión (5):

$$\varepsilon_{ij}^{Eig}(x) = \phi^k(x) \Lambda_{ij}^k \quad (5)$$

La evaluación de los campos elásticos se ha realizado en un elemento de volumen representativo (RVE) discretizado en una malla cúbica regular de 64^3 voxels de 2 nm de lado. La rigidez del medio es la de la ferrita ($C_{11} = 226$ GPa, $C_{12} = 140$ GPa, $C_{44} = 116$ GPa).

2.4. Cálculo de la difusividad

Para el cálculo del tensor de difusividad a tensión constante, se ha utilizado una la relación de Einstein, que relaciona la difusividad direccional (D^d) con el desplazamiento cuadrático promedio según la expresión (6), donde u^d representa el vector unitario en la dirección d .

$$D^d = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle (x(t) - x_0) \cdot u^d \rangle^2}{2t} \quad (6)$$

Se ha usado un tiempo mínimo de simulación de 0.1 ns para todas las simulaciones, pero el tiempo de simulación ha sido incrementado en algunas simulaciones para asegurar la convergencia al valor estable. Para ello, se ha comprobado que el valor promedio de la difusividad direccional en ninguna de las direcciones de alta simetría haya variado en más de un 5% en último 20% del tiempo de simulación.

A partir del tensor de difusividad, $D(T)$ se han extraído los valores del factor preexponencial, D^0 , y de la barrera energética efectiva de la difusión, ΔE^{eff} , mediante un ajuste según la expresión (7).

$$D(T) = D^0 \exp\left(\frac{-\Delta E^{eff}}{k_B T}\right) \quad (7)$$

Para ello, el tensor de difusividad ha sido evaluado en las temperaturas de 240, 270, 300, 330 y 360 K para una concentración de hidrógeno móvil de 3 ppm (át.) en presencia de una concentración de vacantes de 0,1 ppm. Los resultados de estos cálculos se muestran en las Figuras 1 (a, b, c y d).

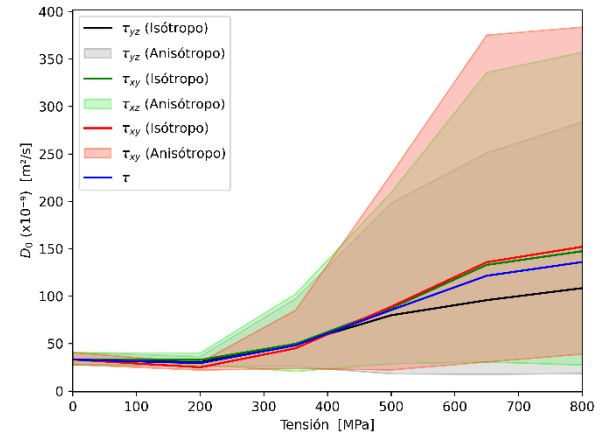
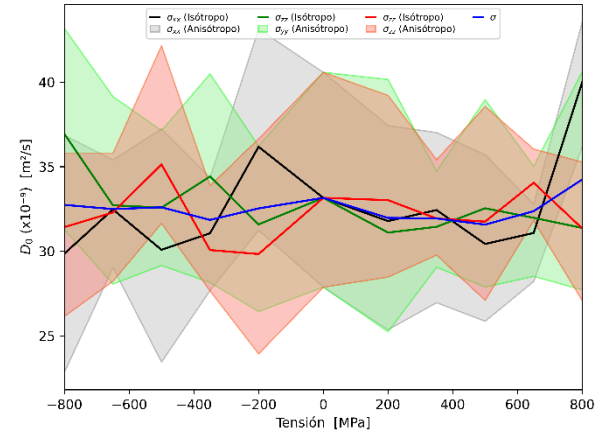
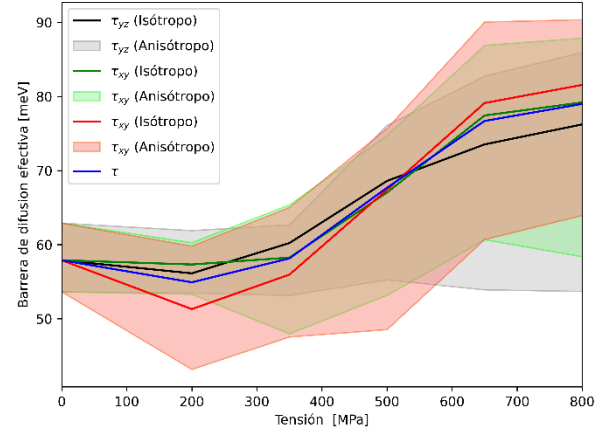
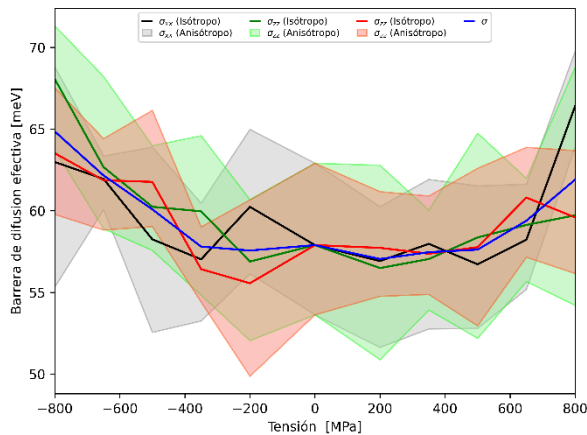


Fig. 1. (a) Barrera efectiva en función de la tensión uniaxial. (b) Ídem, en función de la tensión de cortadura. (c) Factor preexponencial en función de la tensión uniaxial. (d) Ídem, en función de la tensión de cortadura.

La difusividad media, D , se ha obtenido a partir del valor medio de la traza del tensor de difusividad, $\mathbf{D}$, una vez diagonalizado.

2.5. Evaluación de la elastodifusividad

Para la evaluación del tensor de elastodifusividad, $\mathcal{D}(\sigma, T)$, que representa la dependencia del tensor de difusión con el estado de tensión según la expresión (8),

se ha evaluado el tensor de difusividad, $D(\sigma, T)$, en condiciones de tensión macroscópica, σ , de $\pm[0, 200, 350, 500, 650 \text{ y } 800]$ MPa en los estados de tensión uniaxial y de cortante puros.

$$\mathbb{D}(\sigma, T) = \frac{\partial D(\sigma, T)}{\partial \sigma} \quad (8)$$

3. RESULTADOS

Se ha validado el método mediante el cálculo de la difusividad media a temperatura ambiente en ausencia de tensiones externas obteniendo un valor de $D=3,5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, valor de acuerdo con las medidas experimentales previas, $(1-10) \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, [29]. Se ha realizado una evaluación de la dependencia con la temperatura en ausencia de tensiones externas ajustando el comportamiento a la ecuación (7) con valores de coeficiente preexponencial y barrera efectiva de $D^0=34,9 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ y $\Delta E^{\text{eff}}=59,3 \text{ eV}$, también dentro del amplio rango de medidas experimentales $(16-223) \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ y $(35-142) \text{ eV}$ respectivamente [29].

También se ha estudiado la dependencia con el estado tensional del factor preexponencial, D^0 , y de la barrera efectiva, ΔE^{eff} , del tensor de difusividad del hidrógeno en ferrita en el rango de temperaturas entre 240 y 360 K y de tensiones entre -800 y +800 MPa. Los resultados obtenidos de la dependencia de D^0 pueden ser ajustados a un polinomio de segundo grado (ecuación (9)), mientras que la dependencia de ΔE^{eff} puede ser considerada lineal.

Debido a la simetría de la fase BCC, la dependencia del factor preexponencial con la tensión presenta exclusivamente ocho valores independientes, que se recogen en la tabla 1. El valor del factor preexponencial obtenido del ajuste en tensión es de: $29,4 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ para los valores de la diagonal, y de $-2,34 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ para los valores de fuera de la diagonal.

$$D^0(\sigma) = D^0|_{\sigma=0} + \left(\frac{\partial D^0}{\partial \sigma} \right) |_{\sigma=0} \sigma + \left(\frac{\partial^2 D^0}{\partial \sigma^2} \right) |_{\sigma=0} \sigma^2 \quad (9)$$

Se pueden extraer varias conclusiones de los valores de la Tabla 1: la dependencia del factor preexponencial con las tensiones uniaxiales ($k = 1$) es significativamente menor a la dependencia encontrada con las tensiones cortantes ($k \neq 1$). Se puede apreciar también que los valores obtenidos para la dependencia de la difusividad en direcciones distintas de $\langle 100 \rangle$ ($i \neq j$) con las tensiones uniaxiales ($k = 1$) son aproximadamente nulos, ya que se conserva la simetría de la red BCC.

Tabla 1. Dependencia del tensor de coeficientes preexponenciales con el estado tensional.

$\left(\frac{\partial D_{ij}^0}{\partial \sigma_{kl}^n} \right) _{\sigma=0}$	n=1 [m ² s ⁻¹ Pa ⁻¹]/10 ⁻¹⁸	n=2 [m ² s ⁻¹ Pa ⁻²]/10 ⁻²¹
i=j=k=l	1,03	-3,02
i=j; j≠k; k=l	-0,13	4,01
i=j; i≠k; i≠l; k≠l	89,47	203,38
i=j=k; k≠l	4,32	130,59
i≠j; i≠k; j≠k k=l	-1,22	-0,04
i≠j; i=k=l	-0,23	0,40
i≠j; i=k; j=l	56,67	-60,23
i≠j; i=k; i≠l; j≠l	92,81	12,98

La dependencia de la barrera eficaz respecto del estado tensional presenta dos términos independientes: la correspondiente a las tensiones uniaxiales, $\partial \Delta E^{\text{eff}} / \partial \sigma_{ii} = -1,91 \text{ eV Pa}^{-1}$ y la dependencia con las tensiones cortantes $\partial \Delta E^{\text{eff}} / \partial \sigma_{ij} = 32,12 \text{ eV Pa}^{-1}$. El valor en ausencia de tensiones es de 55,9 eV.

Con estos valores se puede evaluar el tensor elastodifusivo mediante la expresión (10)

$$\mathbb{D} = \left(\frac{\partial D^0}{\partial \sigma} - \frac{D^0}{k_B T} \otimes \frac{\partial \Delta E^{\text{eff}}}{\partial \sigma} \right) \exp \left(\frac{-\Delta E^{\text{eff}}}{k_B T} \right) \quad (10)$$

4. CONCLUSIÓN

Se ha desarrollado un método para poder evaluar el tensor de difusividad direccional del hidrógeno en ferrita en condiciones arbitrarias de tensión y temperatura, y sus resultados han sido comparados satisfactoriamente con valores experimentales. Este método permite considerar el valor local de la difusividad en función de los campos locales (σ, T), permitiendo evaluar la difusividad direccional en presencia tanto de campos elásticos externos, como de las fluctuaciones locales debidas a la microestructura y los defectos.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer al Ministerio de Ciencia e Innovación la ayuda financiera recibida mediante los proyectos TED2021-130255B-C32 y PID2023-150075OB-I00, financiados por MCIN/AEI/10.13039/501100011033.

En particular, G. Álvarez agradece la beca doctoral FPU concedida por el Ministerio de Universidades (Ref.: FPU20/05495).

REFERENCIAS

- [1] W. H. Johnson, & Thomson, W. “ II. On some remarkable changes produced in iron and steel by the action of hydrogen and acids”. Proceedings of the Royal Society of London, 23 (156-163), 168–179. dec, 1875
<https://doi.org/10.1098/rsp1.1874.0024>
- [2] L. B. Pfeil, “The effect of occluded hydrogen on the tensile strength of iron,” Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, vol. 112, pp. 182–195, aug 1926.
- [3] A. Turnbull, “Modelling of environment assisted cracking,” Corrosion Science, vol. 34, pp. 921–960, jun 1993.
- [4] A. Ramasubramaniam, M. Itakura, and E. A. Carter, “Interatomic potentials for hydrogen in α -iron based on density functional theory,” Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, vol. 79, p. 174101, may 2009.
- [5] H. K. Birnbaum and P. Sofronis, “Hydrogen-enhanced localized plasticity a mechanism for hydrogen-related fracture,” Materials Science and Engineering A, vol. 176, pp. 191–202, mar 1994
- [6] P. Yu, et al, “The key role played by dislocation core radius and energy in hydrogen interaction with dislocations,” Acta Materialia, vol. 185, pp. 518–527, feb 2020.
- [7] S. P. Lynch, “Comments on "A unified model of environment-assisted cracking",” Scripta Materialia, vol. 61, pp. 331–334, aug 2009.
- [8] S. P. Lynch, “Hydrogen embrittlement (HE) phenomena and mechanisms,” Stress corrosion cracking: Theory and practice, vol. 30, pp. 90–130, jun 2011.
- [9] T. Matsuo, J. Yamabe, and S. Matsuoka, “Effects of hydrogen on tensile properties and fracture surface morphologies of Type 316L stainless steel,” International Journal of Hydrogen Energy, vol. 39, pp. 3542–3551, feb 2014.
- [10] E. Ogosi, et al “Hydrogen effect on plastic deformation and fracture in austenitic stainless steel,” jun 2020.
- [11] S. S. Shishvan, G. Csányi, and V. S. Deshpande, “Hydrogen induced fast-fracture,” Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 134, p.103740, 1 2020.
- [12] S. S. Shishvan, G. Csányi, and V. S. Deshpande, “Strain rate sensitivity of the hydrogen embrittlement of ferritic steels,” Acta Materialia, vol. 257, p. 119173, 9 2023.
- [13] R. Kirchheim, “On the solute-defect interaction in the framework of a defectant concept.” International Journal of Materials Research, 100 (4), 483–487. apr, 2009
<https://doi.org/10.3139/146.110065>
- [14] R. Kirchheim, “Revisiting hydrogen embrittlement models and hydrogen-induced homogeneous nucleation of dislocations.” Scripta Materialia, 62 (2), 67–70. jun, 2010
<https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2009.09.037>
- [15] A. T. Motta and L. Q. Chen, “Hydride formation in zirconium alloys,” Jom, vol. 64, no. 12, pp. 1403–1408, 2012.
- [16] N. Pushilina, et al, “Hydrogen-induced phase transformation and microstructure evolution for Ti-6Al-4V parts produced by electron beam melting,” Metals, vol. 8, p. 301, apr 2018.
- [17] K. P. Balan, “Hydrogen Embrittlement and Stress Corrosion Cracking,” Metallurgical Failure Analysis, pp. 179–202, 2018.
- [18] M. Dadfarnia, et al, “Recent advances on hydrogen embrittlement of structural materials,” International Journal of Fracture, vol. 196, pp. 223–243, nov 2015.
- [19] I. M. Robertson, et al, “Hydrogen Embrittlement Understood,” Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science, vol. 46, pp. 2323–2341, jun 2015.
- [20] S. Lynch, “Discussion of some recent literature on hydrogen-embrittlement mechanisms: Addressing common misunderstandings,” Corrosion Reviews, vol. 37, pp. 377–395, oct 2019.
- [21] M. B. Djukic, et al, “The synergistic action and interplay of hydrogen embrittlement mechanisms in steels and iron: Localized plasticity and decohesion,” Engineering Fracture Mechanics, vol. 216, p. 106528, jul 2019.
- [22] Gerberich, W. W., Oriani, R. A., Lji, M. J., Chen, X., & Foecke, T. The necessity of both plasticity and brittleness in the fracture thresholds of iron. Philosophical Magazine A: Physics of Condensed Matter, Structure, Defects and Mechanical Properties, 63 (2), 363–376. feb 1991.
<https://doi.org/10.1080/01418619108204854>
- [23] Gonzalo Álvarez, Javier Segurado, & Álvaro Ridruejo. “Difusión de hidrógeno en ferrita en presencia de dislocaciones mediante un modelo de tipo Monte Carlo cinético.”, mar 2024.
<https://gef2024.webs.upv.es/papers/32.pdf>
- [24a] H. Eyring, “The theory of absolute reaction rates,” Transactions of the Faraday Society 34 (0) jan 1938 41–48. doi:10.1039/TF9383400041. URL <https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/1938/tf/tf9383400041>
- [24b] P. Pechukas, “Transition State Theory,” Annual Review of Physical Chemistry 32 (Volume 32,) oct 1981, 159–177. doi:10.1146/ANNUREV.PC.32.100181.001111.
- [25] Álvarez, G., Sánchez Montero, J., & Ridruejo, Á. (2023). Caracterización por DFT del efecto de la tensión sobre la difusión del hidrógeno en hierro BCC. *Revista Española de Mecánica de La*

Fractura, ISSN-e 2792-4246, N^o. 5, 2023, Págs. 115-120, 5, 115–120.
<https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=9031384&info=resumen&idioma=ENG>

- [26] Alvarez, G., Sánchez, J., Segurado, J., de Andres, P. L., & Ridruejo, A. . “Hydrogen diffusion in BCC-Fe: DFT study of tensorial stress effects and interactions with point defects.” *Results in Physics*, 59, 107590. apr 2024
<https://doi.org/10.1016/J.RINP.2024.107590>
- [27] Lucarini, S., & Segurado, J. “An algorithm for stress and mixed control in Galerkin-based FFT homogenization.” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 119 (8), 797–805 aug 2019. <https://doi.org/10.1002/NME.6069>
- [28] Peng, X., Mathew, N., Beyerlein, I. J., Dayal, K., & Hunter, A. “A 3D phase field dislocation dynamics model for body-centered cubic crystals.” *Computational Materials Science*, 171, 109217. jan 2020
<https://doi.org/10.1016/J.COMMATSCI.2019.109217>
- [29] Hayashi, Y., & Shu, W. M. “Iron (Ruthenium and Osmium)-Hydrogen Systems.” *Solid State Phenomena*, 73–75, 65–114, aug 2000.
<https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.73-75.65>

PREDICCIÓN DE MÚLTIPLES DESPEGUES EN LAS INTERFASES FIBRA-MATRIZ BAJO CARGA TRANSVERSAL USANDO EL PRINCIPIO DE MINIMIZACIÓN DE LA ENERGÍA TOTAL SUJETO A UNA CONDICIÓN EN TENSIONES

J. Pimentel¹; M. Muñoz-Reja,²; L. Távara¹; V. Mantič¹

¹Escuela Técnica Superior de Ingeniería, Universidad de Sevilla, Camino de los Descubrimientos, s/n. 41092 Sevilla

²Escuela Politécnica Superior, Universidad de Sevilla, c/ Virgen de África 7, 410011 Sevilla

*Persona de contacto: jpimentel@us.es

RESUMEN

En este trabajo se usa un algoritmo computacional basado en el Principio de Mínima Energía Total sujeto a una Condición en Tensiones (PMTE-SC, por sus siglas en inglés) para estudiar uno de los principales mecanismos de fallo en materiales compuestos: el despegue a lo largo de las interfases fibra-matriz ante una carga transversal. Se hace especial énfasis en el carácter simétrico y no simétrico del inicio y propagación de los despegues en términos de los parámetros de fractura de la interfase. Los modelos considerados incluyen: una fibra de vidrio inmersa en una matriz epoxi y dos fibras de vidrio cercanas entre ellas en una matriz epoxi, donde la fibra secundaria está orientada a 0, 30, 45 y 90 grados respecto a la fibra de referencia. El presente algoritmo usa una formulación bidimensional en deformación plana en el código de elementos finitos Abaqus, junto con scripts de Python que implementan un incremento cuasi estático de la carga que minimiza el funcional de la energía total. El comportamiento de la interfase fibra-matriz se modela usando una distribución de muelles elástico-lineales con capacidad de daño mediante una subrutina de material para Abaqus. Los resultados numéricos indican un buen acuerdo con estudios analíticos anteriores, que además permiten predecir la carga de fallo y la morfología del inicio y propagación de los despegues asociados a dicha carga.

PALABRAS CLAVE: PMTE-SC, grieta de interfase, LEBIM, materiales compuestos, ABAQUS, criterio acoplado, mecánica de la fractura finita.

ABSTRACT

A computational algorithm based on the Principle of Minimum Total Energy subjected to a Stress Condition (PMTE-SC) is used to study one of the main failure mechanisms in composites: debonding along the fibre-matrix interface under transverse loads. Emphasis is placed on the symmetric or non-symmetric character of the debond onset and growth in terms of the interface fracture parameters. The considered bimaterial systems include: (a) a glass fibre and an epoxy matrix; (b) two glass fibres where the secondary fibre is oriented at 0, 30, 45 and 90 degrees relative to the reference fibre and the applied load. The current algorithm uses a two-dimensional (2D) plane strain formulation in the finite element code Abaqus, together with Python scripts that perform a quasi-static time-stepping procedure that minimizes the total energy functional. The behaviour of the fibre-matrix interface is modelled using a damageable linear-elastic spring distribution programmed by means of a User Material subroutine for Abaqus. The numerical results indicate close agreement with previous analytical studies, allowing also the prediction of the failure load and the associated debond onset and propagation morphology.

KEYWORDS: PMTE-SC, interface crack, LEBIM, composite, ABAQUS, coupled criterion, finite fracture mechanics.

1. INTRODUCCIÓN

El estudio de la fractura de la interfase fibra-matriz en materiales compuestos reforzados con fibras (FRC, por sus siglas en inglés) es crucial para comprender y predecir su comportamiento mecánico. La interfase transmite la carga entre la fibra y la matriz, y su fallo puede influir significativamente en la resistencia y durabilidad de las piezas fabricadas en materiales compuestos. Bajo cargas transversales a las fibras, este mecanismo de fallo, denominado fallo interfibra o agrietamiento de la matriz (IFF, por sus siglas en inglés), típicamente se inicia como un despegue parcial en la interfase fibra-matriz de-

bido a la concentración de tensiones. Estos despegues o grietas se propagan a lo largo de la interfase y, bajo ciertas condiciones, pueden bifurcar hacia la matriz. A medida que estas grietas crecen y se unen, pueden formar una macro-grieta intralaminar e incluso el fallo de la matriz, deteriorando la integridad estructural del laminado. Los modos de fallo en materiales compuestos reforzados por fibras largas han sido ampliamente estudiados desde una perspectiva micromecánica, centrándose en una sola fibra inmersa en una matriz, como lo demuestran numerosos estudios analíticos, numéricos y experimentales [1, 2]. Sin embargo, pocos autores han abordado específicamente la nucleación de grietas en interfases fibra/matriz

inicialmente intactas. Algunas contribuciones relevantes a este tema que utilizan el Criterio Acoplado de Fractura Finita (CCFFM, por sus siglas anglosajonas) se pueden encontrar en [3, 4, 5].

En este artículo se implementa el PMTE-SC introducido en [6], que ofrece mejoras significativas sobre el CCFFM clásico, particularmente en su enfoque para abordar el problema de optimización y su capacidad para manejar escenarios con múltiples trayectorias de grietas. En [7] se aplicó un procedimiento numérico basado en el PMTE-SC a interfases Winkler para predecir el fallo en interfases frágiles. Sin embargo únicamente se estudiaron fallos de delaminación con una única trayectoria potencial de grieta. En el presente estudio, y por primera vez, se analiza el proceso de minimización del PMTE-SC para encontrar la configuración de fallo energéticamente más favorable para la nucleación de los despegues, considerando múltiples posibles caminos de grieta a partir de varios concentradores de tensiones.

2. NUCLEACIÓN Y PROPAGACIÓN DE GRIETAS EN MATERIALES COMPUESTOS EN MICRO-ESCALA

Las inclusiones rígidas y cilíndricas (o fibras) inmersas en una matriz más flexible bajo un estado de carga remota transversal a la fibra, actúan como concentradores de las tensiones en la interfase fibra-matriz, $\sigma(\theta)$ y $\tau(\theta)$, que representan las tensiones normales y tangenciales a la interfase, respectivamente. Generalmente, estas tensiones son definidas en relación a un sistema de coordenadas polares centrado en la inclusión, que tiene un radio r , tal como se ilustra en la Figura 1(a).

Un aspecto interesante de este problema es que se ha observado experimentalmente que ante ensayos de carga remota transversal de una fibra inmersa en una matriz epoxi, el despegue inicial de la grieta sucede de forma asimétrica, a pesar de la simetría en geometría y cargas que conserva este problema antes del fallo de la interfase. Este fenómeno es un ejemplo de la pérdida de simetría causada por la nucleación de grietas, y que ya ha sido estudiado anteriormente en [8]. Tal como se muestra en la Figura 1(a), en el estado inicial se asume una interfase fibra/matriz intacta. Posteriormente, cuando la matriz se somete a una carga remota y trasversal a la fibra, σ^∞ , en la dirección x , ocurre uno de los siguientes eventos: la aparición de un despegue simétrico o asimétrico (con relación al eje y que pasa por el centro de la inclusión), y que en la Figura 1(b) se muestra un caso de despegue no simétrico.

En este artículo, el PMTE-SC se emplea para predecir la nucleación del despegue en la interfase fibra/matriz y también analizar la optimización energética de la estrategia usada para la configuración asimétrica del daño para

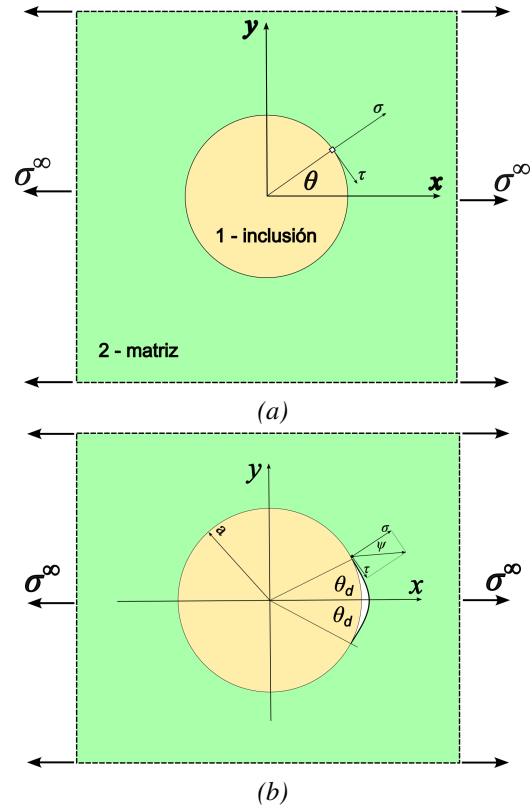


Figura 1: (a) El problema de una inclusión cilíndrica inmersa en una matriz infinita sometida a tensión transversal. (b) Aparición instantánea de un despegue asimétrico fibra/matriz, cuyo ángulo total es $2\theta_d$.

un caso de una única fibra inmersa en una matriz. Adicionalmente, se estudia un caso de dos inclusiones cilíndricas inmersas en una matriz infinita, representando una microestructura más realista de un material compuesto en comparación con el modelo de una sola fibra tal y como se representa en la Figura 2. Uno de los objetivos principales al estudiar esta configuración de dos fibras es comprender cómo la presencia, cercanía y orientación de una fibra vecina influyen en la carga de fallo necesaria para la nucleación del despegue y en la morfología de las grietas en comparación con el caso de una única fibra aislada además de analizar la estrategia usada para la optimización energética del PMTE-SC.

Para el análisis uni-fibra donde se estudia la configuración asimétrica del fallo, se ha tenido en cuenta un parámetro clave en el CCFFM, como se mostró previamente en [3]. Este parámetro es el número de fragilidad de la interfase, definido como $\gamma = \frac{1}{\sigma_c} \sqrt{\frac{G_{Ic} E^*}{r}}$. En esta expresión, σ_c es la resistencia a modo-I de la interfase, G_{Ic} es la energía crítica de fractura en modo-I, E^* corresponde al promedio armónico del módulo de Young efectivo de la fibra y la matriz definido en [3], y r denota el radio de la inclusión. Se debe mencionar que γ es un parámetro estructural, adimensional y que podría entenderse como una proporcionalidad a la raíz cuadrada de una longitud

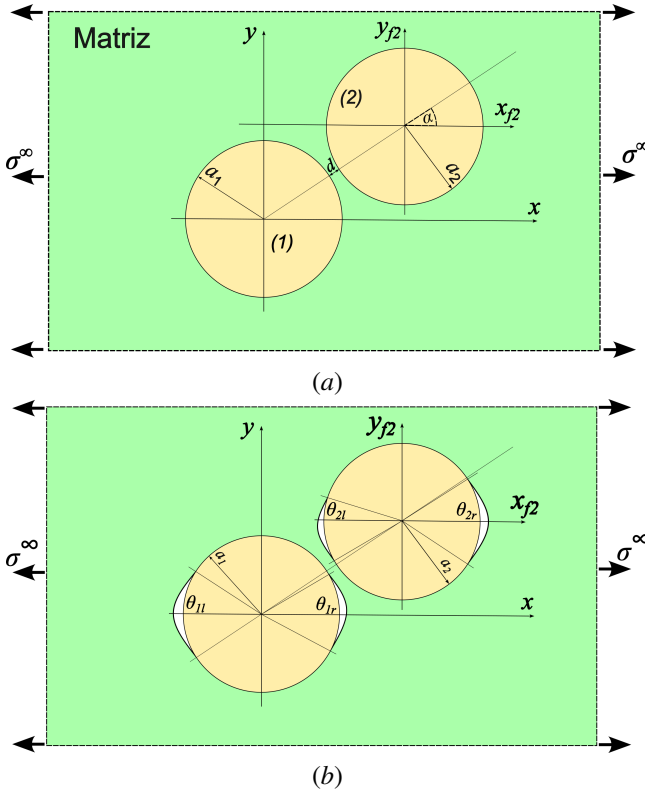


Figura 2: (a) Modelo de dos fibras inmersas en una matriz infinita. La fibra de referencia es (1) y la fibra secundaria es (2). El ángulo que forma la línea que une los centros de las fibras con el eje de carga transversal σ^∞ es α , el radio de las fibras primaria y secundaria, se define a_1 y a_2 , respectivamente, considerando $a_1 = a_2 = a$, y el parámetro d es la separación entre fibras, $d = 0.1a$. (b) Aparición instantánea de grietas de interfase en ambas fibras, con sus ángulos expresados con el siguiente cuádruple: $[\theta_{1l}, \theta_{1r}, \theta_{2l}, \theta_{2r}]$.

característica del material (similar a Irwin) dividida por la raíz cuadrada de una dimensión geométrica del problema. Para valores pequeños de γ , que pueden definir a una interfase como frágil, no hay gran diferencia en los índices de liberación de energía (ERR, por sus siglas en inglés) entre la fractura simétrica y la no simétrica, debido a que el fallo de la interfase está gobernado principalmente por el criterio tensional [3, 8]. Por otro lado, cuando γ es grande, se puede considerar la interfase como tenaz y el criterio energético es el que gobierna con mayor grado el comportamiento del daño, permitiendo entonces una fractura asimétrica como aparece en la Figura 1(b). Esta transición se atribuye a que ante la nucleación simultánea de dos despegues simétricos, se reduce la energía liberada en cada vértice de grieta durante la fractura, en contraste con el inicio asimétrico que es energéticamente mas favorable al ser mayor el índice de liberación de energía en cada vértice de grieta, tal como desarrolla teóricamente [8] y experimentalmente [5].

En este trabajo, se utiliza para los dos casos de estudio,

Tabla 1: Parámetros geométricos y materiales del sistema fibra/matriz (subíndices: 1 - fibra; 2 - matriz).

Sistema material: Vidrio/Epoxi	
Parámetro	Valor
r (μm)	7.5
E_1 (GPa)	70.8
ν_1	0.22
E_2 (GPa)	2.79
ν_2	0.33
E^* (GPa)	6.01
G_{1c} (J/m^2)	2.00
σ_c (MPa) uni-fibra	–
σ_c (MPa) bi-fibra	30

uni-fibra y bi-fibra, un sistema compuesto por fibra de vidrio inmerso en matriz epoxi cuyas propiedades geométricas y mecánicas se detallan en la Tabla 1. Para la configuración uni-fibra, se han considerado distintos valores de la resistencia de la interfase, σ_c , para correlacionar la influencia del número de fragilidad γ en la carga de fallo necesaria para la nucleación de grieta y en la morfología de grieta asociada. Sin embargo, para el problema bi-fibra, se ha considerado una $\sigma_c=30$ MPa.

3. EL PRINCIPIO DE MÍNIMA ENERGÍA TOTAL SUJETO A UNA CONDICIÓN EN TENSIONES

El Principio de Mínima Energía Total sujeto a una Condición en Tensiones (PMTE-SC), propuesto por Mantić en [6], es un enfoque alternativo a la formulación clásica del Criterio Acoplado de la Mecánica de la Fractura Finita (CCFFM) propuesto por Leguillon en [9]. Una comparación de ambos enfoques aplicados a interfases Winkler se presenta en [10]. En el marco teórico del PMTE-SC, la propagación de grieta se conceptualiza como un problema de minimización del funcional de energía del problema. Una grieta se nuclea ó avanza, por medio de la creación de nuevas superficies de fractura, si la variación de la energía total del sistema disminuye. Esto conlleva necesidad de minimizar el cambio de la energía potencial $\Delta\Pi$ y de la energía disipada ΔR en la formación de las nuevas superficies, entre otras energías que puedan estar involucradas. Por ejemplo, si utilizamos las configuraciones iniciales representadas en las Figuras 1(b) o 2(b), la superficie de rotura se puede expresar a través un incremento del ángulo de despegue, $\Delta\theta$, que hace referencia al avance finito del daño en las interfases del problema. También se puede expresar el cambio de la energía potencial para una carga específica, remota y transversal a la fibra, σ^∞ , como $\Delta\Pi(\sigma^\infty, \Delta\theta)$ y el cambio en la energía disipada por la creación de nuevas superficies de fractura como $\Delta R(\Delta\theta)$. Esta minimización se restringe por una condición en tensiones: el crecimiento de grieta solo ocurre cuando el módulo del vector tensión $\|(\sigma(\theta), \tau(\theta))\|$ en un punto no dañado de la interfase (representado por su

coordenada polar θ) a lo largo del potencial camino de fractura, supera el módulo del vector tensión crítico de la interfase $\|(\sigma_c(\theta, \psi), \tau_c(\theta, \psi))\|$, donde σ_c y τ_c son las tensiones normales y tangenciales críticas en θ , y ψ representa mixticidad del modo de fractura en ese mismo punto.

El PMTE-SC puede a-priori identificar el camino de fractura que sea energéticamente más favorable entre todas las posibles configuraciones establecidas. Esta nueva formulación permite una predicción más precisa del comportamiento de los despegues, en particular sobre escenarios donde la geometría del sólido o las condiciones de carga complican la determinación del camino óptimo de grieta usando la formulación clásica del CCFFM.

En la nucleación y propagación de grietas en la interfase circular (cilíndrica en 3D), asumiendo evolución cuasi-estática (sin considerar fuerzas de inercia) y una carga aplicada, el PMTE-SC se puede expresar como un problema de minimización restringido:

$$\min_{\Delta\theta \in A_\sigma} \Delta\Pi(\sigma^\infty, \Delta\theta) + \Delta R(\Delta\theta), \quad (1)$$

que define

$$\Delta\theta_{\text{crit}} = \arg \min_{\Delta\theta \in A_\sigma} \{\Delta\Pi(\sigma^\infty, \Delta\theta) + \Delta R(\Delta\theta)\}, \quad (2)$$

donde la minimización respecto a la fractura finita, $\Delta\theta$, se realiza sobre un conjunto de configuraciones de daño posibles A_σ que satisfacen el criterio tensional:

$$\theta \in A_\sigma \text{ solo si } \frac{\|(\sigma(\theta), \tau(\theta))\|}{\|(\sigma_c(\theta, \psi), \tau_c(\theta, \psi))\|} \geq 1.0. \quad (3)$$

Se debe tener en cuenta que la formulación del PMTE-SC se expresa como un problema de minimización restringida de la variación de la energía total del sistema para una carga específica aplicada σ^∞ . Sin embargo, gracias al control en carga adaptativo de bisección integrado en el algoritmo utilizado en este trabajo, se puede identificar la mínima carga de fallo, σ_f^∞ , aquella que produce la primera fractura finita $\Delta\theta_{\text{crit}}$.

En el caso de estudio uni-fibra, el proceso de optimización se analiza considerando cuatro posibles configuraciones (de inicio) del despegue mostradas en la Figura 3, mientras que en el caso de estudio del caso bi-fibra, se analizan once posibles configuraciones de inicio de despegues que se describen en la Tabla 2, todas ellas fundamentadas en el cumplimiento del criterio tensional en una interfase fibra-matriz sin daño. Lo anteriormente expuesto significa que cada estrategia de inicio de daño, D_n , forma un subconjunto incluido de los elementos de la interfase, A_σ , que cumplen con el criterio tensional. Específicamente, para el caso de estudio donde existen dos fibras, las estrategias de inicio de despegues que se indican en la Tabla 2, poseen un enfoque determinista, donde en cada caso, desde D_{n1} hasta D_{n10} , se desactiva el porcentaje

correspondiente de los elementos más tensionados dentro del conjunto de elementos que satisfacen el criterio tensional, A_σ .

El objetivo del algoritmo PMTE-SC, en ambos casos, es identificar la carga de fallo mínima, σ_f^∞ y la configuración (no trivial) de grieta asociada a dicha carga, $\Delta\theta_{\text{crit}}$.

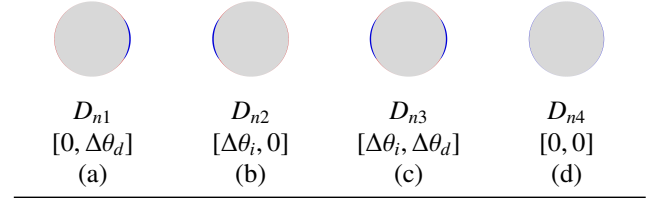


Figura 3: Configuraciones iniciales de despegues fibra-matriz, para el modelo uni-fibra de la Figura 1 : (a) despegue del polo derecho, (b) despegue del polo izquierdo, (c) despegue de ambos polos y (d) sin despegues.

Tabla 2: Estrategias de inicio de despegues fibra-matriz para el modelo de dos fibras inmersas en una matriz infinita (ver Figura 2).

Estrategia de inicio D_n	
	Porcentaje A_σ , (%)
D_{n1}	100
D_{n2}	90
D_{n3}	80
D_{n4}	70
D_{n5}	60
D_{n6}	50
D_{n7}	40
D_{n8}	30
D_{n9}	20
D_{n10}	10
D_{n11}	0

4. MODELOS NUMÉRICOS Y RESULTADOS

El algoritmo PMTE-SC se ha implementado en el código comercial de elementos finitos ABAQUS, ver [7]. Este algoritmo soluciona una serie de problemas elásticos lineales y cuasi-estáticos, sujetos a un control en carga adaptativo de bisección, incorporando una ley constitutiva lineal elástica de los muelles de interfase programada por medio de una subrutina de usuario UMAT, como se detalla en [11]. Los modelos numéricos emplean elementos cuadriláteros en deformación plana con un esquema de integración numérica de Gauss (4×4) completo. La geometría del modelo uni-fibra consiste en una inclusión circular de radio $7.5\mu\text{m}$ centrada en una matriz con una dimensión de $1000\mu\text{m} \times 1000\mu\text{m}$. El eje $y = 0$ se define como plano de simetría del modelo (ver el sistema de coordenadas de la Figura 1(a)) con el origen localizado en

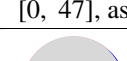
el centro de la fibra. Por tanto, solo se modela numéricamente la mitad superior de la geometría. Adicionalmente, el modelo de dos fibras (ver la Figura 2(a)) se compone de una matriz en forma de cuadrado con longitud de lado de $500\mu\text{m}$; la fibra primaria, cuyo origen se ubica en el baricentro del cuadrado, tiene radio de $7.5\mu\text{m}$; la fibra secundaria tiene igual radio que el de la fibra primaria ($a_1 = a_2 = a$), y se localiza a una distancia interfibra definida por $d = 0.1a$, formando el ángulo α con la dirección de la carga aplicada. Finalmente, en ambos modelos, la interfase se interpone en el contorno fibra/matriz para modelar una distribución continua de muelles que obedece a la formulación y ley constitutiva presentada en [12]. Esta interfase tiene un espesor de $h = 0.01\mu\text{m}$ y una rigidez en los muelles de $2025\text{ MPa}/\mu\text{m}$.

La influencia de los distintos valores de las propiedades de la interfase en la carga de fallo, σ_f^∞ , y en el ángulo de nucleación y detenimiento del despegue asociado, θ_c y θ_a , respectivamente, se presenta en la Tabla 3 para el modelo de una fibra. Se hace notar que en la Tabla 3 se sigue la misma nomenclatura que en la Figura 1, donde el θ_c y θ_a se indican a través de dos pares de números entre corchetes, los cuales representan el despegue por la izquierda y por la derecha. El semiángulo de despegue θ_c se incrementa cuando el valor de γ aumenta hasta alcanzar $\gamma = 2.0$, donde ocurre que la longitud de nucleación y detenimiento de grieta son iguales, $\theta_c = \theta_a$, indicando esto que la longitud de nucleación de grieta está siendo gobernada en mayor medida por el criterio energético cuando la interfase es más tenaz (es decir, para un elevado valor de γ). Es interesante notar que, para un número de fragilidad $\gamma = 0.5$, la predicción numérica de un fallo asimétrico requiere un mallado más fino y una menor tolerancia de bisección en el algoritmo de minimización. Esto se debe a que, en interfaces frágiles la fractura está predominantemente gobernada por el criterio tensional, resultando en diferencias energéticas sutiles entre la nucleación de grietas simétricas y asimétricas.

Los semiángulos de iniciación y del detenimiento del despegue predichos por las simulaciones numéricas, θ_c y θ_a , respectivamente, se grafican ante el número de fragilidad de la interfase γ , en la Figura 4, donde la diferencia en los semiángulos de inicio de la grieta entre los resultados numéricos obtenidos por el PMTE-SC y la curva semi-analítica (curva azul para un valor de γ obtenida en [3]) se debe a que el modelo semi-analítico emplea una formulación de interfase perfecta (es decir, infinitamente rígida), que conlleva al límite superior en la predicción de θ_c ; además, cuando γ alcanza aproximadamente un valor de 2.0, la longitud de nucleación es igual a la longitud de detención de la grieta, como lo muestra la meseta en $\theta_c \approx 47^\circ$.

Siguiendo la estrategia de la Tabla 2, se presentan las cargas de fallo adimensionales y la configuración óptima de nucleación de grieta en la Tabla 4 para cuatro ángulos

Tabla 3: Carga de fallo y el semi-ángulo de despegue y detenimiento asociado, para diferentes valores del número de fragilidad, γ . Nota: (s) es simétrico, (as) es asimétrico.

σ_c (MPa)	γ	$\frac{\sigma_f^\infty}{\sigma_c}$	Nucleación de grieta, θ_c (°)	θ_a (°)
75	0.5	0.6923	 [1.5, 0], as	[72.5, 0]
30	1.3	0.891	 [32, 0], as	[49, 0]
20	2.0	1.307	 [0, 47], as	[0, 47]
15	2.7	1.745	 [0, 47], as	[0, 47]

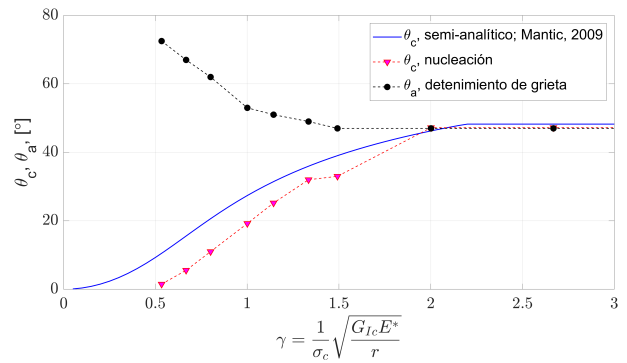


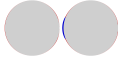
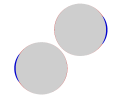
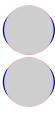
Figura 4: Semiángulos de nucleación y detenimiento de grieta, θ_c y θ_a , en función del número de fragilidad de la interfase, γ .

α de la fibra secundaria respecto al eje de carga remota transversal. La menor carga de fallo ocurre cuando ambos ejes de fibra coinciden con el eje de carga, con un solo despegue entre ellas, lo que indica que el algoritmo predice una fractura asimétrica respecto al eje vertical del centro de cada fibra. Para $\alpha = 90^\circ$ se necesita el mayor valor de carga externa para iniciar los despegues, que son simétricos al eje horizontal de cada fibra. Se produce un efecto de escudo en el campo de tensiones cuando el ángulo de la fibra secundaria se aleja de 90° .

5. CONCLUSIONES Y DISCUSIÓN

El procedimiento numérico basado en el Criterio Acoplado de la Mecánica de Fractura Finita (CCFFM), formulado como un problema de optimización utilizando el Prin-

Tabla 4: Carga de fallo y ángulos de nucleación del despegue, para distintas configuraciones de la fibra secundaria, determinadas por el ángulo interfibra α ; para todas las simulaciones $\sigma_c = 30$ MPa, $\gamma = 1.3$, y el incremento inicial de carga y la tolerancia de bisección han sido los mismos.

α (°)	σ_f^∞/σ_c	Nucleación de grieta, θ_c (°)
0	0.7293	[0, 0, 46, 0] 
30	0.8659	[66, 0, 0, 66] 
45	0.8983	[64, 0, 0, 64] 
90	0.9393	[64, 64, 64, 64] 

cipio de Mínima Energía Total sujeto a una Condición en Tensiones (PMTE-SC), implementado en el código de elementos finitos de Abaqus, se ha aplicado al problema de la predicción de nucleación del despegue en la interfase fibra/matriz sometida a una carga remota y transversal a la fibra, en una configuración uni-fibra y con dos fibras a una distancia fija, considerando el efecto del ángulo de la fibra secundaria sobre la carga de fallo y el camino de grieta. El procedimiento numérico predice el inicio del despegue no simétrico para valores suficientemente altos y pequeños del número de fragilidad γ y de la interfase, reproduciendo la morfología de la grieta observada en campañas experimentales para este tipo de especímenes.

AGRADECIMIENTOS

Este estudio ha contado con el apoyo del Ministerio de Ciencia e Innovación de España y del Fondo Europeo de Desarrollo Regional (PID2021-123325OB-I00).

REFERENCIAS

[1] M. Toya, “A crack along the interface of a circular inclusion embedded in an infinite solid,” *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 22, pp. 325–348, 1974.

[2] F. París, E. Correa, and V. Mantič, “Kinking of transverse interface cracks between fiber and matrix,” *Journal of Applied Mechanics*, vol. 74, pp. 703–716, 2007.

[3] V. Mantič, “Interface crack onset at a circular cylindrical inclusion under a remote transverse tension. Application of a coupled stress and energy criterion,” *International Journal of Solids and Structures*, vol. 46, pp. 1287–1304, 2009.

[4] I. G. García, M. Paggi, and V. Mantič, “Fiber-size effects on the onset of fiber-matrix debonding under transverse tension: A comparison between cohesive zone and finite fracture mechanics models,” *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 115, pp. 96–110, 2014.

[5] H. Girard, A. Doitrand, B. Koohbor, R. G. Rinaldi, N. Godin, D. Long, J. Bikard, and L. Trouillet-Fonti, “Numerical simulation of fiber-matrix debonding: Inverse identification of interface properties,” *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 286, p. 109254, 2023.

[6] V. Mantič, “Prediction of initiation and growth of cracks in composites. coupled stress and energy criterion of the finite fracture mechanics,” in *ECCM-16th Europ. Conf. on Composite Mater*, pp. 1–16, 2014.

[7] M. Muñoz-Reja, *Analytical and numerical predictions by LEBIM and FFM for interface cracks in composites and their joints*. PhD thesis, University of Seville, May 2021.

[8] I. G. García, V. Mantič, and E. Graciani, “Debonding at the fibre-matrix interface under remote transverse tension. one debond or two symmetric debonds?,” *European Journal of Mechanics - A/Solids*, vol. 53, pp. 75–88, 2015.

[9] D. Leguillon, “Strength or toughness? A criterion for crack onset at a notch,” *European Journal of Mechanics - A/Solids*, vol. 21, pp. 61–72, 2002.

[10] M. Muñoz-Reja, V. Mantič, and L. Távara, “Comparative analytical study of the coupled criterion and the principle of minimum total energy with stress condition applied to linear elastic interfaces,” *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, vol. 119, p. 103274, 2022.

[11] L. Távara, J. Reinoso, D. Castillo, and V. Mantič, “Mixed-mode failure of interfaces studied by the 2Dlinear elastic-brittle interface model: Macro and micro-mechanical finite-element applications incomposites,” *The Journal of Adhesion*, vol. 94, pp. 627–656, 2018.

[12] V. Mantič, L. Távara, A. Blázquez, E. Graciani, and F. París, “A linear elastic-brittle interface model: application for the onset and propagation of a fibre-matrix interface crack under biaxial transverse loads,” *International Journal of Fracture*, vol. 195, pp. 15–38, 2015.

HOMOGENEIZACIÓN EN LÁMINAS UNIDIRECCIONALES MEDIANTE MODELOS DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL BASADOS EN DATOS

B. Barriga Machado*, D. Infante García, A.R. Quiñonero Moya, J.E. Tarancón, E. Giner

Instituto Universitario de Ingeniería Mecánica y Biomecánica - I2MB, Departamento de Ingeniería Mecánica y de Materiales, Universitat Politècnica de València, Camino de Vera s/n, 46022 Valencia, España

* Persona de contacto: bbarmac@upv.es

RESUMEN

Este estudio presenta el desarrollo de una red neuronal convolucional diseñada para estimar propiedades elásticas dentro del plano transversal 2-3 de láminas con refuerzo unidireccional. A partir de imágenes la red predice el módulo de elasticidad transversal E_2 , el módulo de cizalladura G_{23} y el factor de amplificación de deformación f_{amp} . Estas propiedades dependen directamente de la geometría y distribución del refuerzo. Aunque existen modelos efectivos para configuraciones estructuradas como la ordenación cuadrada, su precisión disminuye con distribuciones aleatorias, comunes en la práctica. Para el entrenamiento de la red se utilizó una base de datos sintética generada mediante el método de elementos finitos basadas en homogenización, utilizando condiciones de contorno periódicas. Los datos incluyen elementos de volumen representativo con variaciones en fracción en volumen, diámetro y distribución aleatoria de fibras. Como resultado, este modelo estima con precisión las propiedades elásticas transversales del laminado reduciendo significativamente los tiempos de simulación y el coste computacional. Por último, se discuten las ventajas y limitaciones del enfoque propuesto, así como posibles mejoras y aplicaciones futuras en la caracterización de materiales compuestos.

PALABRAS CLAVE: Constantes elásticas, resistencia transversal, red neuronal convolucional.

ABSTRACT

In this study, a convolutional neural network is developed to estimate the elastic properties within the transverse 2-3 plane of unidirectionally reinforced laminates. The network estimates the transverse and shear modulus E_2 , G_{23} , and the strain amplification factor of the laminate f_{amp} through microstructural images. These properties depend directly on the geometry and distribution of the reinforcement. Although there are effective models for structured configurations, such as square arrangements, their accuracy decreases with random distributions, which is the typical distribution in real scenarios. A synthetic database generated by finite element method simulations using homogenization with periodic boundary conditions was employed to train the network. The data includes representative volume elements with variations in volume fraction, diameter, and random fiber distribution. As a result, the proposed model accurately estimates the laminate transverse properties while significantly reducing simulation time and computational costs. Finally, the advantages and limitations of the proposed approach are discussed, as well as improvements and future applications in composite material characterization.

KEYWORDS: Elastic constants, transverse strength, convolutional neural network.

1. INTRODUCCIÓN

Las ecuaciones propuestas por Halpin-Tsai [1] para el cálculo de las propiedades elásticas transversales en materiales compuestos son una de las metodologías más utilizadas por su simplicidad y aplicabilidad. Estas ecuaciones incluyen un factor de refuerzo que incorpora la influencia de la geometría, la distribución de las fibras y la fracción en volumen. Sin embargo, este factor ha sido determinado a partir de configuraciones idealizadas, como la disposición cuadrada de las fibras [2]. Estas configuraciones difieren de la realidad y no reflejan la

aleatoriedad de la disposición de las fibras, como sucede en la práctica dentro de un laminado. Trabajos como el de Giner et al. [3], han demostrado la variabilidad del factor de refuerzo influenciados principalmente por la fracción en volumen y la distribución aleatoria de las fibras.

Además de las propiedades elásticas, la resistencia transversal es otro factor a considerar en el diseño estructural ya que, incluso con una adecuada orientación de las capas, es prácticamente inevitable la introducción de cargas transversales. Esta resistencia suele ser menor

que la resistencia de la resina aislada, y está influenciada por las propiedades de la fibra y la matriz, la resistencia de la interfase, la presencia de defectos y la amplificación de deformaciones. Estudios experimentales han demostrado que este factor de amplificación puede ser muy acusado en zonas de empaquetamiento denso, zonas provocadas por la distribución no uniforme de las fibras. Este fenómeno se intensifica a medida que la fracción en volumen de fibra aumenta, generando una amplificación significativa de las deformaciones en la matriz, afectando directamente en la resistencia transversal del laminado [4].

Por otra parte, los métodos de homogeneización utilizan elementos de volumen representativo (RVE, por sus siglas en inglés) para considerar aspectos microestructurales como la fracción en volumen, la geometría y la distribución de las fibras [5,6]. A diferencia de los modelos analíticos, esta metodología requiere un proceso más complejo. La generación de RVEs realistas y la ejecución de múltiples simulaciones mediante el método de elementos finitos (FEM, por sus siglas en inglés) para distintos casos implican un alto coste computacional, lo que restringe su aplicabilidad en escenarios prácticos.

En este contexto, la inteligencia artificial (IA) se presenta como una alternativa para estimar las propiedades transversales en laminados. Estudios anteriores han utilizado modelos de IA en la caracterización de materiales heterogéneos, demostrando una alta precisión [7–10]. Las redes neuronales convolucionales (CNN, por sus siglas en inglés), muy utilizadas para tareas de visión artificial y reconocimiento de imágenes, pueden ser utilizadas para identificar los patrones y aspectos geométricos a partir de las imágenes microestructurales del laminado. Por lo que el enfoque basado en CNN ofrece ventajas en términos de rapidez de aplicabilidad, al solo requerir una imagen de la microestructura para estimar las propiedades transversales del laminado. Sin embargo, una de sus limitaciones es la necesidad de un gran volumen de datos para el entrenamiento, aunque esto puede solucionarse mediante la generación de datos sintéticos.

Esta investigación propone un enfoque basado en inteligencia artificial utilizando una CNN para la estimación de las constantes elásticas y el factor de amplificación de deformación transversal en laminados unidireccionales. Para el entrenamiento, se han generado datos sintéticos mediante simulaciones de elementos finitos, incorporando variabilidad en la distribución y tamaño de las fibras en un amplio rango de fracciones en volumen. Los resultados muestran una buena correlación entre las estimaciones del modelo y los resultados de las simulaciones FEM. Finalmente, se discuten las ventajas y limitaciones del enfoque propuesto, así como posibles mejoras y aplicaciones futuras en la caracterización de materiales compuestos.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

2.1. Generación de microestructuras

Para la generación de las microestructuras se utilizó un algoritmo de distribución aleatoria asegurando que las fibras cumplan las condiciones de contorno periódicas (PBC, por sus siglas en inglés). Además, se ha utilizado una distribución normal para el diámetro de fibras capturando la variabilidad que sucede comúnmente en la práctica. Los límites para el diámetro de fibra utilizados son 6.7 y 7.7 μm .

El tamaño del RVE es constante y se ha determinado en base al valor $\delta=L/r$, que relaciona el ancho del RVE (L) con el radio de fibra (r). Un valor de $\delta=30$ asegura un número mínimo de fibras para que la microestructura sea representativa [11]. Con un radio medio de fibra de 3.6 μm el tamaño del RVE utilizado es $108 \times 108 \mu\text{m}$. El rango de valores de fracción en volumen analizados está comprendido entre 0.4 y 0.7.

En total se han generado 10000 imágenes microestructurales, divididas en 6400 para entrenamiento, 1600 para validación y 2000 para testeo. En la Figura 1 se muestra un ejemplo de una de las microestructuras obtenidas.

RVE Microstructure - $V_f = 0.4$

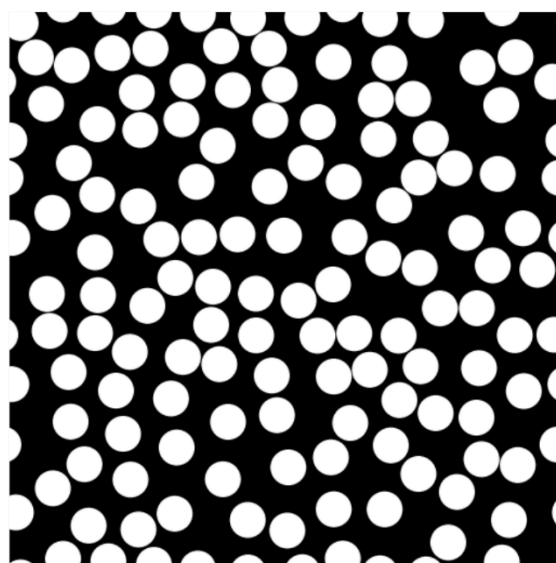


Figura 1. Ejemplo de una microestructura generada por el algoritmo para una fracción de volumen de 0.4.

2.2. Análisis numérico FEM

La resolución del problema de homogeneización se ha realizado mediante elementos finitos con las librerías de la plataforma FEniCS. Se utilizó la librería Gmsh para el mallado de las microestructuras con elementos triangulares de primer orden con un tamaño de 0.5 μm , obtenido a partir de un análisis de sensibilidad de malla. En el mallado se ha asegurado la correspondencia entre

el número de nodos y su posición en lados opuestos del RVE para cumplir con las PBCs.

Se ha considerado un comportamiento isótropo tanto para la matriz como para las fibras con adhesión perfecta en su interfaz. Se han utilizado las siguientes propiedades de los constituyentes $E_f = 250$ GPa, $\nu_f = 0.30$, $E_m = 5$ GPa, $\nu_m = 0.38$ que corresponden a valores típicos para fibras de carbono y resina epoxi, respectivamente.

En base a la metodología propuesta en [12] el cálculo de las propiedades transversales aparentes del medio homogeneizado equivale a resolver el problema definido en el sistema de la expresión (1) sobre el dominio Ω o RVE.

$$\begin{cases} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = 0, & \text{en } \Omega \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}(\mathbf{y}) : \boldsymbol{\varepsilon}, & \text{para } \mathbf{y} \in \Omega \\ \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{E} + \nabla^s \mathbf{u}, & \text{en } \Omega \\ \mathbf{u}, & \text{es } \Omega - \text{periódico} \\ \mathbf{T} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}, & \text{es } \Omega - \text{antiperiódico} \end{cases} \quad (1)$$

El sistema cumple el equilibrio mecánico dentro del RVE y toma en cuenta las propiedades de los constituyentes en el tensor de elasticidad heterogéneo $\mathbf{C}(\mathbf{y})$ que varía en función de la posición microscópica $\mathbf{y}$.

A partir de una deformación macroscópica $\mathbf{E}$ impuesta el problema se resuelve para determinar el campo de desplazamiento periódico $\mathbf{u}$. La deformación microscópica $\boldsymbol{\varepsilon}$ que se compone del tensor $\mathbf{E}$ y de las fluctuaciones periódicas debidas a la heterogeneidad del material, es igual, en promedio, a la deformación macroscópica impuesta $\mathbf{E}$. De igual forma se define la tensión macroscópica como el promedio volumétrico de la tensión microscópica ($\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \boldsymbol{\Sigma}$). Se obtiene entonces una relación lineal entre la deformación impuesta y la tensión promedio resultante, como se indica en la ecuación (2).

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{C}_{hom} : \mathbf{E} \quad (2)$$

donde $\mathbf{C}_{hom}$ es la matriz de rigidez reducida en deformación plana, indicada en la expresión (3). Para determinar las componentes de esta se han utilizado tres casos de deformación distintos: una deformación unitaria en la dirección 2 ($\varepsilon_2 = 1$), una deformación unitaria en dirección 3 ($\varepsilon_3 = 1$), y una deformación angular pura en el plano 2-3 ($\gamma_{23} = 1$).

$$\mathbf{C}_{hom} = \begin{bmatrix} C_{22} & C_{23} & 0 \\ C_{23} & C_{33} & 0 \\ 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \quad (3)$$

De esta matriz se puede extraer directamente el valor del módulo de cizalladura transversal $G_{23} = C_{66}$. Mientras que para determinar el módulo de elasticidad transversal E_2 es necesario calcular la matriz de flexibilidad reducida $\boldsymbol{\beta}$ indicada en la ecuación (4), y de las constantes del

laminado en la dirección de las fibras E_1 y ν_{12} obtenidas de la regla de las mezclas indicadas en las ecuaciones (5) y (6) respectivamente.

$$\boldsymbol{\beta} = \mathbf{C}_{hom}^{-1} = \begin{bmatrix} \beta_{22} & \beta_{23} & 0 \\ \beta_{23} & \beta_{33} & 0 \\ 0 & 0 & \beta_{66} \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$E_1 = E_f V_f + E_m (1 - V_f) \quad (5)$$

$$\nu_{12} = \nu_f V_f + \nu_m (1 - V_f) \quad (6)$$

El módulo de elasticidad E_2 se obtiene a través de la ecuación (7).

$$E_2 = \left(\beta_{22} + \frac{\nu_{12}^2}{E_1} \right)^{-1} \quad (7)$$

Para el caso del factor de amplificación se ha considerado el primer caso de deformación, donde $\varepsilon_2 = 1$. El factor de amplificación se define como la razón entre la deformación principal máxima y la deformación nominal, indicado en la ecuación (8).

$$f_{amp} = \frac{\varepsilon_{max}}{\bar{\varepsilon}} \quad (8)$$

donde $\bar{\varepsilon} = \varepsilon_2 = 1$, por lo que el factor de amplificación es directamente la deformación principal máxima. En la Figura 2 se presenta un ejemplo del campo de deformaciones principales para una microestructura con $V_f = 0.4$, donde se puede observar como las deformaciones son máximas en la matriz en zonas de empaquetamiento denso.

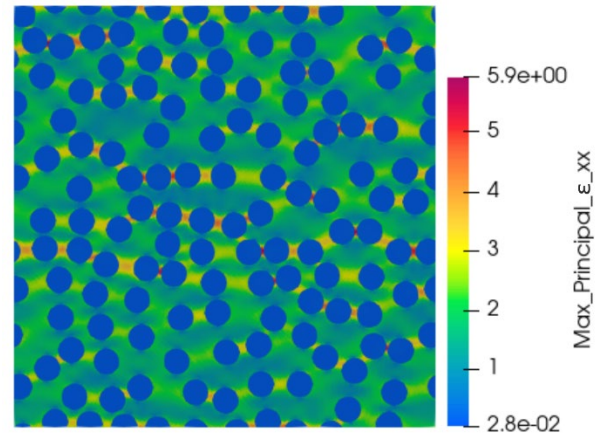


Figura 2. Deformación principal máxima para una deformación unitaria impuesta en dirección 2 de una microestructura con $V_f = 0.4$ donde $f_{amp} = 5.9$.

2.3. Entrenamiento de la red neuronal

El modelo utilizado consta de una arquitectura típica de CNN. En la Figura 3 se presenta un esquema de la CNN utilizada, donde se intercalan capas de convolución con capas de *pooling* y *dropout* para evitar el sobreajuste de

los datos. En la parte final se ensamblan todos los mapas de activación en capas densas, donde todas las neuronas están conectadas entre sí. La salida de la red son las propiedades elásticas E_2 , G_{23} y el factor de amplificación de deformación f_{amp} .

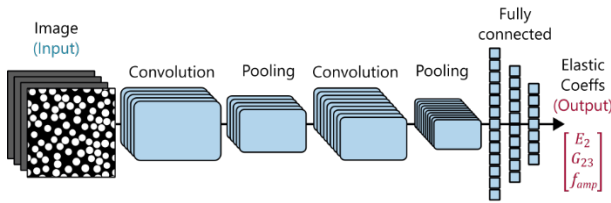


Figura 3. Esquema de la arquitectura de la red neuronal convolucional utilizada.

La red ha sido entrenada durante 50 épocas con el error cuadrático medio (MSE, por sus siglas en inglés) como función de pérdida.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La convergencia del modelo se ha verificado con la evolución de la función de pérdida a través de las épocas de entrenamiento para el conjunto de entrenamiento y de validación. En la Figura 4 se muestra esta evolución y como la función de pérdida se estabiliza a medida que avanza el entrenamiento, indicando que la red está mejorando su capacidad de ajuste a los datos. En este caso se ha utilizado un monitoreo para detener el entrenamiento una vez que ya no existe una mejora dentro del conjunto de validación.

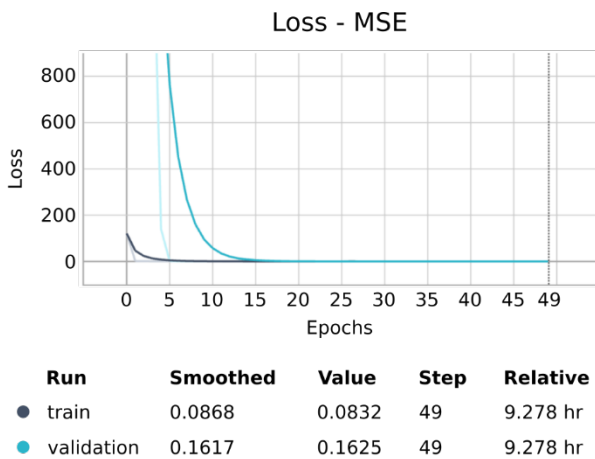


Figura 4. Evolución de la función de pérdida MSE durante el entrenamiento.

Para evaluar el desempeño de la red, se compararon las estimaciones de E_2 , G_{23} y f_{amp} con los valores obtenidos mediante el análisis numérico de homogenización para el grupo de testeo, es decir el subconjunto de datos que no ha visto la red durante el entrenamiento. En la Figura 5 se presenta un diagrama de dispersión para cada propiedad calculada. Esta gráfica resume los principales indicadores de desempeño y proporciona una visualización clara del rendimiento del modelo.

Para el caso de las propiedades elásticas E_2 y G_{23} el modelo logra un ajuste preciso, con la mayoría de los puntos alineados con la recta de estimación ideal y un error porcentual absoluto medio (MAPE) por debajo del 5%. En contraste, el factor de amplificación presenta una correlación menor y una mayor dispersión de los datos, alcanzando un error promedio del 8,44%. Esto sugiere que la red neuronal reconoce con mayor facilidad los patrones relacionados con las constantes elásticas cuyo comportamiento es más global, a diferencia del factor de amplificación, fuertemente condicionado por las zonas locales de empaquetamiento denso. En general los resultados se mantienen dentro de un rango de error aceptable, lo que respalda la efectividad general del modelo.

La metodología utilizada en este trabajo ofrece varias ventajas, como la disminución del coste computacional. A diferencia del método de homogeneización, que implica resolver un problema de FEM para cada microestructura, una red neuronal entrenada permite realizar predicciones en un tiempo significativamente menor.

Por ejemplo, para el caso del conjunto de testeo que consta de 2000 microestructuras el problema de homogeneización ha tardado aproximadamente 12 horas, mientras que a la CNN le ha tomado 36 segundos realizar las estimaciones sobre este conjunto. Esto implica una reducción significativa en el tiempo de cómputo de hasta 3 órdenes de magnitud.

Otra ventaja es la flexibilidad y adaptabilidad de la red neuronal, configurándola para distintos materiales y diferentes distribuciones de fibras, variando el tamaño del RVE o incluso para ser validada mediante imágenes microestructurales reales. Se elimina la necesidad de resolver el problema a través de simulaciones FEM, permitiendo estimar directamente las propiedades transversales a partir de la imagen de la microestructura.

Aunque la metodología presentada en este trabajo ofrece buenos resultados, investigaciones futuras pueden abordar las siguientes limitaciones. Primero, la extensión del modelo para trabajar con microestructuras derivadas de imágenes experimentales, puesto que actualmente el entrenamiento se ha realizado únicamente con datos sintéticos. La validación con imágenes reales facilitaría la evaluación de su aplicabilidad en situaciones prácticas. Además, la incorporación de la interfase entre fibra y matriz y el comportamiento no lineal de la matriz en el modelo de elementos finitos permitiría obtener estimaciones más precisas de las propiedades transversales. Por último, la optimización de la arquitectura de la red y el ajuste de sus hiperparámetros podrían incrementar la precisión y capacidad de generalización del modelo.

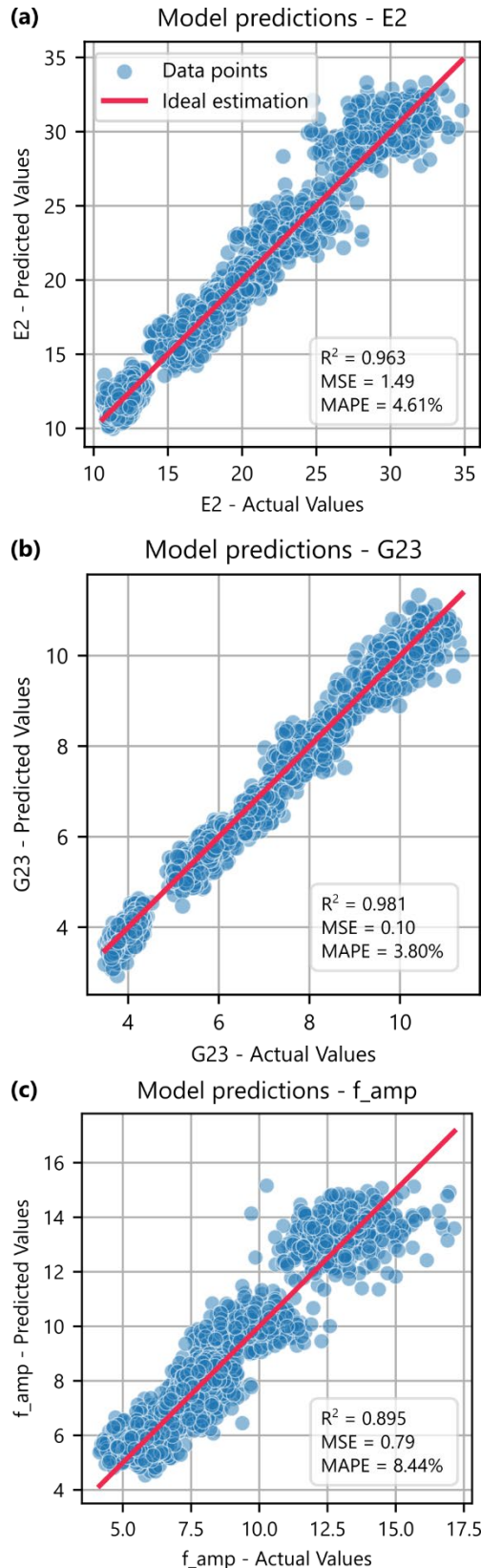


Figura 5. Diagramas de dispersión para los valores estimados por la red neuronal frente a los valores obtenidos mediante FEM para el módulo de rigidez transversal E_2 (a), el módulo de cizalladura G_{23} (b), y el factor de amplificación f_{amp} (c).

4. CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos demuestran que la estimación de las propiedades transversales en laminados se puede realizar a través de modelos de IA e imágenes microestructurales. A partir de este estudio, se pueden extraer las siguientes conclusiones:

- La red neuronal convolucional identifica patrones en la distribución de fibras dentro de la microestructura asociados con las propiedades transversales objetivo del material.
- Se confirma que la disposición aleatoria de las fibras influye en las propiedades elásticas de la lámina y en el factor de amplificación de deformación, que alcanza valores máximos en las zonas de empacamiento denso.
- El uso de una CNN entrenada disminuye los tiempos de cómputo significativamente frente a los métodos de homogeneización basados en FEM. Elimina la necesidad de generación de mallas y la definición del problema, al requerir únicamente una imagen microestructural del laminado.
- La estimación de las propiedades transversales a través de la CNN no depende de factores geométricos necesarios en los modelos analíticos, que están definidos principalmente para configuraciones estructuradas.
- El uso de datos sintéticos posibilita el análisis dentro de un amplio rango de configuraciones, y evita la necesidad de extraer grandes volúmenes de datos de forma experimental requeridos para la fase de entrenamiento de un modelo de IA.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer la financiación recibida a través del proyecto PID2023-151610OB-C22 financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y FEDER, UE. También desean agradecer al Programa de Ayudas de Investigación y Desarrollo (PAID-01-23) de la Universitat Politècnica de València.

REFERENCIAS

- [1] J. C. Halpin. *Primer on Composite Materials Analysis*, second ed, CRC press, Florida (1992)
- [2] R. M. Jones. *Mechanics of Composite Materials*, second ed, CRC press, Philadelphia (1999)
- [3] E. Giner, A. Vercher, M. Marco, C. Arango. *Estimation of the reinforcement factor ξ for calculating the transverse stiffness E_2 with the*

Halpin–Tsai equations using the finite element method, Composite Structures, 124 (2015) 402-408

- [4] E. Giner, J. Albelda, *Análisis y diseño con materiales compuestos*, Universidad Politécnica de Valencia Servicio de Publicaciones, Valencia (1998)
- [5] D. Somer, D. Perić, E. A. De Souza-Neto, W.G. Dettmer, *On the characterisation of elastic properties of long fibre composites using computational homogenisation*, Computational Materials Science, 83 (2014) 149-157
- [6] F. Huang, X. Pang, F. Zhu, S. Zhang, Z. Fan, X. Chen, *Transverse mechanical properties of unidirectional FRP including resin-rich areas*, Computational Materials Science, 198 (2021) 110701
- [7] P. V. Divakarraju, N. Mishra, V. Pandurangan, M. Nithyadharan, *Machine learning based inverse framework for predicting the transverse and shear modulus of carbon fiber*, Computational Materials Science, 230 (2023) 112518
- [8] M. Li, S. Li, Y. Tian, Y. Fu, Y. Pei, W. Zhu, Y. Ke, *A deep learning convolutional neural network and multi-layer perceptron hybrid fusion model for predicting the mechanical properties of carbon fiber*, Materials & Design, 227 (2023) 111760
- [9] M. V. Pathan, S. A. Ponnusami, J. Pathan, R. Pitongsawat, B. Erice, N. Petrinic, V. L. Tagarielli, *Predictions of the mechanical properties of unidirectional fibre composites by supervised machine learning*, Scientific Reports, 9 (2019) 13964
- [10] P. Gavallas, G. Stefanou, D. Savvas, C. Mattrand, J. M. Bourinet, *CNN-based prediction of microstructure-derived random property fields of composite materials*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 430 (2024) 117207
- [11] C. McCarthy, T. Vaughan, *Micromechanical failure analysis of advanced composite materials*, In Numerical modelling of failure in advanced composite materials, Woodhead Publishing (2015) pp. 379-409
- [12] J. Bleyer, *Numerical Tours of Computational Mechanics with FEniCSx*, v0.2, Zenodo, 25 Sept. 2024, doi:10.5281/zenodo.13838486.

SELECCIÓN DE CRITERIOS DE ROTURA EN ENTALLAS EN U MEDIANTE ESTADÍSTICA BAYESIANA

Javier Gómez^{1*}, Daniel Araya¹

¹ ADVANCED MATERIAL SIMULATION SL. c/Elcano 14 1 derecha. Bilbao. Bizkaia, Spain

* Persona de contacto: javier.gomez@amsimulation.com

RESUMEN

El estudio de la rotura de probetas entalladas en U se aborda habitualmente mediante la postulación de criterios o teorías de rotura como herramientas para predecir la carga máxima que puede soportar este tipo de geometría. El objetivo del presente trabajo es resolver esta incertidumbre aplicando estadística bayesiana para seleccionar el mejor criterio de rotura que permita explicar un conjunto de resultados experimentales. Como base de datos de resultados de rotura de probetas entalladas en forma de U, se ha tomado una extensa serie de ensayos realizados en PMMA a -60°C que incluye diferentes valores del radio de la entalla, de la profundidad, así como diversos tamaños y tipos de sollicitación. El programa experimental incluye además resultados de rotura en modo I y modo mixto. Se han comparado diversos criterios, incluyendo la teoría de las distancias críticas basada en máxima tensión y tensión media, la teoría de la densidad de energía media crítica, la mecánica de fractura finita, la teoría de la fisura cohesiva con curvas de ablandamiento lineal y rectangular, así como un criterio fenomenológico. Esta metodología ha permitido identificar el mejor criterio de rotura que predice la rotura de sólidos entallados en U en PMMA a -60°C.

PALABRAS CLAVE: Entallas en U, criterios de rotura, teorema de Bayes.

ABSTRACT

The study of the fracture of U-notched specimens is typically assessed through the postulation of failure criteria or damage theories as a methodology to predict the maximum load that can be supported by this type of geometry. The goal of this research is to apply Bayesian Statistics to select the best fracture criterion that can explain a set of experimental data. As a database of fracture results, a series of tests conducted on PMMA at -60°C was used, including U-notched specimens with different values of the notch radius and depth, as well as various sizes and loading types. The experimental program also includes fracture results in mode I and mixed mode. Several criteria have been compared, including the theory of critical distances based on maximum stress and mean stress, the theory of critical mean energy density, finite fracture mechanics, the cohesive zone model with linear and rectangular softening curves, as well as a phenomenological criterion. This methodology allows the identification of the best fracture criterion based on a set of experimental results.

KEYWORDS: U-notches, failure criteria, Bayesian analysis.

1. INTRODUCCIÓN

El estudio experimental y numérico de la rotura de componentes entallados en forma de U o V es una técnica ampliamente adoptada para evaluar la integridad estructural de componentes sometidos a sollicitaciones elevadas o fatiga, así como para optimizar diseños y minimizar el riesgo de fallo. El análisis de la rotura de probetas con entalla en forma de U y diferentes radios de entalla ha demostrado ser útil para validar la aplicabilidad de criterios de fallo, identificar modos de rotura y determinar propiedades del material, como la resiliencia o la tenacidad a la fractura [1] [2].

Se han propuesto un gran número de criterios y teorías de rotura para predecir la carga máxima que resisten los sólidos entallados, entre los que se encuentran los criterios de rotura de máxima tensión [3], tensión media [4], densidad de energía crítica media [5] y teorías como la Mecánica de Fractura Finita [6,7] o el modelo cohesivo [8]. Gomez et al. [9] analizaron la aplicabilidad de los criterios de fallo al estudio de entallas en U en materiales elásticos lineales. Propusieron una formulación no dimensional para resumir los resultados experimentales de probetas con entallas en U de 18 materiales cerámicos y un polímero elástico lineal en una única banda. Se compararon y evaluaron los criterios anteriores. Todos los criterios lograron explicar los datos experimentales con una precisión relativamente equivalente y fueron

reformulados en expresiones matemáticas similares. Los autores también propusieron un nuevo criterio de fallo fenomenológico que se ajustó a los resultados experimentales [9].

En todos los casos anteriores, el criterio de rotura se postuló sin una justificación exhaustiva. El presente documento propone realizar la selección del criterio aplicando estadística bayesiana. Este método se basa en el Teorema de Bayes, que actualiza una distribución de probabilidad inicial, denominada a priori, en función de los datos experimentales para obtener una distribución de probabilidad revisada, llamada a posteriori. La estadística bayesiana ha sido aplicada recientemente para estudiar la rotura de probetas entalladas en U de poliamida 12 [10] determinando la incertidumbre obtenida al calcular la tenacidad de fractura del material a partir de resultados experimentales de sólidos entallados.

El objetivo del presente trabajo es aplicar la estadística bayesiana para seleccionar el criterio de rotura que mejor explica los resultados experimentales de ensayos de rotura de probetas de PMMA ensayadas a -60 °C. En los siguientes apartados se revisan los criterios y teorías de rotura propuestos, así como su formulación. Se recopilan los resultados de rotura de PMMA a -60 °C producida por entallas en U. Se formula un modelo estadístico bayesiano y se obtiene el modelo que mejor predice los resultados experimentales.

2. CRITERIOS DE ROTURA

El estudio de la rotura de las entallas en forma de U en materiales elástico-lineales se puede plantear de forma similar al de una fisura. Dentro de la Mecánica de Fractura Elástica Lineal (MFEL), la rotura de un sólido fisurado se formula a partir del criterio de Irwin, según el cual la grieta se propaga cuando el factor de intensidad de tensiones alcanza un valor crítico. La base del criterio de Irwin radica en la singularidad del campo de tensiones cerca de la raíz de la fisura [2]. En los sólidos con entallas en U, el campo de tensiones alrededor de la raíz de la entalla carece de singularidad, pero puede aproximarse mediante la expresión de Creager y Paris [11]. Esta formulación se basa en el factor de intensidad de tensiones de la entalla. Se puede formular un criterio de rotura según el cual la carga máxima se obtiene cuando el factor de intensidad de tensiones de la entalla alcanza un valor crítico que depende del material y del radio.

$$K_{UC} = K_{UC}(\text{material}, R) \quad (1)$$

Gómez y Elices [9, 12] examinaron la validez de la expresión (1) en una variedad de materiales elásticos lineales, incluyendo cerámicas y PMMA a -60°C. Su investigación reveló que, al considerar una formulación adimensional basada en la tenacidad a la fractura y la longitud característica del modelo cohesivo, se obtiene

una función con una débil dependencia de las propiedades del material. Además, los autores demostraron que varios criterios de rotura, como la tensión máxima, la tensión media, la densidad de energía de deformación media, la Mecánica de Fractura Finita y el modelo de zona cohesiva, producen resultados similares cuando sus respectivos parámetros se calculan utilizando los límites de las entallas en U. Asimismo, todos estos criterios fueron reestructurados en expresiones concisas, facilitando su aplicación para predecir cargas de fractura. A continuación, se revisan las expresiones obtenidas.

El criterio de rotura basado en la tensión media (TCD-1), [13], establece que la iniciación de la rotura ocurre cuando el valor promedio de la tensión circunferencial dentro de una distancia crítica cerca de la raíz de la entalla alcanza un valor crítico. Combinando este criterio con la expresión de Creager y Paris, se obtiene la siguiente expresión:

$$K_{UC} = K_{IC} \sqrt{1 + \frac{\pi R}{4 l_{ch}}} \quad (2)$$

Donde

$$l_{ch} = \left(\frac{K_{IC}}{\sigma_c} \right)^2 \quad (3)$$

El criterio de máxima tensión máxima (TCD-2) [14], establece que la iniciación de la rotura ocurre cuando la tensión circunferencial máxima, que ocurre a una distancia crítica de la entalla, alcanza un valor máximo. Su expresión correspondiente es:

$$K_{UC} = K_{IC} \sqrt{1 + \frac{\pi R}{4 l_{ch}} - \frac{(5l_{ch} + 8\pi R)\pi R}{4(l_{ch} + 2\pi R)^2}} \quad (4)$$

Lazzarin y Zambardi introdujeron un criterio de rotura basado en la densidad de energía media (CSED) [15]. La expresión correspondiente del factor de intensidad de tensiones de la entalla puede encontrarse en [9]:

$$K_{UC} = K_{IC} \sqrt{1 + \frac{\pi R}{4 l_{ch}} - \frac{4Hl_{ch} - \pi HR + 2R}{4Hl_{ch}}} \quad (5)$$

Donde la función H fue tabulada por Lazzarin y Berto [16].

La mecánica de fractura finita (MFF), propuesta por Leguillon [17], combina dos condiciones que deben cumplir la tensión principal media cerca de la raíz de la entalla y la tasa de liberación de energía de una fisura virtual. Su expresión queda [9]:

$$K_{UC} = K_{IC} \sqrt{1 + \frac{\pi R}{4 l_{ch}} + \frac{\frac{4.5}{2.24^2} - 1 - \frac{\pi R}{4 l_{ch}} + \left(\frac{\pi R}{4 l_{ch}} + 1 \right) \frac{R}{2.284 l_{ch}} \ln \left(1 + \frac{2.284 l_{ch}}{R} \right)}{1 - \frac{R}{2.284 l_{ch}} \ln \left(1 + \frac{2.284 l_{ch}}{R} \right)}} \quad (6)$$

El Modelo de Zona Cohesiva [18] establece que el proceso de daño se inicia cuando la tensión principal máxima alcanza un valor crítico. En ese punto, aparece una grieta cohesiva orientada perpendicularmente a la dirección de la tensión principal. La grieta cohesiva transfiere tensión entre sus labios en función del desplazamiento de apertura. La correlación entre la tensión y el desplazamiento es una función del material, denominada curva de ablandamiento. Las expresiones correspondientes a curva de ablandamiento lineal y curva de ablandamiento rectangular son [9]:

Curva de ablandamiento lineal (CZM-L)

$$K_{UC} = K_{IC} \sqrt{1 + \frac{\pi R}{4 l_{ch}} + \frac{-0.79834 \frac{R}{l_{ch}} - 2.1658 \left(\frac{R}{l_{ch}}\right)^2 + 19.501 \left(\frac{R}{l_{ch}}\right)^3 - 48.167 \left(\frac{R}{l_{ch}}\right)^4}{1 + 117.31 \left(\frac{R}{l_{ch}}\right)^4}} \quad (7)$$

Curva de ablandamiento rectangular (CZM-R)

$$K_{UC} = K_{IC} \sqrt{1 + \frac{\pi R}{4 l_{ch}} + \frac{18.3744 \frac{R}{l_{ch}} - 9.6478 \left(\frac{R}{l_{ch}}\right)^2 + 2.7998 \left(\frac{R}{l_{ch}}\right)^3 + 0.1119 \left(\frac{R}{l_{ch}}\right)^4}{15.2276 + \left(\frac{R}{l_{ch}}\right)^4}} \quad (8)$$

Además de los criterios de fallo, se pueden proponer formulaciones fenomenológicas. Gómez et al [12] recopilaban datos de rotura de alúmina, nitrato de silicio, sílice monocristalina y policristalina, circonia parcialmente estabilizada con magnesia, circonia parcialmente estabilizada con itria, circonia tetragonal completamente estabilizada con itria y PMMA a -60°C . Los puntos experimentales se ajustaron a la siguiente expresión (Phen):

$$\frac{K_{UC}}{K_{IC}} = \sqrt{\frac{1 + 0.47392(R/l_{ch}) + 2.1382(R/l_{ch})^2 + \pi/4(R/l_{ch})^3}{1 + (R/l_{ch})^2}} \quad (9)$$

3. RESULTADOS EXPERIMENTALES

El material seleccionado para realizar el estudio ha sido PMMA, un polímero semi transparente cuyo comportamiento mecánico a baja temperatura (-60°C) es elástico lineal hasta rotura. Los resultados se han tomado de trabajos anteriores de los autores [19-21]. El programa experimental incluyó ensayos de caracterización del material (ensayos de tracción simple y de tenacidad), ensayos de rotura en modo I de probetas entalladas y ensayos de rotura en modo mixto.

Los ensayos en modo I se realizaron bajo dos tipos de sollicitación: flexión en tres puntos y tracción en probeta entallada. Las geometrías estudiadas incluyeron distintos radios (0.2 mm, 0.3 mm, 0.5 mm, 1.0 mm, 1.5 mm, 2.0

mm y 4.0 mm), y profundidades de entalla ($a/W = 0.18$ y $a/W = 0.5$). El espesor en todos los casos fue 14 de mm.

En los ensayos en modo mixto se varió el radio de la entalla (0.2 mm, 0.3 mm, 0.5 mm, 1.0 mm, 2.0 mm y 4.0 mm) y el grado de biaxialidad se consideró 9 valores diferentes. Realizando un total de 252 ensayos de rotura de PMMA a baja temperatura.

Los valores de rotura de todos los ensayos de probetas entalladas aparecen recogidos en la figura 1. Se observa como todos se agrupan en torno a una curva, validando de forma experimental la expresión 1.

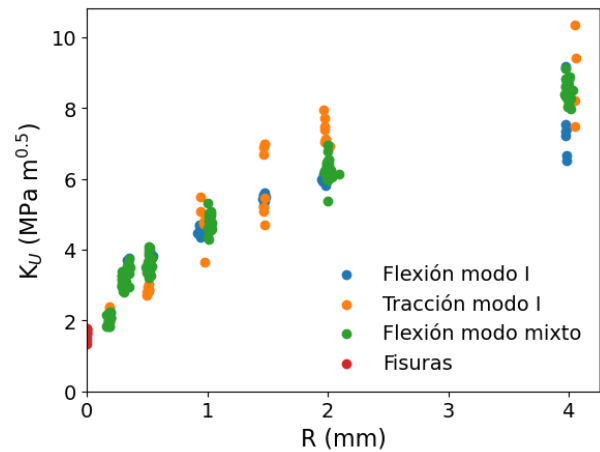


Figura 1. Resultados experimentales de los factores de intensidad de tensiones de entalla en PMMA a -60°C .

Tabla 1. Tipología y número de ensayos analizados

Tipología	Número ensayos
Flexión modo I	52
Tracción modo I	37
Flexión modo mixto	146
Fisuras	11
Tracción uniaxial	6

4. MODELO ESTADÍSTICO

La inferencia bayesiana es un marco estadístico que permite el análisis y cuantificación de incertidumbre a partir de datos observados y la incorporación del conocimiento previo [22]. Utilizando el teorema de Bayes, la inferencia bayesiana facilita el ajuste de parámetros y el cálculo de su incertidumbre.

El teorema de Bayes proporciona la probabilidad a posteriori de los parámetros $P(K_{IC}, \sigma_c | data)$ en función de la probabilidad a priori $P(K_{IC}, \sigma_c)$, de la verosimilitud $P(data | K_{IC}, \sigma_c)$, y de la verosimilitud marginal, $P(data)$.

$$P(K_{IC}, \sigma_c | data) = \frac{P(data | K_{IC}, \sigma_c) P(K_{IC}, \sigma_c)}{P(data)} \quad (10)$$

Dado que los parámetros K_{IC}, σ_c , no influyen en el denominador y la expresión final está normalizada a 1, solo es necesario calcular los dos términos del numerador

$$P(K_{IC}, \sigma_c | data) \propto P(data | K_{IC}, \sigma_c) P(K_{IC}, \sigma_c) \quad (11)$$

Los datos experimentales son los factores de intensidad de tensiones de entalla en el momento de la rotura, los cuales dependen del valor del radio de entalla

$$P(K_{IC}, \sigma_c | K_{UC}(R)) \propto P(K_{UC} | R, K_{IC}, \sigma_c) P(K_{IC}, \sigma_c) \quad (12)$$

$$P(K_{UC} | R, K_{IC}, \sigma_c) \sim N(\mu, \epsilon) \quad (13)$$

$$\mu = K_{IC} f\left(\frac{R}{(K_{IC}/\sigma_c)^2}\right)$$

Se ha supuesto que los factores de intensidad de tensiones de entalla siguen una distribución normal, donde la media es función del radio de entalla y la desviación típica es ϵ . Este último valor no depende del valor del radio. La función $f(\cdot)$ varía con el criterio de rotura elegido, las expresiones correspondientes se recogen en la sección 2.

Las distribuciones a priori de los parámetros del modelo, K_{IC}, σ_c , se han considerado gaussianas con los valores medios y desviaciones típicas tomados de los resultados experimentales.

$$P(K_{IC}) \sim N(\mu = 1.63 \text{ MPa}\sqrt{m}, \epsilon = 0.04) \quad (14)$$

$$P(\sigma_c) \sim N(\mu = 123.8 \text{ MPa}, \epsilon = 1.8)$$

Como distribución a priori del error se ha tomado una distribución gamma inversa con $\alpha = 1$ y $\beta = 1$.

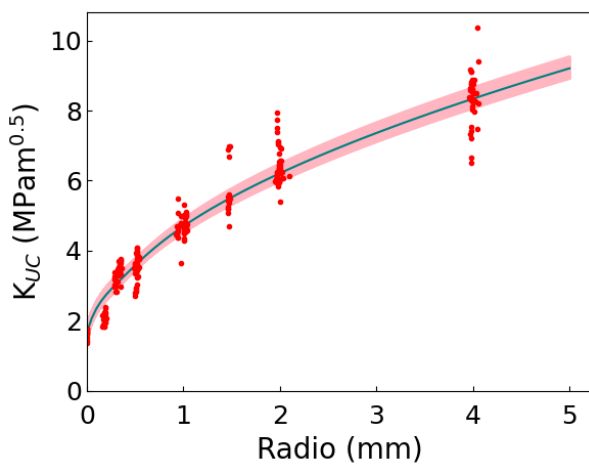


Figura 2. Ajuste bayesiano de los resultados experimentales siguiendo el modelo CZM-R.

El ajuste bayesiano permite obtener los parámetros del modelo, así como su distribución estadística. Para realizar el cálculo de las distribuciones a posteriori, se ha utilizado la biblioteca de Python PyMC3 [23]. Las

distribuciones a posteriori se han calculado numéricamente mediante el algoritmo NUTS (No U-Turn Sampler) con 2000 iteraciones y 3 cadenas.

El ajuste de los resultados experimentales para el caso de la teoría de la fisura cohesiva con curva rectangular, así como las expresiones de las distribuciones de la tenacidad y la resistencia a tracción, aparecen en las Figuras 2, 3 y 4, respectivamente. Se observa un buen ajuste de los resultados experimentales y, en el caso de la teoría de la fisura cohesiva con curva de ablandamiento rectangular, las distribuciones a priori y a posteriori de la tenacidad coinciden prácticamente. En el caso de la resistencia a tracción, existen diferencias, pero estas son menores en comparación con otros criterios de rotura.

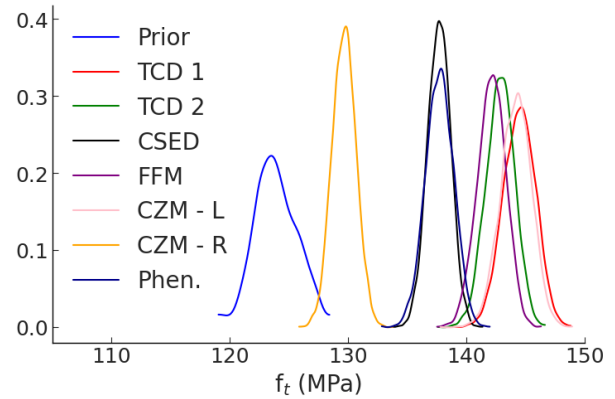


Figura 3. Distribuciones a priori y a posteriori de la resistencia a tracción.

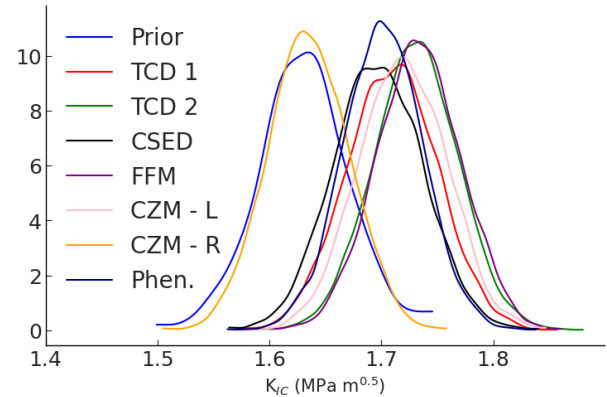


Figura 4. Distribuciones a priori y a posteriori de la tenacidad de fractura del material.

5. SELECCIÓN DE MODELOS

La estadística bayesiana proporciona una metodología para la selección de modelos, permitiendo comparar hipótesis o modelos alternativos mediante la incorporación de datos observados y conocimiento previo. Una de las técnicas más destacadas es el factor de Bayes, que compara las verosimilitudes marginales de los datos bajo cada modelo.

$$\frac{P(M_1 | data)}{P(M_2 | data)} = \frac{P(data | M_1) P(M_1)}{P(data | M_2) P(M_2)} \quad (15)$$

Donde M_1 es el modelo 1 y M_2 el modelo 2. i la probabilidad a priori de ambos modelos es la misma, el factor de Bayes es el ratio de las funciones de verosimilitud. En la expresión anterior, el primer factor analiza la capacidad de ajuste del modelo y el segundo se puede relacionar con la complejidad, considerando como modelos más probables aquellos con menos parámetros.

Existe una gran variedad de criterios de selección de modelos basados en la expresión 15 que tienen en cuenta la penalización por la complejidad del modelo y la posible influencia de la distribución a priori de los parámetros en el cálculo final. Entre estos criterios que minimizan la influencia de las distribuciones a priori se encuentra el Criterio de Información de Watanabe-Akaike (WAIC) [24]. Este criterio ha sido aplicado a todos los modelos analizados en este trabajo, obteniéndose la siguiente tabla.

Tabla 2. Factor WAIC de los criterios de rotura analizados

Criterio de rotura	WAIC
TCD tensión media	497
TCD máxima tensión	445
CSED	426
FFM	435
Fisura cohesiva lineal	482
Fisura cohesiva rectangular	379
Criterio fenomenológico modo I	418
Regresión simbólica	359

El modelo de la fisura cohesiva con curva de ablandamiento rectangular es el modelo que tiene un factor WAIC menor y, por tanto, es el modelo que mejor explica los ensayos de rotura de probetas entalladas de PMMA a -60°C .

El criterio WAIC es comparativo y solo implica que, entre los modelos analizados, el que tiene menor valor es el que mejor explica los resultados, pero podría existir un modelo mejor. Con objeto de analizar si puede existir un modelo mejor, se ha determinado, empleando regresión simbólica [25], una expresión matemática que ajusta todos los resultados experimentales.

$$\frac{K_{UC}}{K_{IC}} = 0.9938 + \frac{\frac{R}{l_{ch}}}{-9.30883 + 0.01484 \frac{R}{l_{ch}} + 10.907^4 \sqrt{1 + 0.09572 \frac{R}{l_{ch}}}} \quad (16)$$

El valor del factor WAIC de la expresión anterior se recoge en la tabla 2 y es inferior al mejor de los modelos, mostrando que es posible la existencia de un criterio de rotura que mejore las predicciones del modelo cohesivo. Sin embargo, se observa que el margen de mejora no sería muy grande.

6. CONCLUSIONES

El presente trabajo ha aplicado estadística bayesiana para comparar de forma rigurosa diferentes criterios de rotura, como las teorías de distancias críticas, la mecánica de fractura finita o la teoría de la fisura cohesiva, al analizar los datos experimentales de probetas de PMMA con entallas en U ensayadas a -60°C . Esta metodología integra la información a priori y la incertidumbre asociada a las mediciones experimentales, calculando las distribuciones de probabilidad a posteriori de los parámetros de cada criterio.

Todos los criterios analizados explican los resultados de rotura experimentales. No obstante, el análisis comparativo a través del Watanabe-Akaike Information Criterion (WAIC) muestra que el modelo cohesivo con curva de ablandamiento rectangular se adapta mejor a los resultados.

El modelo cohesivo con ablandamiento rectangular ha sido el mejor ajuste dentro de los criterios analizados; sin embargo, un análisis de regresión simbólica ha mostrado la posibilidad de conseguir expresiones alternativas con un valor de WAIC más bajo. Esto indica que con nuevos criterios de rotura se podría lograr un ajuste más preciso a los datos experimentales, aunque la mejora esperada no será muy grande al ser relativamente parecidos los factores WAIC.

AGRADECIMIENTOS

El autor desea expresar su agradecimiento al proyecto europeo DIMAT (101091496) por la financiación recibida para realizar esta investigación.

REFERENCIAS

- [1] ASTM International. ASTM D6110-18. *Standard Test Method for Determining the Charpy Impact Resistance*, ASTM International, West Conshohocken, PA, USA, (2018).
- [2] T.L. Anderson. *Fracture Mechanics: Fundamentals and Applications*, Fourth Edition, CRC Press, Boca Raton, FL, USA (2017).
- [3] A. Seweryn. *Brittle fracture criterion for structures with sharp notches*, Engineering Fracture Mechanics, 47 (5) (1994).
- [4] A. Seweryn and A. Łukaszewicz. *Verification of brittle fracture criteria for elements with V-shaped notches*, Engineering Fracture Mechanics, 47(5), 673–681 (1994).
- [5] P. Lazzarin and R. Zambardi. *A finite-volume-energy based approach to predict the static and fatigue behavior of components with sharp V-shaped notches*, International Journal of Fracture, 112(3), (2001).

- [6] D. Leguillon, *Strength or toughness? A criterion for crack onset at a notch*, European Journal of Mechanics - A/Solids, 21(1), 61–72 (2002). doi: 10.1016/S0997-7538(01)01184-6.
- [7] P. Cornetti, V. Mantič, and A. Carpinteri, *Finite Fracture Mechanics at elastic interfaces*, International Journal of Solids and Structures, 49(7–8), 870–881 (2012). doi: 10.1016/j.ijsolstr.2012.01.002.
- [8] F.J. Gómez, M. Elices, A. Valiente, *Cracking in PMMA containing U-shaped notches*, Fatigue Fract Eng Mater Struct, 23(9), 795–803 (2000). doi: 10.1046/j.1460-2695.2000.00264.x.
- [9] F. J. Gómez, G. v. Guinea, and M. Elices, *Failure criteria for linear elastic materials with U-notches*, Int J Fract, vol. 141, no. 1–2, 2006, doi: 10.1007/s10704-006-0066-7.
- [10] F.J. Gómez, T. Gómez-del-Rio, J. Rodríguez, *Fracture toughness of selective laser sintering Polyamide 12: evaluation of failure criteria using Bayesian analysis*, Journal of Materials Research and Technology, 2025, ISSN 2238-7854, <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2025.03.019>. [
- [11] M. Creager and P. C. Paris, *Elastic field equations for blunt cracks with reference to stress corrosion cracking*, International Journal of Fracture Mechanics, 1967, doi: 10.1007/BF00182890.
- [12] F.J. Gómez, M. Elices, *Fracture loads for ceramic samples with rounded notches*, Engineering Fracture Mechanics, 73(7) (2006). doi: 10.1016/j.engfracmech.2005.11.007.
- [13] V.V. Novozhilov, *On a necessary and sufficient criterion for brittle strength*, Prikladnaya Matematika i Mekhanika, 33(2) (1969). doi: 10.1016/0021-8928(69)90025-2.
- [14] R.O. Ritchie, J.F. Knott, J.R. Rice, *On the relationship between critical tensile stress and fracture toughness in mild steel*, Journal of Mechanics and Physics of Solids, 21(6), 395–410 (1973). doi: 10.1016/0022-5096(73)90008-2.
- [15] P. Lazzarin, R. Zambardi, *A finite-volume-energy based approach to predict the static and fatigue behavior of components with sharp V-shaped notches*, International Journal of Fracture, 112(3) (2001). doi: 10.1023/A:1013595930617.
- [16] F. Berto, P. Lazzarin, *Recent developments in brittle and quasi-brittle failure assessment of engineering materials by means of local approaches*, Materials Science and Engineering R: Reports, 75(1) (2014). doi: 10.1016/j.mser.2013.11.001.
- [17] D. Leguillon, *Strength or toughness? A criterion for crack onset at a notch*, European Journal of Mechanics, A/Solids, 21(1) (2002). doi: 10.1016/S0997-7538(01)01184-6.
- [18] M. Elices, G.V. Guinea, J. Gómez, J. Planas, *The cohesive zone model: Advantages, limitations and challenges*, Engineering Fracture Mechanics, 69(2) (2001). doi: 10.1016/S0013-7944(01)00083-2.
- [19] F.J. Gómez, M. Elices, J. Planas, *The cohesive crack concept: application to PMMA at –60°C*, Engineering Fracture Mechanics, 72(8), 1268–1285 (2005). doi: 10.1016/j.engfracmech.2004.09.005.
- [20] F.J. Gómez, M. Elices, F. Berto, P. Lazzarin, *A generalised notch stress intensity factor for U-notched components loaded under mixed mode*, Engineering Fracture Mechanics, 75(16), 4819–4833 (2008). doi: 10.1016/j.engfracmech.2008.07.001.
- [21] F. Berto, P. Lazzarin, F.J. Gómez, M. Elices, *Fracture assessment of U-notches under mixed mode loading: two procedures based on the ‘equivalent local mode I’ concept*, International Journal of Fracture, 148(4), 415–433 (2007). doi: 10.1007/s10704-008-9213-7.
- [22] A. Gelman, J. B. Carlin, H. S. Stern, D. B. Dunson, A. Vehtari, and D. B. Rubin, *Bayesian Data Analysis*, Third Edition. Boca Raton, Florida: CRC Press, 2014.
- [23] Osvaldo Martin, *Bayesian Analysis with Python*, Second Edition. Birmingham, UK: Packt Publishing Ltd, 2018.
- [24] S. Watanabe, *Asymptotic equivalence of Bayes cross validation and widely applicable information criterion in singular learning theory*, Journal of Machine Learning Research, vol. 11, 2010.
- [25] G. Kronberger, B. Burlacu, M. Kommenda, S. M. Winkler, M. Affenzeller. *Symbolic Regression*. CRC Press, Boca Raton, FL, USA (2023).

ANÁLISIS POR ELEMENTOS FINITOS DEL CRECIMIENTO DE GRIETAS EN MODO I+II EN UNIONES ADHESIVAS USANDO UN NUEVO ELEMENTO SINGULAR

Herrera, María^{1,2}; Távara, Luis^{1,2}; Muñoz-Reja, Mar²; Mantič, Vladislav¹

¹Escuela Técnica Superior de Ingeniería, Universidad de Sevilla, Camino de los Descubrimientos, s/n. 41092 Sevilla

²Escuela Politécnica Superior, Universidad de Sevilla, C/ Virgen de África 7, 410011 Sevilla

*Persona de contacto: mantic@us.es

RESUMEN

El uso creciente de uniones adhesivas en diversas industrias exige análisis detallados del crecimiento de grietas en estas uniones. Estos estudios suelen apoyarse en simulaciones mediante el método de los elementos finitos (FEM), que enfrentan retos como singularidades logarítmicas de tensiones en los vértices de las grietas en modelos de interfase tipo Winkler (muelle). Resolver estas singularidades suele requerir un refinamiento significativo de la malla, lo que conlleva altos costos computacionales.

Este trabajo propone un nuevo elemento finito singular para análisis de fractura en modo mixto en el plano (I+II), enfocado en interfaces modeladas con distribuciones de muelles de tipo Winkler. El elemento propuesto es triangular y tiene 5 nodos, obtenidos al colapsar un elemento rectangular de 6 nodos. Integra la solución elástica asintótica para singularidades logarítmicas de tensiones, mejorando la precisión en los cálculos de la Tasa de Liberación de Energía (ERR) respecto a los elementos finitos estándar. Este enfoque logra mayor precisión en simulaciones con presencia de grietas, reduciendo significativamente los costos computacionales.

Estos resultados demuestran el potencial del elemento propuesto para mejorar la eficiencia y precisión en análisis de mecánica de fractura en uniones adhesivas, siendo una herramienta prometedora para afrontar desafíos relacionados con interfaces en FEM.

PALABRAS CLAVE: Unión adhesiva, Método de los Elementos Finitos, elemento singular, singularidad logarítmica.

ABSTRACT

Adhesive joints are increasingly used in a wide range of industries, requiring detailed analyses of crack growth. These studies often rely on finite element method (FEM) simulations, which face challenges such as logarithmic stress singularities at crack tips on Winkler-type spring interfaces. Addressing these singularities typically requires strong mesh refinement, resulting in high computational costs.

This work proposes a novel finite element for plane fracture analysis in mode I+II, focusing on cracks along interfaces modeled by Winkler-type spring distributions. The element is triangular with 5 nodes obtained by collapsing a 6-node rectangular element. It incorporates the asymptotic elastic solution for logarithmic stress singularities, improving the accuracy of Energy Release Rate (ERR) calculations compared to standard finite elements. This approach achieves higher accuracy in simulations with the presence of cracks while substantially reducing computational costs.

These results demonstrate the potential of the proposed element to enhance the efficiency and accuracy of fracture mechanics analyses in adhesive joints, making it a promising tool for addressing interface-related challenges in FEM.

KEYWORDS: Adhesive joint, Finite Element Method, singular element, logarithmic singularity.

1. INTRODUCCIÓN

Las uniones adhesivas desempeñan un papel crucial en la integridad de diversas estructuras, desde laminados compuestos hasta ensamblajes industriales. Para modelar el comportamiento de estas uniones, especialmente en capas adhesivas delgadas, se recurre frecuentemente a la representación de la interfase adhesiva mediante una distri-

bución continua de muelles elásticos lineales e independientes, conocida como interfase tipo Winkler, interfase débil, interfase lineal elástica o interfase de tipo Robin. Esta representación permite simular el salto en desplazamientos que ocurre en la unión bajo cargas bajas, así como la potencial iniciación y propagación de grietas a medida que la carga aumenta, todo ello modelado a través de la rigidez de los muelles.

El fallo de estas uniones, a menudo manifestado como grietas de interfase debidas al despegue, constituye uno de los modos de fallo más críticos en estructuras. Estas grietas pueden clasificarse en tres modos principales: modo I (apertura), modo II (deslizamiento) y modo III (cizalla). El análisis preciso del crecimiento de estas grietas, y en particular, la determinación de la tasa de liberación de energía (ERR), es fundamental para evaluar la integridad estructural. La ERR, que puede calcularse a partir del desplazamiento relativo en el vértice de la grieta, proporciona una medida de la energía disponible para la propagación de la misma.

Sin embargo, el análisis numérico de estas grietas se ve complicado por la presencia de singularidades logarítmicas de tensiones en el vértice de la grieta, inherentes a la interfase tipo muelle. La aproximación convencional a este problema implica el uso de mallas de elementos finitos extremadamente finas, lo que conlleva un aumento significativo en los tiempos de cálculo y las dificultades en la generación de mallas.

Para abordar esta problemática, este trabajo se inspira en el desarrollo previo de un elemento singular para singularidades logarítmicas en tensiones de modo III (antiplano) en interfaces modeladas con muelles, propuesto por Mantić et al. [4]. El objetivo principal de este estudio es extender esta metodología al análisis de grietas en modos I y II (modos planos), desarrollando un nuevo elemento singular capaz de capturar con precisión las singularidades logarítmicas de tensiones y reducir la necesidad de mallas excesivamente finas, optimizando así la eficiencia del análisis numérico.

Al igual que en [4], la formulación desarrollada se incluirá en la implementación de un código para elementos finitos en Matlab propuesto inicialmente para el modo antiplano por Alberty et al. [1], para este caso se ha modificado para el modo plano [2].

Para ello, primero se desarrollará la formulación débil del problema elástico lineal plano, a partir de esta se desarrollará la formulación e implementación del elemento singular y finalmente se mostrarán los resultados numéricos obtenidos.

2. FORMULACIÓN VARIACIONAL DEL PROBLEMA ELÁSTICO LINEAL PLANO CON UNA INTERFASE TIPO MUELLE

2.1. Definición del problema elástico lineal plano

El problema a analizar en este trabajo es el de la grieta de interfase tipo muelle, sometida a tensiones normales σ y tangenciales τ (modos I y II de fractura), ver Figura 1. En este caso, por lo tanto, $u_i = u_i(x, y)$ con $i = 1, 2$. El sólido viene representado por un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, con el contorno $\Gamma = \partial\Omega$. La parte del contorno en la que se prescriben los desplazamientos (condición tipo Dirichlet), $u_i = \bar{u}_i$, se denotará como Γ_u , la parte en la que se prescriben las cargas $t_i = \bar{t}_i$ (condición tipo Neumann), se denotará como Γ_t y la parte del contorno en la que se

prescriba una relación lineal entre las tensiones y los desplazamientos $t_i = -k_{ij}u_j$, es decir, en la que coloquemos los muelles, se denotará como Γ_m , siendo k_{ij} la rigidez de la distribución de muelles en Γ_m . El tensor de tensiones plano y el tensor de pequeñas deformaciones quedan definidos en términos de los desplazamientos como

$$\sigma_{ij}(\mathbf{u}) = \mu(u_{i,j} + u_{j,i}) + \lambda u_{k,k} \delta_{ij}, \quad (1)$$

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}). \quad (2)$$

Por lo tanto, definiendo $\mathbf{x} = (x, y)$, la formulación matemática del problema elástico plano quedaría

$$\mu u_{i,jj}(\mathbf{x}) + (\lambda + \mu) u_{i,jj}(\mathbf{x}) + f_i(\mathbf{x}) = 0, \quad (3)$$

$$u_i(\mathbf{x}) = \bar{u}_i(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_u, \quad (4)$$

$$\sigma_{ij} n_j = \bar{t}_i, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_t, \quad (5)$$

$$\sigma_{ij} n_j + 2k_{ij} u_i = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_m, \quad (6)$$

En las ecuaciones anteriores, μ es el módulo de elasticidad tangencial, λ es la constante de Lamé y ν el coeficiente de Poisson. $f_i(\mathbf{x})$ es el vector de fuerzas volumétricas. El parámetro δ_{ij} es la delta de Kronecker. n_j representa la componente j del vector normal al contorno, el cual indica la dirección perpendicular a la superficie en la que se aplican las condiciones de contorno.

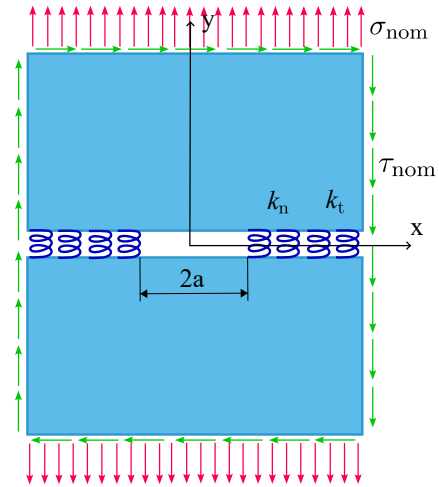


Figura 1. Esquema de la grieta en interfase de muelles

2.2. Formulación variacional

Aplicando el teorema de la divergencia para dos campos de desplazamientos: $u_i(\mathbf{x})$, la solución del problema propuesto, y $v_i(\mathbf{x})$, un campo auxiliar, ambos definidos en Ω , y la definición del problema elástico propuesto, obtenemos la siguiente formulación variacional del problema elástico propuesto

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \sigma_{ij}(\mathbf{u}) \varepsilon_{ij}(\mathbf{v}) d\Omega + \int_{\Gamma_m} k_{ij} u_j v_i d\Gamma = \\ \int_{\Omega} f_i v_i d\Omega + \int_{\Gamma_t} \bar{t}_i v_i d\Gamma \quad \forall v_i, u_i(\mathbf{x}) = \bar{u}_i(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_u, \end{aligned} \quad (7)$$

teniendo en cuenta que el campo de desplazamientos auxiliar, $v_i(\mathbf{x}) = 0$ en Γ_u .

2.3. Discretización para el método de elementos finitos

El dominio Ω podemos discretizarlo en un número finito de elementos triangulares. Esta malla de elementos finitos estará definida por N nodos con coordenadas $\mathbf{x}_n = (x_n, y_n)$, $n = 1, \dots, N$, con las funciones de formas asociadas $\psi_n(\mathbf{x})$. La solución $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ puede ser aproximada por una combinación lineal de las funciones de forma,

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) \approx \mathbf{u}_h(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^N \mathbf{u}^n \psi^n(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (8)$$

siendo $h > 0$ el parámetro de tamaño de la malla. Teniendo en cuenta que las funciones de forma, $\psi^n(\mathbf{x})$, cumplen con la propiedad de Lagrange $\psi^n(\mathbf{x}_m) = \delta_{nm}$, podemos decir que los coeficientes de la combinación lineal son los valores nodales de los desplazamientos, i.e. $\mathbf{u}(\mathbf{x}_n) \approx \mathbf{u}^n$. Podemos definir el conjunto de valores nodales de desplazamientos conocidos al imponer los valores de desplazamientos en Γ_u como

$$\mathbf{u}_n = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_n) \quad \text{para} \quad \mathbf{x}_n \in \Gamma_u. \quad (9)$$

Al introducir (8) en (7) y tomando como $2N$ campos de desplazamientos auxiliares (de prueba) $\boldsymbol{\psi}^{(m,1)} = (\psi^m(\mathbf{x}), 0)$ y $\boldsymbol{\psi}^{(m,2)} = (0, \psi^m(\mathbf{x}))$, para $m, n = 1, \dots, N$, llegamos al sistema lineal final de $2N$ ecuaciones para los $2N$ valores de desplazamiento nodales desconocidos

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N \left[\int_{\Omega} C_{ijkl} \psi_{,i}^n \psi_{,j}^m d\Omega \right] u_k^n + \sum_{n=1}^N \left[\int_{\Gamma_m} 2k_{ik} \psi^n \psi^m d\Gamma \right] u_k^n \\ = \int_{\Omega} f_i \psi^m d\Omega + \int_{\Gamma_t} \bar{t}_i \psi^m d\Gamma, \quad m = 1, \dots, N \text{ with } \mathbf{x}_m \notin \Gamma_u. \end{aligned} \quad (10)$$

En la expresión anterior, C_{ijkl} es el tensor de constantes elásticas (tensor de rigidez).

Si utilizamos la misma aproximación para las fuerzas volumétricas en Ω y para las cargas prescritas en Γ_t , el sistema lineal toma la siguiente forma

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N \left[\int_{\Omega} C_{ijkl} \psi_{,i}^n \psi_{,j}^m d\Omega \right] u_k^n + \sum_{n=1}^N \left[\int_{\Gamma_m} 2k_{ik} \psi^n \psi^m d\Gamma \right] u_k^n \\ = \sum_{n=1}^N \left[\int_{\Omega} \psi^n \psi^m d\Omega \right] f_i^n + \sum_{n=1}^N \left[\int_{\Gamma_t} \psi^n \psi^m d\Gamma \right] \bar{t}_i^n, \\ m = 1, \dots, N \text{ with } \mathbf{x}_m \notin \Gamma_u. \end{aligned} \quad (11)$$

A partir de la expresión anterior podemos definir la matriz de rigidez como

$$K_{ik}^{mn} = \int_{\Omega} C_{ijkl} \psi_{,i}^n \psi_{,j}^m d\Omega + \int_{\Gamma_m} 2k_{ik} \psi^n \psi^m d\Gamma, \quad (12)$$

y el vector de cargas como

$$F_i^m = \sum_{n=1}^N \left[\int_{\Omega} \psi^n \psi^m d\Omega \right] f_i^n + \sum_{n=1}^N \left[\int_{\Gamma_t} \psi^n \psi^m d\Gamma \right] \bar{t}_i^n. \quad (13)$$

El sistema final en notación matricial queda como

$$\mathbf{K}^{mn} \mathbf{u}^n = \mathbf{F}^m \quad \text{para} \quad m = 1, \dots, N \quad \text{con} \quad \mathbf{x}_m \notin \Gamma_u. \quad (14)$$

3. ELEMENTO SINGULAR PARA SINGULARIDADES LOGARÍTMICAS DE TENSIONES

En esta sección se desarrollará el elemento singular necesario para captar la singularidad logarítmica que se produce en el entorno de la punta de la grieta.

3.1. Funciones de forma 1-D

Las funciones de forma del elemento en 1-D de la Figura 2, con nodos en $r_1 = 0$, $r_2 = 0,5$ y $r_3 = 1$, presentadas en la Tabla 1 se obtienen mediante combinación lineal de funciones bases, ver [4].

Tabla 1. Valores de las funciones de forma de los desplazamientos N_i^u y de las funciones de forma de la geometría N_i^g

i	$N_i(r)$
1	$1 - r - \frac{r \ln(r)}{\ln(1/2)}$
2	$\frac{2r \ln(r)}{\ln 1/2}$
3	$r - \frac{r \ln(r)}{\ln(1/2)}$

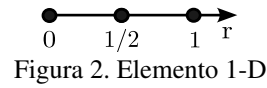


Figura 2. Elemento 1-D

3.2. Funciones de forma 2-D

Las funciones de forma generalizadas en 2D en un espacio de referencia $\xi - \eta$, con $0 \leq \xi, \eta \leq 1$, para los desplazamientos N_i^u desarrolladas para el elemento singular logarítmico se presentan en la Tabla 2 con la numeración asociada a los nodos representados en la Figura 3. Esto se hace generalizando un cuadrado de referencia con 6 nodos y las funciones de forma con comportamiento lineal en η y con las funciones de forma desarrolladas en 1-D en la sección anterior en ξ , reemplazando r por ξ . En esta misma tabla se incluyen también las funciones de forma para modelar la geometría y la matriz Jacobiana. Todas estas matrices son necesarias para el cálculo de la matriz de rigidez del elemento singular.

Tabla 2. Valores de las funciones de forma de los desplazamientos N_i^u y de las funciones de forma de la geometría N_i^g .

i	N_i^u	N_i^g
1	$(1 - \eta) \left(1 - \xi - \xi \frac{\ln \xi}{\ln(1/2)} \right)$	$(1 - \xi)(1 - \eta)$
2	$(1 - \eta) \left(\xi - \xi \frac{\ln \xi}{\ln(1/2)} \right)$	$\xi(1 - \eta)$
3	$\eta \left(\xi - \xi \frac{\ln \xi}{\ln(1/2)} \right)$	$\xi \eta$
4	$\eta \left(1 - \xi - \xi \frac{\ln \xi}{\ln(1/2)} \right)$	$(1 - \xi) \eta$
5	$(1 - \eta) \left(2\xi \frac{\ln \xi}{\ln(1/2)} \right)$	-
6	$\eta \left(2\xi \frac{\ln \xi}{\ln(1/2)} \right)$	-

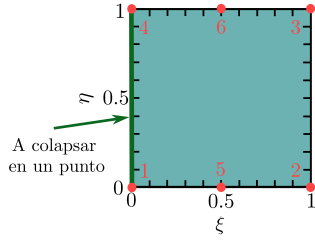


Figura 3. Elemento cuadrado 2-D en espacio de referencia $\xi - \eta$

3.3. Funciones de forma singulares en el elemento triangular

En la Figura 4, se muestra el elemento triangular obtenido al colapsar todos los puntos en el lado 1-4 del elemento cuadrado de la Figura 3. Esto se hace para obtener en el nodo 1 la singularidad en tensiones logarítmica que se tiene a lo largo del lado 1-4.

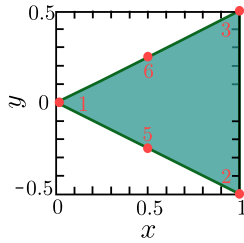


Figura 4. Elemento triangular 2-D en espacio físico $x - y$

El mapeado entre el elemento cuadrado, Figura 3, en el espacio de referencia y el elemento triangular, Figura 4, en el espacio físico se hace mediante las funciones de forma geométricas. Al colapsar el lado 1-4, la función de forma del nodo-1 en el espacio físico pasa a ser

$$[N_1(x, y)]_{\text{espacio } x-y} = [N_1(\xi, \eta) + N_4(\xi, \eta)]_{\text{espacio } \xi-\eta} \quad (15)$$

3.4. Matriz de rigidez en el problema plano

Para obtener la matriz de rigidez del elemento singular Ω_n , partimos de la formulación débil del problema, más concretamente de la expresión (12). Introduciendo las funciones de interpolación de cada nodo del elemento, la matriz de rigidez nos queda como

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega_n} [\mathbf{B}]^T \mathbf{D} [\mathbf{B}] |\mathbf{J}| d\xi d\eta + 2\mathbf{K}_m \int_{\Gamma_{mn}} \mathbf{M}^T \mathbf{M} dl, \quad (16)$$

donde

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \frac{\partial(N_1+N_4)}{\partial\xi} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial\xi} & 0 & \dots & \frac{\partial N_6}{\partial\xi} & 0 \\ 0 & \frac{\partial(N_1+N_4)}{\partial\eta} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial\eta} & \dots & 0 & \frac{\partial N_6}{\partial\eta} \\ \frac{\partial(N_1+N_4)}{\partial\eta} & \frac{\partial(N_1+N_4)}{\partial\xi} & \frac{\partial N_2}{\partial\eta} & \frac{\partial N_2}{\partial\xi} & \dots & \frac{\partial N_6}{\partial\eta} & \frac{\partial N_6}{\partial\xi} \end{bmatrix}, \quad (17)$$

$\mathbf{D}$ es la matriz constitutiva en el caso de material isotropo, que en el estado de deformaciones plano es

$$\mathbf{D} = \frac{E}{(1-2\nu)(1+\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & 0 \\ \nu & 1-\nu & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} \end{bmatrix}, \quad (18)$$

la matriz jacobiana $\mathbf{J}$ es

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial\xi} & \frac{\partial y}{\partial\xi} \\ \frac{\partial x}{\partial\eta} & \frac{\partial y}{\partial\eta} \end{bmatrix}, \quad (19)$$

la matriz $\mathbf{K}_s$ de rigideces del muelle es

$$\mathbf{K}_m = \begin{bmatrix} k_t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_n & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & k_t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & k_t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & k_n \end{bmatrix}, \quad (20)$$

y la matriz $\mathbf{M}$ es

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & N_5 & 0 & N_2 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_5 & 0 & N_2 \end{bmatrix}. \quad (21)$$

4. RESULTADOS NUMÉRICOS

Lenci [3] presenta la formulación de las ecuaciones integrales para obtener el campo de desplazamientos y tensiones en una interfase con muelles entre dos dominios (semiplanos) elásticos pegados y en la que se encuentra una grieta, como se muestra en Figura 1.

En esta sección se presentará la verificación realizada para el elemento singular desarrollado. Para ello se mostrarán los resultados obtenidos con y sin incluir el elemento singular en la malla, así como el error relativo obtenido para cada caso comparado con los valores obtenidos mediante la formulación de las ecuaciones integrales presentada por Lenci [3].

Al igual que en [3], debido a la simetría del modelo, solo estudiaremos un cuarto del mismo, ver Figura 5.

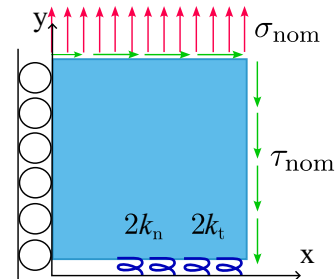


Figura 5. Esquema reducido equivalente de la grieta de interfase modelada por medio de muelles

Se considera un dominio lo suficientemente grande como para considerarlo infinito. La interfase pegada se encuentra en $y = 0$. Las condiciones de contorno empleadas en el modelo son las mostradas en la figura 6, correspondientes modo I puro. La carga se aplica directamente en la cara de la grieta.

Para estudiar el problema de forma adimensional, se utilizará en la dirección x el parámetro χ

$$\chi = \frac{x}{a}, \quad (22)$$

donde x es la distancia al centro de la grieta y a es la mitad de la longitud de la grieta.

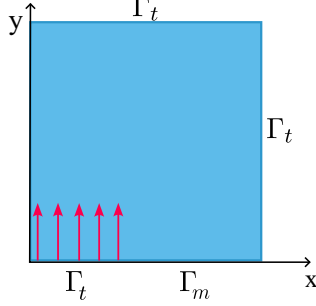


Figura 6. Condiciones de contorno aplicadas en el modelo de elementos finitos para Modo I

La malla utilizada en este caso sigue la disposición mostrada en la Figura 7. En la región $0 \leq \chi \leq 4$ y $0 \leq y/a \leq 4$, la malla es homogénea, con $4N$ elementos en cada lado, donde N es el número de elementos en la grieta, variando entre $N = 1, 2, 4, 8, 16, 32$ para verificar la convergencia de la solución. En el resto del dominio $4 \leq \chi \leq 1000$ y $4 \leq y/a \leq 1000$, se aplica una distribución sesgada de la malla (bias) adecuada para contener 500 elementos, evitando cambios abruptos en el tamaño de elementos en torno a $\chi, y/a = 4$. El valor del ratio del bias es la relación entre el elemento más grande y el elemento más pequeño a lo largo de un borde, y dependerá del número de elementos utilizados en la zona homogénea, habiéndose empleado en estos casos los valores de ratio de bias = 4, 9, 55, 160, 400, respectivamente.

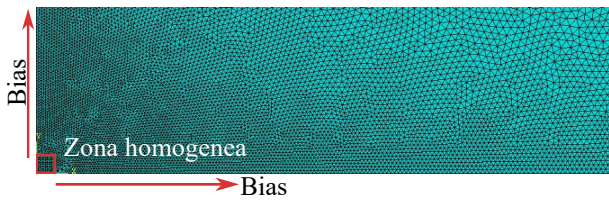


Figura 7. Esquema de la malla utilizada

Para la representación de los resultados se introducen los siguientes parámetros adimensionales:

$$\delta = 2ka \frac{(1 - \nu^2)}{E\pi} \quad \text{para deformación plana,} \quad (23)$$

$$\delta = 2ka \frac{1}{E\pi} \quad \text{para tensión plana,}$$

siendo δ el parámetro adimensional con el que se caracteriza la rigidez de la interfase de muelles,

$$\hat{u}_y = \frac{4\mu\pi}{a\sigma_{\text{nom}}(\kappa + 1)} u_y \quad (24)$$

para los desplazamientos verticales en modo I.

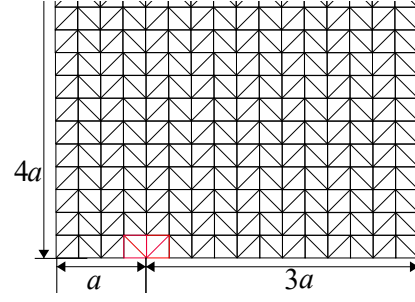


Figura 8. Tipo de malla utilizada para la zona homogénea. a semi-longitud de la grieta. Elementos en negro son estándares y en rojo posible posición de elementos singulares

En las Figuras 9 y 10, se representan los valores de $\hat{u}$ obtenidos utilizando la malla sin el elemento singular e introduciendo el elemento singular en la punta de la grieta con $N = 2$ y 8 elementos en la grieta y los obtenidos mediante la solución de la ecuación integral propuesta por Lenci [3], en un dominio $d = 40000$ utilizando $n = 1000$ nodos (Analítica). Estos resultados se muestran para $\delta = 10$ en Figura 9 y para $\delta = 1000$ en Figura 10.

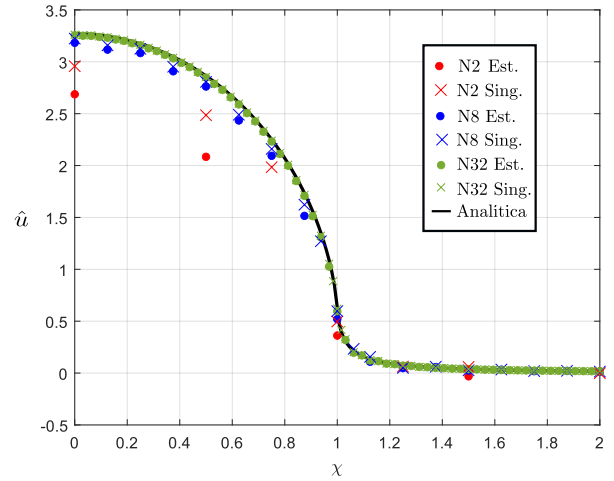


Figura 9. Desplazamientos $\hat{u}$ en la región cercana a la grieta para una interfase con $\delta = 10$

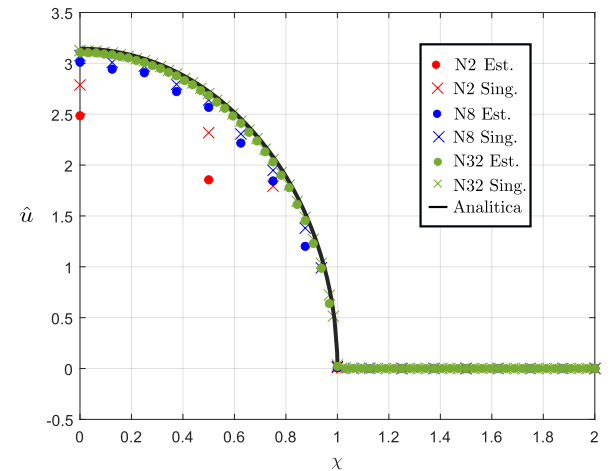


Figura 10. Desplazamientos $\hat{u}$ en la región cercana a la grieta para una interfase con $\delta = 1000$

Como se puede comprobar al observar ambas figuras, al incrementar el número de elementos en la grieta la solución numérica va convergiendo a la solución analítica, y la introducción del elemento singular mejora notablemente los resultados. También se puede observar al comparar ambas figuras que al método le cuesta más obtener buenos resultados para valores del parámetro δ mayores, es decir, cuanto más parecido a la grieta en interfase perfectamente unida, más elementos necesitaremos en la grieta para obtener buenos resultados. Todas estas observaciones se verán más claramente al observar el error relativo de los desplazamientos en el vértice de la grieta $e_{\text{relativo}} = |u_{\text{analítico}} - u_{\text{numérico}}| / \max(u_{\text{analítico}})$ en la Figura 11.

La Figura 11 representa el error relativo de $\hat{u}$ en el vértice de la grieta en escala logarítmica para las diferentes mallas y los diferentes valores de δ . El valor de $\hat{u}$ en el vértice de la grieta es crucial para el cálculo del ERR. Como se puede ver, el error es mayor para valores de δ elevados, y la utilización del elemento singular desarrollado disminuye notablemente el error.

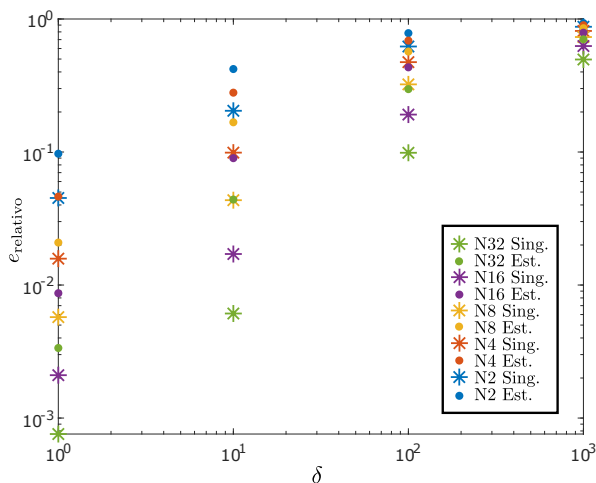


Figura 11. Error relativo e_{relativo} del desplazamiento en la punta de la grieta con diferentes mallas y para diferentes deltas, con y sin introducir el elemento singular

Aunque todos los resultados presentados están asociados a la solución en modo I de fractura. Se obtienen resultados igualmente válidos para el modo II intercambiando $\hat{u}_y$ por $\hat{u}_x$ y σ_{nom} tensión normal por τ_{nom} tensión tangencial ambas aplicadas en la cara de la grieta.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo se presenta la formulación e implementación de un nuevo elemento singular logarítmico. Como se puede comprobar por los resultados mostrados, este elemento es capaz de mejorar la exactitud de los resul-

tados de elementos finitos para grietas de interfase tipo muelles entre materiales elásticos adheridos. El elemento desarrollado se obtiene al colapsar el lado 1-4 de un elemento cuadrado con 6 nodos, lo que da lugar a un elemento triangular con 5 nodos.

Los resultados obtenidos son útiles para el cálculo del ERR, un valor fundamental para el estudio del crecimiento de grietas en interfases. En trabajos futuros, se espera demostrar que la aplicación de este elemento a lo largo de toda la interfase no solo mejora ligeramente los resultados, sino que también facilita su integración en el modelado del crecimiento de grietas. Esto sería posible sin necesidad de modificar la malla en el proceso. La no modificación de la malla, que es esencial para el estudio del crecimiento de grietas mediante métodos de la mecánica de la fractura finita, como el criterio acoplado, permitiría incluir el elemento de manera eficiente en los nuevos vértices de grieta sin necesidad de ajustar la malla durante el proceso.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece la financiación recibida del programa de investigación e innovación Horizon 2020 de la Unión Europea a través de la beca Marie Skłodowska-Curie, acuerdo No. 101086342 - DIAGONAL.



El trabajo fue parcialmente financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación de España y el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (PID2021-123325OB-I00).

Referencias

- [1] J. Alberty, C. Carstensen y S. A. Funken. "Remarks around 50 lines of Matlab: short finite element implementation". En: *Numerical Algorithms* 20 (1999), págs. 117-137.
- [2] J. Alberty et al. "Matlab Implementation of the Finite Element Method in Elasticity". En: *Computing* 69 (2002), 239-263.
- [3] S. Lenci. "Analysis of a crack at a weak interface". En: *International Journal of Fracture* 108 (2001), págs. 275-290.
- [4] V. Mantić et al. "A new crack-tip element for the logarithmic stress-singularity of Mode-III cracks in spring interfaces". En: *Computational Mechanics* 74 (2024), págs. 641-660.

PHASE FIELD FRACTURE MODELLING OF AUSTENITIC STAINLESS STEELS IN HIGH-PRESSURE GASEOUS HYDROGEN

A. Díaz^{1*}, R. Rodríguez-Aparicio¹, V. Arniella¹, J.M. Alegre¹, I.I. Cuesta¹

¹Universidad de Burgos. Grupo de Integridad Estructural. Escuela Politécnica Superior, Avenida Cantabria s/n, Burgos 09006, Spain

* Persona de contacto: adportugal@ubu.es

RESUMEN

Los componentes para manejar hidrógeno gaseoso a alta presión, como tubos o válvulas, suelen estar fabricados con aceros inoxidable austeníticos. Se asume que la susceptibilidad de estos aceros a la fragilización por hidrógeno es baja y generalmente está relacionada con la transformación martensítica inducida por deformación. Para predecir la fractura asistida por hidrógeno en una amplia gama de aceros inoxidable austeníticos, se ha desarrollado un marco de modelización en el software de elementos finitos Comsol Multiphysics que captura todos los fenómenos implicados: transformación martensítica, transporte de hidrógeno, fragilización y fractura. La modelización del transporte de hidrógeno incluye la difusión dependiente de la tensión hidrostática y una difusividad que aumenta con la fracción volumétrica de martensita. Estas características están acopladas con un modelo de fractura de *phase field* informado por hidrógeno, en el que se asume una función de degradación basada en la cobertura de las intercaras. Se simulan ensayos de tracción en hidrógeno a alta presión para dos aceros inoxidable diferentes, 316L y 316, con diferentes ductilidades y estabilidad de la austenita. Los parámetros de fractura del modelo han sido ajustados tanto en ensayos al aire como en ensayos en hidrógeno gaseoso a 200 bar. Los parámetros de degradación ajustados permiten predecir el grado de fragilización para ambos tipos de aceros.

PALABRAS CLAVE: Fragilización por hidrógeno, Modelización numérica, Aceros inoxidable austeníticos

ABSTRACT

High-pressure components to handle gaseous hydrogen, such as tubes or valves, are commonly made of austenitic stainless steels. The susceptibility of these steels to hydrogen embrittlement is recognised to be low and usually linked to the strain-induced martensitic transformation. To predict hydrogen-assisted fracture of a wide range of austenitic stainless steels, a modelling framework is developed in the finite element software Comsol Multiphysics to capture all the phenomena involved: martensitic transformation, hydrogen transport, embrittlement and fracture. Hydrogen transport modelling includes stress-assisted diffusion and the enhanced diffusivity as a function of martensite volume fraction. These features are coupled with a hydrogen-informed phase field fracture model, where a degradation function is assumed to be based on the interface coverage. Tensile tests in high-pressure hydrogen are simulated for two different stainless steels, 316L and 316, with different ductility and austenite stability. Fracture parameters have been fitted using tests in air and also tests in gaseous hydrogen at 200 bar. Degradation parameters that have been fitted predict the embrittlement degree for both steels.

KEYWORDS: Hydrogen embrittlement, Numerical modelling, Austenitic stainless steels

1. INTRODUCTION

Hydrogen embrittlement (HE) is a critical concern for structural materials exposed to hydrogen-rich environments, particularly for high-pressure components such as pipelines, valves, and storage tanks. Austenitic stainless steels are widely used due to their superior corrosion resistance and relatively low susceptibility to HE. However, their mechanical performance in hydrogen environments can be significantly influenced by the strain-induced martensitic transformation, which alters hydrogen diffusion and trapping behaviour. Understanding these interactions is crucial for

developing predictive models capable of assessing material integrity under service conditions.

In this study, we present a computational framework that couples phase field fracture modelling with hydrogen transport and strain-induced phase transformation. The proposed approach provides a comprehensive tool for predicting hydrogen-assisted fracture in austenitic stainless steels, incorporating key influencing factors such as stress state, phase transformation kinetics, and hydrogen diffusion. Such predictive models are essential for designing safer and more durable hydrogen infrastructure.

2. HYDROGEN TRANSPORT MODEL

Hydrogen transport is modelled using a mass balance, i.e. second Fick's law, for total hydrogen, i.e. hydrogen in austenite and hydrogen in the strain-induced martensite: $C = C_\gamma + C_{\alpha'}$. Trapping is neglected because hydrogen transport is dominated by lattice diffusion in austenitic stainless steels. Stress effects are included to capture the enhanced hydrogen diffusion, resulting in the following governing equation:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (-D \nabla C_L + D \frac{\bar{V}_H C}{RT} \nabla \sigma_h) = 0 \quad (1)$$

where σ_h is the hydrostatic stress, $\bar{V}_H$ the partial molar volume of hydrogen in steel, D the diffusion coefficient, R the constant of gases and T the temperature. Diffusivity is assumed to follow a rule of mixtures that combines the contribution of austenite and martensite to the lattice transport:

$$D = D_\gamma(1 - f_{\alpha'}) + D_{\alpha'}f_{\alpha'} \quad (2)$$

where $f_{\alpha'}$ represents the martensite volume fraction that is expressed as a function of the plastic strain, as detailed in Section 4. The rule of mixtures expressed in Eq. 2, assumes parallel diffusion and thus it is an upper bound for the diffusivity of the binary microstructure. Homogenisation techniques can be used to derive microstructure-based expressions or empirical relationships between D and $f_{\alpha'}$ can be obtained for austenitic stainless steels [1].

Diffusion coefficients for the austenitic and martensitic phase are extracted from literature. The deduction of diffusivity values for strain-induced martensite is not straightforward because the contribution of each phase must be isolated. In the present work, $D_{\alpha'}$ at room temperature is fixed as 7.84×10^{-11} m²/s [2]. For the austenitic phase, the diffusion coefficient is determined assuming an Arrhenius law, $D_\gamma = D_\gamma^0 \exp(-E_\gamma^D/RT)$, with $D_\gamma^0 = 3.91 \times 10^{-6}$ m²/s and $E_\gamma^D = 60.4$ kJ/mol [3]. At room temperature, $D_\gamma = 1.19 \times 10^{-16}$ m²/s.

Hydrogen uptake is modelled through a modified Sievert's law that is obtained assuming equilibrium between the chemical potentials of surface H₂ and sub-surface lattice hydrogen. A constant sub-surface concentration is fixed as a boundary condition:

$$C(\mathcal{B}) = K_\gamma \sqrt{f_{H_2}} \exp\left(\frac{\bar{V}_H \sigma_h}{RT}\right) \quad (3)$$

where K_γ is the solubility of hydrogen in the austenite phase and f_{H_2} the H₂ fugacity. The fugacity value accounts for the deviation of H₂ from an ideal gas at high hydrogen pressures, p_{H_2} , and it is calculated through the Abel-Noble equation:

$$f_{H_2} = p_{H_2} \exp\left(p_{H_2} \frac{b}{RT}\right) \quad (4)$$

The compressibility factor b is fixed as 15.84 cm³/mol [4]. Hydrogen concentration at the strain-induced martensite, $C_{\alpha'}$, is found by assuming equilibrium between both concentrations. The ratio between concentration in two phases can be expressed through the corresponding density of lattice sites, i.e. $N_{\alpha'}$ and N_γ , and the solubility at each phase:

$$\frac{C_{\alpha'}}{C_\gamma} = \frac{N_{\alpha'} K_{\alpha'}}{N_\gamma K_\gamma} \quad (5)$$

The solubility of hydrogen in an austenitic is extracted from literature [3] and it is equal to $K_\gamma = 5.59$ wt ppm/MPa^{0.5}. Similarly, the solubility of hydrogen in martensite is assumed equal to a quenched and tempered 4130 following [5], $K_{\alpha'} = 9.69 \times 10^{-4}$ wt ppm/MPa^{0.5}.

It is considered that the density of lattice sites for each phase depends on the its volume fraction. In addition, tetrahedral occupancy is assumed for the martensite phase and octahedral for the austenite. The concentration of hydrogen in martensite can be then found as:

$$C_{\alpha'} = \frac{6f_{\alpha'}}{1 - f_{\alpha'}} \frac{K_{\alpha'}}{K_\gamma} C_\gamma \quad (6)$$

3. FRACTURE MODEL

Damage initiation and propagation is reproduced with a phase field fracture model coupled to the hydrogen of phase field fracture modelling are based on the regularization of the crack surface energy using a characteristic length scale, ℓ . The regularised potential energy Π_ℓ , in its variational form can be expressed as a sum of a strain energy and the energy to create a crack:

$$\Pi_\ell = \int_V \psi(\varepsilon) dV + \int_V G_c \left(\frac{\phi^2}{2\ell} + \frac{\ell}{2} |\nabla \phi|^2 \right) dV \quad (7)$$

where the strain energy density ψ is expressed as a function of the strain state, ε , and integrated over the domain V . The energy to create a crack is approximated by smearing the crack over a length ℓ . The crack is modelled by the damage variable ϕ or phase field. Undamaged regions are represented by $\phi = 0$ and a totally cracked material corresponds to $\phi = 1$. The strain energy density is divided into elastic and plastic terms, damaged by the degradation functions $g(\phi)$ and $h(\phi)$, respectively:

$$\psi = g(\phi)\psi_e^0 + h(\phi)\psi_p^0 \quad (8)$$

where ψ_e^0 and ψ_p^0 are the undamaged strain energy densities, determined as a function of the strain state. The degradation function $g(\phi)$ is chosen to follow a quadratic form, $g(\phi) = (1 - \phi)^2 + k$. A numerical parameter $k = 10^{-6}$ is introduced to prevent zero stiffness in totally damaged regions. Similarly, a quadratic plastic degradation function is chosen, but a factor β_p is included to weigh the plastic contribution: $h(\phi) = \beta_p(1 - \phi)^2 + 1 - \beta_p$. Since most of the plastic work is dissipated as heat, $\beta_p = 0.1$ has been chosen following literature [6].

To prevent unphysical damage during compression, the elastic strain energy density is usually replaced by a history variable, defined as the maximum positive part of ψ_e^0 , determined here from a volumetric-deviatoric split [7]. Finite strains are considered in the present work to capture the large deformation in the simulated steels. Assuming a Ludwik isotropic hardening, the yield stress σ_y is damaged by the plastic degradation function, $h(\phi)$:

$$\sigma_y = h(\phi)[\sigma_y^0 + k_L(\varepsilon_p)^{n_L}] \quad (9)$$

where ε_p is the equivalent plastic strain, σ_y^0 the initial yield stress, k_L the Ludwik strength constant and n_L the strain hardening exponent. The phase field balance is solved in COMSOL Multiphysics as a *stabilized convection-diffusion* equation, considering the phase field ϕ as the dependent variable and the couplings with the displacement field, i.e. $\mathcal{H}_e^+$ and ψ_p^0 dependencies on the strain field, and with the hydrogen concentration, i.e. the reduction in G_c . The implementation of the phase field fracture equations coupled to the hydrogen transport model follows the approach developed by Díaz et al. [8].

The hypothesis in this work is that embrittlement is triggered by H segregation in austenite/martensite interfaces after partial phase transformation. Therefore, a linear reduction in G_c is considered as a function of the interface coverage, θ :

$$G_c = G_c^0(1 - \chi\theta) \quad (10)$$

The value of G_c^0 , i.e. the critical strain energy density in the absence of H, is determined in Section 5.1 by fitting tensile tests in air. The coverage is usually found from the concentration of diffusible hydrogen:

$$\theta = \frac{c}{c + \exp(-\Delta g_b^0/RT)} \quad (11)$$

where Δg_b^0 is a segregation energy. In the present model, $c = C_\alpha M_M / \rho$, where M_M is the molar mass of iron and ρ its density.

4. TRANSFORMATION MODEL

Kinetics of strain-induced martensitic transformation can be described by models of different complexity, including dependencies on strain, strain rate, stress state and temperature. One of the simplest models, which is here followed for the sake of simplicity is the Olson-Cohen expression of martensite volume fraction as a function of strain. In this case, the strain is assumed to be the equivalent plastic strain:

$$f_{av} = 1 - \exp\{-\beta[1 - \exp(\alpha\varepsilon_p)^n]\} \quad (12)$$

where three experimental parameters, α , β and n , determine the evolution of martensite with deformation. In the present work, experimental data of martensitic measurements after different degrees of cold rolling have been used for a 316L [9] and for a 316 [10] steel. The corresponding fitted Olson-Cohen parameters are shown in Table 1.

The evolution of the martensite volume fraction assuming these parameters, as shown in Figure 1, results in a higher content of martensite for the 316 steel than for the 316L. This lower austenite stability is caused by the different composition of both steels. The higher value of f_{av} at the same strain levels will determine diffusivity and the equilibrium hydrogen concentration, as detailed in Section 2.

Table 1. Olson-Cohen parameters for martensitic transformation of 316L and 316 steels.

	α	β	n
316L	1.8	0.3	4
316	0.91	6.46	4.5

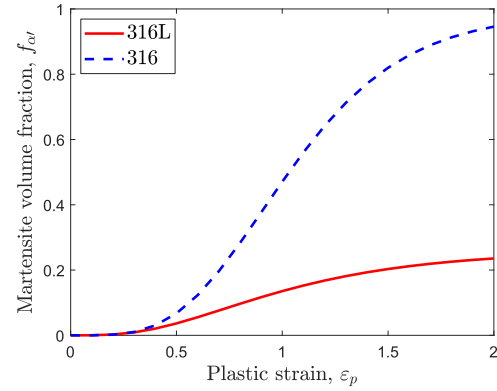


Figure 1. Evolution of martensite volume fraction with equivalent plastic strain for 316L and 316 steels following a Olson-Cohen model.

5. HYDROGEN EMBRITTLEMENT IN TENSILE TESTS

In the present section, the presented modelling framework is applied to the simulation of tensile tests of flat smooth specimens. Samples have a thickness of 3 mm and a width of approximately 5 mm. These tests have been performed in air and also under in-situ gaseous hydrogen conditions. Hydrogen tests have been carried out considering the displacement rate required by the ASTM G142-98(2022), i.e. 0.002 mm/s. The experimental testing details are described in another work [11].

A 2D model has been used to simulate these tests, exploiting symmetry and applying a remote displacement ramp, as shown in Figure 2. Plane stress conditions are assumed due to the small thickness. However, it must be noted that hydrogen entry is only simulated at the sample edge and therefore the concentration of hydrogen at the cross section is underestimated. The mesh is refined in the gage length where plasticity and damage occur, considering an element length 5 times smaller than ℓ .

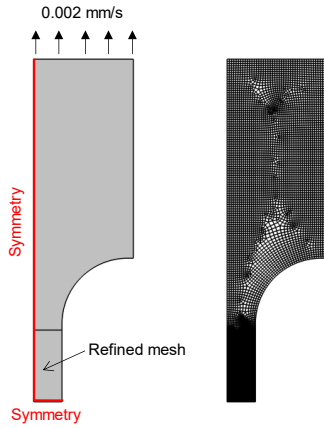


Figure 2. Modelled geometry and mesh.

5.1. Fitting parameters in air

Engineering stress and stress curves that have been experimentally obtained in the absence of hydrogen are converted in true values (Figure 3) and then fitted to a Ludwik's hardening. This hardening law has resulted in better agreement than power law or linear expressions. An initial yield stress $\sigma_y^0 = 300$ MPa and a strength constant $k_L = 1250$ MPa have been fitted for both steels. The hardening exponent has been fitted as $n_L = 0.7$ for 316L and 0.78 for 316.

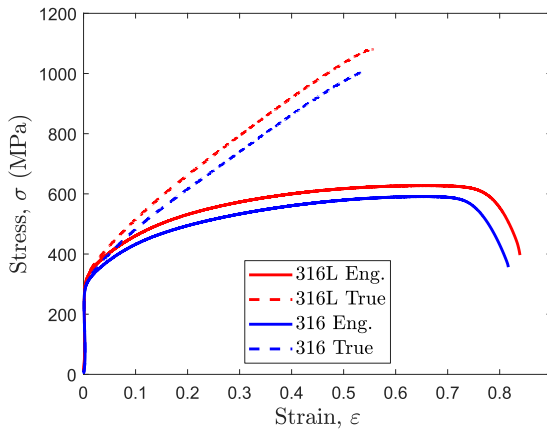


Figure 3. Stress-strain curves (engineering and true values) for 316L and 316 in the absence of hydrogen.

After the elastic-plastic parameters have been fitted, the fracture energy in the absence of hydrogen is determined by iterating over G_c^0 values for each material. In Figure 4, it is observed that $G_c^0 = 400$ N/mm results in a good agreement between experimental and numerical value for the 316L test in air.

Similarly, the curve in air for the 316 results in a $G_c^0 = 100$ N/mm. It must be noted that these fitted values would change if another length scale had been chosen. However, the G_c^0 results imply that K_{IC} is two times higher for 316L than for 316, which is in accordance with literature. These differences are also observed in the predicted fracture: damage and plastic deformation accumulate in the 316L after a strong necking, whereas

the 316L results in a more diffuse damage and lower plastic localisation (Figure 5 and 6).

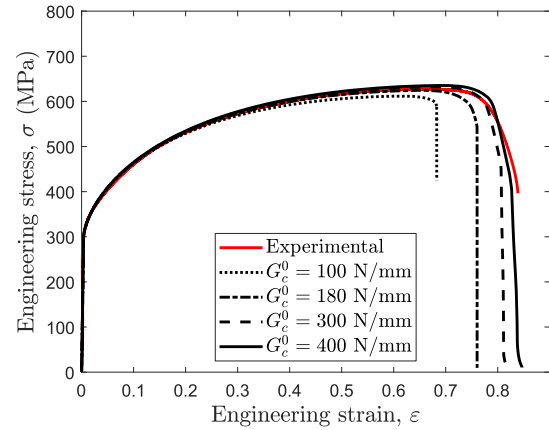


Figure 4. Fitting G_c^0 for a 316L steel through experimental-numerical comparison of engineering stress-strain curves in air.

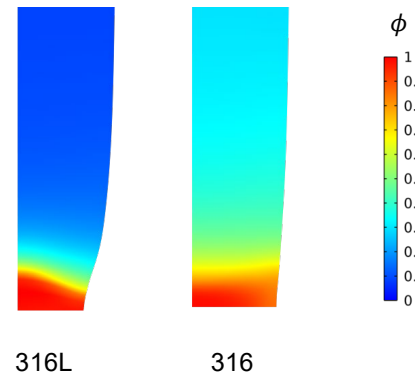


Figure 5. Damage distribution at failure for 316L and 316 materials in air.

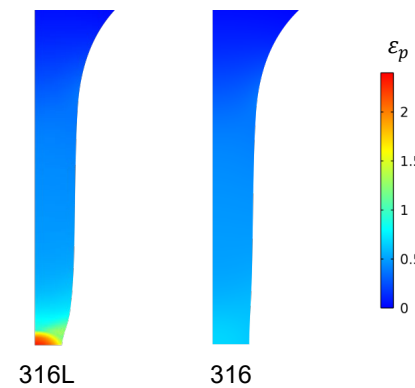


Figure 6. Equivalent plastic strain at failure for 316L and 316 materials in air.

Despite the plastic deformation at failure is much higher for the 316L due to the strain localisation, for the same deformation level the 316 steel results in a higher martensite volume fraction (Figure 7) as a consequence

of the Olson-Cohen parameters predicting an earlier strain-induced transformation.

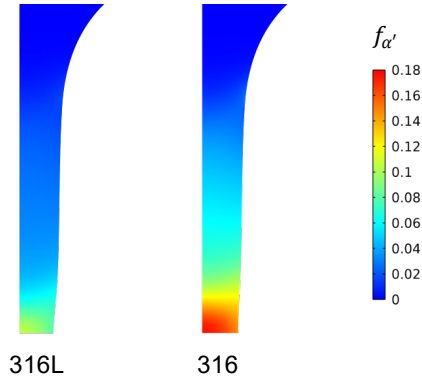


Figure 7. Martensite volume fraction at $\varepsilon = 0.78$ for 316L and 316 materials in air.

5.2. Fitting hydrogen degradation

It must be noted that even though the martensite volume fraction is higher in the 316 for the same deformation level, hydrogen uptake only occurs on outer surfaces. In addition, the displacement rate (0.002 mm/s) is too fast even for the martensite-enhanced hydrogen diffusion. All these results in a minor difference in hydrogen penetration between 316 and 316L. Figure 8 shows a slight deeper coverage accumulation near the surface for the 316 steel at the same deformation level, but without any embrittlement ($\chi = 0$).

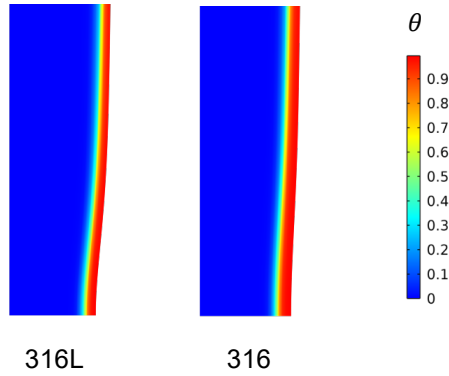


Figure 8. Hydrogen coverage at $\varepsilon = 0.78$ for 316L and 316 materials for $\chi = 0$.

The degradation coefficient is fitted for both steels. A segregation energy $\Delta g_b^0 = 52.5$ kJ/mol has been assumed for the interfaces. Two tests at 200 bar for the 316L material are compared with numerical predictions considering different χ values (Figures 9 and 10). A value of $\chi = 0.95$ results in the best prediction for the average strain at failure, $\varepsilon_f = 0.72$. Interestingly, the same $\chi = 0.95$ value gives the best prediction for embrittlement of 316, as shown in Figures 11 and 12 where numerical results are compared with a test at 200 bar. This result indicates that the same mechanism is operating in both steel grades and the different embrittlement level can be solely explained by the

different ductility and sensitivity to martensitic transformation.

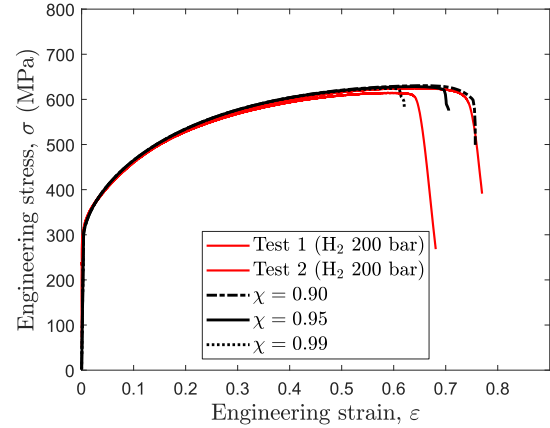


Figure 9. Comparison of engineering stress-strain curves for a 316L at 200 bar of gaseous hydrogen (experimental and numerical for different χ values).

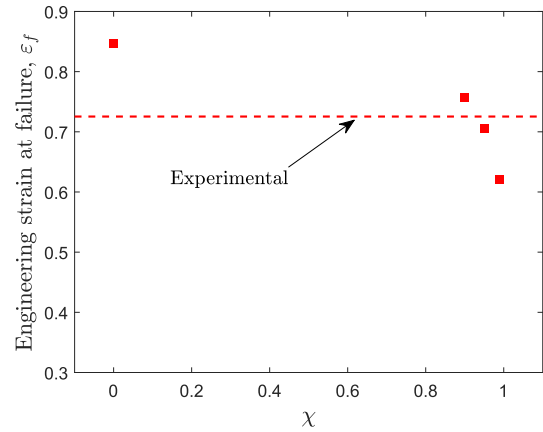


Figure 10. Fitting the degradation factor χ for a 316L steel through experimental-numerical comparison of strain at failure

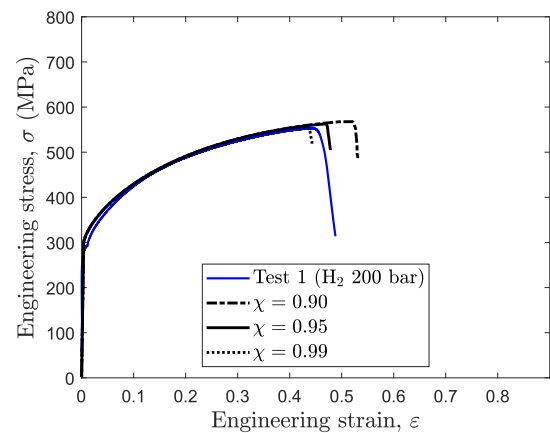


Figure 11. Comparison of engineering stress-strain curves for a 316 at 200 bar of gaseous hydrogen (experimental and numerical for different χ values).

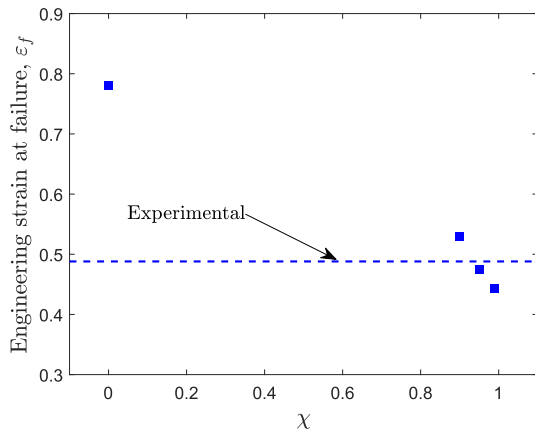


Figure 12. Fitting the degradation factor χ for a 316 steel through experimental-numerical comparison of strain at failure

6. CONCLUSIONS

The following conclusions can be drawn:

- A phase field fracture model coupled with hydrogen transport and strain-induced martensite transformation has been developed to predict hydrogen-assisted fracture in austenitic stainless steels.
- Tensile tests have been simulated for two steels, 316L and 316. The lower ductility and higher martensite transformation of the 316 steel are the causes of the stronger embrittlement, as shown experimentally and predicted by the model.
- Hydrogen degradation of martensite/austenite interfaces has been assumed as the embrittlement mechanism. This assumption gives good predictions and a degradation factor, $\chi = 0.95$, independent of the material.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors gratefully acknowledge funding from project PID2021-124768OB-C21 and from project Valor-H2 (DESMASA). This work was also supported by the Regional Government of Castilla y León (Junta de Castilla y León) by the Ministry of Science and Innovation MICIN and the European Union NextGenerationEU/PRTR through projects SafeH2 (BU-040-P23), H2MetAmo (C17.I01.P01.S21) and MA2TEC (C17.I01).

REFERENCES

- [1] Wang Y, Wang X, Gong J, Shen L, Dong W. Hydrogen embrittlement of cathodically hydrogen-precharged 304L austenitic stainless steel: Effect of plastic pre-strain. *Int J Hydrogen Energy* 2014;39:13909–18. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.04.122>.
- [2] Du Y, Gao XH, Du ZW, Lan LY, Misra RDK, Wu HY, et al. Hydrogen diffusivity in different

microstructural components in martensite matrix with retained austenite. *Int J Hydrogen Energy* 2021;46:8269–84. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.12.007>.

- [3] Yamabe J, Takakuwa O, Matsunaga H, Itoga H, Matsuoka S. Hydrogen diffusivity and tensile-ductility loss of solution-treated austenitic stainless steels with external and internal hydrogen. *Int J Hydrogen Energy* 2017;42:13289–99. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.04.055>.

- [4] Marchi CS, Somerday BP, Robinson SL. Permeability, solubility and diffusivity of hydrogen isotopes in stainless steels at high gas pressures. *Int J Hydrogen Energy* 2007;32:100–16. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2006.05.008>.

- [5] San Marchi C, Somerday BP. Technical reference on hydrogen compatibility of materials. SAND2008-1163), Sandia National Laboratories, Livermore CA 2008.

- [6] McAuliffe C, Waisman H. A coupled phase field shear band model for ductile–brittle transition in notched plate impacts. *Comput Methods Appl Mech Eng* 2016;305:173–95. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2016.02.018>.

- [7] Amor H, Marigo JJ, Maurini C. Regularized formulation of the variational brittle fracture with unilateral contact: Numerical experiments. *J Mech Phys Solids* 2009;57:1209–29. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2009.04.011>.

- [8] Díaz A, Alegre JM, Cuesta I, Martínez-Pañeda E. A COMSOL framework for predicting hydrogen embrittlement-Part II: phase field fracture. *Eng Frac Mech*. 2025 (In Press)

- [9] Odnobokova M, Belyakov A, Kaibyshev R. Grain refinement and strengthening of austenitic stainless steels during large strain cold rolling. *Philosophical Magazine* 2019;99:531–56. <https://doi.org/10.1080/14786435.2018.1546961>.

- [10] Naghizadeh M, Mirzadeh H. Modeling the kinetics of deformation-induced martensitic transformation in AISI 316 metastable austenitic stainless steel. *Vacuum* 2018;157:243–8. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2018.08.066>.

- [11] Medina L, Rodríguez-Aparicio R, Lozano LM, Díaz A, Cuesta II, Alegre JM. Estudio de la fragilización por hidrógeno en conducciones del acero 316L curvados con diferentes niveles de deformación plástica. Congreso del Grupo Español de Fractura, 2025.

IMPLEMENTACIÓN MEDIANTE ELEMENTOS FINITOS DE LA TÉCNICA PHASE-FIELD PARA FRACTURA EN SOLID SHELLS CON COMPORTAMIENTO MATERIAL INELÁSTICO

Ángel Valverde-González^{1*}, Pavan Kumar Asur Vijaya Kumar², Adrià Quintanas-Corominas³, José Reinoso^{4,5,6}

¹ Materiales y Sostenibilidad, Departamento de Ingeniería, Universidad Loyola Campus Sevilla, Av. de las Universidades, 2, 41704 Dos Hermanas, Sevilla.

² Institute of Lightweight Design and Structural Biomechanics, Technische Universität Wien, Getreidemarkt 9, 1060 Vienna, Austria.

³ Barcelona Supercomputing Center (BSC), Plaça Eusebi Güell, 1-3, Barcelona, 08034 Catalunya.

⁴ Grupo de Ingeniería de Materiales y Estructuras. Departamento de Mecánica de Medios Continuos y Teoría de Estructuras, Universidad de Sevilla, Escuela Técnica superior de Ingeniería, Camino de los Descubrimientos s/n, 41092 Sevilla.

⁵ Escuela Politécnica Superior, Universidad de Sevilla, C/ Virgen de África, 41011 Sevilla.

⁶ ENGREEN - Laboratory of Engineering for Energy and Environmental Sustainability, Universidad de Sevilla.

* Persona de contacto: ajvalverde@uloyola.es

RESUMEN

La modelización de placas y láminas mediante la formulación de *solid shell* ha suscitado un notable interés en las últimas décadas debido, principalmente, a la sencilla descripción que hace de la cinemática dentro del marco de elementos finitos y a la posibilidad de utilizar modelos tridimensionales de material sin modificaciones, entre otras ventajas. En este trabajo, se presenta una implementación exhaustiva de elementos finitos para placas con formulación de *solid shell* que integra: (i) las técnicas de *Enhanced Assumed Strain* (EAS) y *Assumed Natural Strain* (ANS) para evitar problemas de bloqueo, (ii) la técnica *phase-field* como herramienta para modelar procesos de fractura, y (iii) diversos modelos representativos de comportamiento material inelástico y no lineal. La implementación propuesta se ha llevado a cabo en el software de elementos finitos ABAQUS mediante la subrutina UEL definida por el usuario. Finalmente, se presentan varios ejemplos de referencia que validan la eficacia y la versatilidad de la formulación desarrollada.

PALABRAS CLAVE: phase-field para fractura, método de los elementos finitos, solid shells, plasticidad, visco-hiperelasticidad, visco-hiperplasticidad.

ABSTRACT

The parametrization of shell structures using the so-called solid shell concept has been widely exploited in the last decades. This trend is mainly attributed to the relatively simple kinematic treatment of solid shells in the corresponding finite element formulation in conjunction with the use of unmodified three-dimensional material laws, among other aspects. In the present investigation, we provide a comprehensive finite element implementation of solid shells incorporating: (i) the use of *Enhanced Assumed Strain* (EAS) and the *Assumed Natural Strain* (ANS) methods to prevent locking issues, (ii) the phase-field approach for triggering fracture events, and (iii) some representative inelastic material models. The current modular implementation has been integrated into the FE package ABAQUS via the user-defined routine UEL. Several representative examples demonstrate the applicability of the present formulation.

KEYWORDS: phase-field for fracture, finite element method, solid shells, plasticity, visco-hyperelasticity, visco-hyperplasticity.

1. INTRODUCCIÓN

Las estructuras tipo *shells* están presentes en numerosas aplicaciones de ingeniería y han sido utilizadas desde el origen de la civilización. A diferencia de las estructuras de vigas y columnas, que dependen de elementos unidimensionales para soportar cargas externas, las *shells* consisten en superficies curvas y delgadas que son usadas para lograr formas arquitectónicas resistentes y ligeras. En la actualidad, la revolución industrial y tecnológica del siglo XXI, mediante la incorporación del diseño paramétrico, nuevos materiales y técnicas de fabricación digital, ha impulsado e innovado su uso. Un ejemplo

puede encontrarse en los diseños biomiméticos, los cuales se inspiran en estructuras naturales para optimizar la eficiencia y la adaptabilidad de las *shells*.

El estudio de la fractura en *shells* es crucial, especialmente en materiales con respuesta no lineal, como los elastoplásticos y viscoelásticos, que son los que simulan condiciones más realistas. El desarrollo de métodos numéricos robustos para modelar la respuesta inelástica de estos materiales junto con la fractura sigue representando un desafío técnico y científico. En este contexto, la técnica de *phase-field* ha demostrado ser una herramienta versátil para la predicción de fractura en

sólidos [1-2], basado en la visión energética de Griffith [3] y sus desarrollos posteriores. En este marco existen distintas formulaciones para tratar la descomposición tensión-compresión [4-5], la fractura dúctil [6] y la fractura en materiales anisotrópicos [7], entre otros.

Sin embargo, la aplicación de la técnica de *phase-field* en *shells* ha recibido menos atención. Por un lado, se han realizado trabajos utilizando diferentes modelos estructurales [8-9]. Por el otro lado, la modelización de fractura en estructuras tipo *solid shells* ha ganado mucha importancia en la última década, las cuales emplean técnicas como el *Assumed Natural Strain* (ANS) y el *Enhanced Assumed Strain* (EAS) para mitigar el bloqueo numérico [10]. La modelización de *solid shell* presenta ventajas al permitir la integración directa de modelos sofisticados [11] dentro del marco del Método de los Elementos Finitos.

Actualmente, muy pocas formulaciones han integrado el modelado de *solid shells* con la técnica de *phase-field* [12-13], habiendo una notable carencia en la literatura para fractura inelástica. Por ese motivo, en este trabajo se presenta la implementación de tres modelos de *phase-field* para la simulación de fractura en *solid shells* para un material hiperplástico, un material visco-hiperelástico y un material visco-hiperplástico. Dichas implementaciones han sido validadas mediante pruebas numéricas en placas y cilindros con agujeros circulares sometidos a cargas mixtas de flexión y tracción, en los cuales se ha conseguido capturar el fallo de dichas *shells* de una forma conclusiva y se ha caracterizado su comportamiento mecánico ante fractura.

2. FORMULACIÓN TEÓRICA

2.1. Cinemática de las *solid shells*

La configuración de referencia de una *solid shell*, denotada $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^n$, se compone de una serie de puntos arbitrarios cuya posición es $\mathbf{X}$, y de una discontinuidad interna Γ_1 . Si hay deformación, la configuración de referencia se mapea a una correspondiente configuración actual $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ con vectores de posición tales que $\mathbf{x}(\mathbf{X}, t)$ en un tiempo arbitrario t en el intervalo $\mathcal{T} = [0, t]$.

La *solid shell* se parametriza mediante un conjunto de coordenadas curvilíneas $\xi^i (i = 1, 2, 3)$ donde ξ^1 y ξ^2 representan la superficie media en el plano y ξ^3 la dirección, del espesor, donde el vector $\boldsymbol{\xi} = \{\xi^1, \xi^2, \xi^3\}$. La deformación del cuerpo se produce debido a las condiciones de contorno de Dirichlet, impuesta mediante el campo de desplazamientos $\mathbf{u}$ en el contorno del sólido $\partial\Omega_{0,u}$, y a las condiciones de contorno de Neumann, dadas por la tracción $\mathbf{T}$ en el contorno $\partial\Omega_{0,t}$. La transformación de los puntos del material asociados a la configuración de referencia a la configuración actual se caracteriza con el tensor gradiente de deformaciones $\mathbf{F}$, que se define:

$$\mathbf{F} := \nabla_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{1} + \frac{d\mathbf{u}}{d\mathbf{x}} \quad (1)$$

donde $\mathbf{1}$ es el tensor de identidad de segundo orden. Los vectores base covariantes y contra variantes en coordenadas curvilíneas se definen en la configuración de referencia:

$$\mathbf{G}_i(\boldsymbol{\xi}) := \frac{\partial \mathbf{X}(\boldsymbol{\xi})}{\partial \xi^i}; \quad \mathbf{G}^i(\boldsymbol{\xi}) := \frac{\partial \mathbf{X}(\boldsymbol{\xi})}{\partial \xi_i}. \quad (2)$$

Pudiendo obtenerse en la configuración actual como:

$$\mathbf{g}_i(\boldsymbol{\xi}) := \frac{\partial \mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})}{\partial \xi^i}; \quad \mathbf{g}^i(\boldsymbol{\xi}) := \frac{\partial \mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})}{\partial \xi_i}. \quad (3)$$

Los vectores de posición en las configuraciones de referencia $\mathbf{X}$ y actual $\mathbf{x}$ están representados por los puntos de la superficie inferior $\mathbf{X}_b, \mathbf{x}_b$ y superior $\mathbf{X}_t, \mathbf{x}_t$, ya que la evaluación de la *solid shell* se hace en la superficie media, tal y como se puede ver en la Fig. 1. Por lo tanto, dichos vectores de posición quedan expresados como:

$$\mathbf{X}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2} (1 + \xi^3) \mathbf{X}_t(\xi^1, \xi^2) + \frac{1}{2} (1 - \xi^3) \mathbf{X}_b(\xi^1, \xi^2) \quad (4)$$

$$\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2} (1 + \xi^3) \mathbf{x}_t(\xi^1, \xi^2) + \frac{1}{2} (1 - \xi^3) \mathbf{x}_b(\xi^1, \xi^2) \quad (5)$$

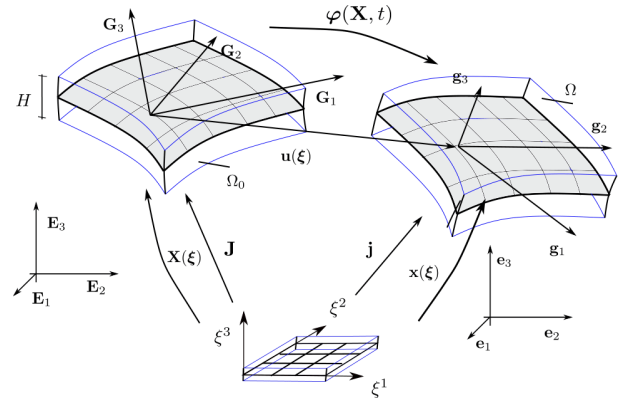


Figura 1. *Solid shell* expresada en el sistema de coordenadas curvilíneas. Los sistemas de coordenadas para las configuraciones de referencia Ω_0 y actual Ω_t se denotan por $\{\mathbf{E}_i\}_{i=1,3}$ y $\{\mathbf{e}_i\}_{i=1,3}$, respectivamente.

2.2. Enfoque a fractura de *phase-field*

La variable de *phase-field* $\mathfrak{d}(\mathbf{X}, t)$ se utiliza para definir el estado del sólido a nivel de punto material como:

$$\mathfrak{d}(\mathbf{X}, t): \Omega_0 \times \mathcal{T} \rightarrow [0, 1] \quad (6)$$

donde $\mathfrak{d}(\mathbf{X}, t) = 0$ denota un punto intacto y $\mathfrak{d}(\mathbf{X}, t) = 1$ denota un punto completamente roto, todos ellos con respecto a la configuración de referencia.

La técnica *phase-field* se basa en la competición entre la densidad de energía de deformación Ψ y la energía de fractura $\mathcal{G}_c$. De acuerdo con la teoría de Griffith para fractura frágil [3], durante la propagación, la energía a fractura se incrementa debido a la creación de superficies de grieta. Este desarrollo causa una reducción en la Ψ almacenada en el sólido. Por lo tanto, la formulación

establece que cuando la energía de deformación almacenada se iguala con el incremento en la energía asociada a la superficie de grieta, esta propaga. La tasa de liberación de energía es $\mathcal{G}$, siendo $\mathcal{G}_c$ el valor crítico asociado con una propagación inestable. Esta competición de ambos términos puede ser expresada en el potencial del problema Π .

$$\Pi(\mathbf{E}) = \int_{\Omega/\Gamma} \Psi(\mathbf{E}) dV + \int_{\Gamma} \mathcal{G}_c dA - \Pi_{\text{ext}} \quad (7)$$

donde $\mathbf{E}$ es el tensor de deformación de Green-Lagrange. El enfoque variacional de Francfort y Marigo [1] sustituye la idea de una grieta aguda y regulariza el problema introduciendo una región de gradiente que discretiza la zona de material intacto a dañado. Dicha técnica de regularización se emplea para modificar el segundo término de la Ecuación (6), la cual constituye una base importante del problema del “phase-field”:

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} \mathcal{G}_c dA &\approx \int_{\Omega} \mathcal{G}_c \gamma_l(\mathbf{d}, \nabla \mathbf{d}) dV \\ &= \int_{\Omega} \mathcal{G}_c \left(\frac{1}{2l} \mathbf{d}^2 + \frac{1}{2} |\nabla_x \mathbf{d}|^2 \right) dV \end{aligned} \quad (8)$$

donde $\gamma_l(\mathbf{d}, \nabla \mathbf{d})$ es la función de densidad de superficie de grieta, la cual sigue la formulación AT-2 [2].

2.3. Términos del tensor de Green-Lagrange

Al trabajar en formulación de *solid-shell*, el tensor de deformación de Green-Lagrange es descompuesto en dos contribuciones: primero, $\mathbf{E}^u$, que es al que se llega a partir del desplazamiento, y se puede obtener las expresiones del tensor métrico expresado en la ecuación (9).

$$\mathbf{G} = G^{ij} \mathbf{G}_i \otimes \mathbf{G}_j = G_{ij} \mathbf{G}^i \otimes \mathbf{G}^j \quad (9)$$

con $G_{ij} = \mathbf{G}_i \cdot \mathbf{G}_j$ y $G^{ij} = \mathbf{G}^i \cdot \mathbf{G}^j$. Gracias, a la ecuación (9), se puede obtener la expresión para $\mathbf{E}^u$:

$$\begin{aligned} E^u &= \frac{1}{2} [(\mathbf{F}^u)^T \cdot \mathbf{F}^u - \mathbf{G}_i \cdot \mathbf{G}_j] (\mathbf{G}^i \otimes \mathbf{G}^j) \\ &= \frac{1}{2} [\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j - \mathbf{G}_i \cdot \mathbf{G}_j] (\mathbf{G}^i \otimes \mathbf{G}^j) \\ &= \frac{1}{2} [g_{ij} - G_{ij}] (\mathbf{G}^i \otimes \mathbf{G}^j) \end{aligned} \quad (10)$$

El otro término del tensor de deformación de Green-Lagrange viene para afrontar los problemas de bloqueo que son inherentes al modelado de sólidos con poco espesor como son las *solid shells*, lo que se conoce como un *enhancing term* $\tilde{\mathbf{E}}$. En el caso que nos atañe, tendremos uno para el EAS y otro para el ANS. En el primer caso, el *Enhanced Assumed Strain* (EAS) se usa para aliviar los efectos de bloqueo de membrana y de Poisson, definiéndose para ello un término de mejora del tensor de Green-Lagrange que viene de la consideración de deformaciones incompatibles que enriquecen al polinomio de interpolación del algoritmo de MEF:

$$\tilde{\mathbf{E}}_{EAS} = \left[\frac{\det \mathbf{J}_0}{\det \mathbf{J}} \right] \mathbf{T} \mathbf{M}(\boldsymbol{\xi}) \boldsymbol{\varsigma} \quad (11)$$

donde $\boldsymbol{\varsigma}$ es el vector de deformaciones incompatibles, $\mathbf{M}(\boldsymbol{\xi})$ es una matriz de interpolación local; y $\mathbf{J}_0$ y $\mathbf{J}$ son los jacobianos de referencia, evaluándose el primero en el centro del elemento.

La otra técnica que se usa para aliviar el bloqueo es el *Assumed Natural Strain* (ANS). Dicha técnica consiste en el cálculo de deformaciones de Green-Lagrange de cizalla para el bloqueo transversal $\{\tilde{\mathbf{E}}_{ANS,13}, \tilde{\mathbf{E}}_{ANS,23}\}$ y a lo largo del espesor para el bloqueo trapezoidal $\{\tilde{\mathbf{E}}_{ANS,33}\}$ en diferentes puntos de colocación en la superficie a mitad del espesor en la *solid shell*. Dichos puntos de colocación pueden observarse en la Fig. 2.

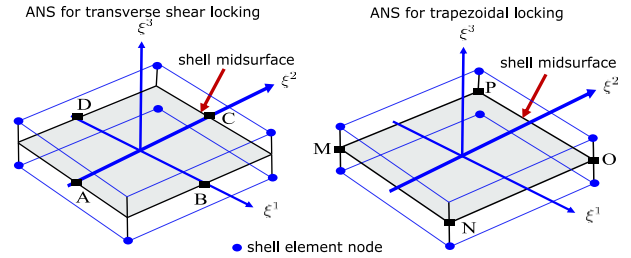


Figura 2. Aplicación del método ANS: identificación de los puntos de colocación para el alivio de bloqueo de deformación a cizalla (imagen izquierda) y trapezoidal (imagen derecha).

2.4. Materiales estudiados

- **Hiperplasticidad:** según [14], la captura de la fractura dúctil usando *phase-field* se lleva a cabo mediante la descomposición de la función de energía libre de Helmholtz Ψ en una contribución elástica Ψ_{elas} y plástica Ψ_{plas} . Por lo tanto, el funcional dado en la ecuación (7) toma la forma:

$$\begin{aligned} \Pi(\mathbf{E}, \tilde{\mathbf{E}}, \mathbf{Y}, \mathbf{d}) &= \int_{\Omega_0} [g(\mathbf{d}) \Psi_+^{elas}(\mathbf{E}, \mathbf{E}^p) + \Psi_-^{elas}(\mathbf{E}, \mathbf{E}^p) \\ &\quad + g(\mathbf{d}) \Psi^{plas}(\mathbf{Y})] dV \\ &\quad + \int_{\Omega} \mathcal{G}_c \left(\frac{1}{2l} \mathbf{d}^2 + \frac{1}{2} |\nabla_x \mathbf{d}|^2 \right) dV \end{aligned} \quad (12)$$

donde $g(\mathbf{d})$ representa la degradación del material en función del campo de daño $\mathbf{d}$, $\mathbf{E}$ es el tensor de Green-Lagrange de deformación en la configuración de referencia, $\mathbf{E}^p$ la contribución plástica a dicho tensor y $\mathbf{Y}$ un parámetro interno asociado a la plasticidad. Para más detalle en cada término, debido a la longitud de la formulación, referimos al lector a la referencia [14], la cual se usa de base para montar la *solid shell* hiperplástica.

- **Visco-hiperelastividad:** la ley material que se va a seguir presenta una parte elástica $\Psi^{\text{elas}}(\mathbf{E})$ y viscosa $\Psi^{\text{visco},\alpha}(\mathbf{E}, \mathbf{A})$, la cual puede tener múltiples mecanismos de viscosidad denotados como α :

$$\Psi(\mathbf{E}, \mathbf{A}) = \Psi^{\text{elas}}(\mathbf{E}) + \sum_{\alpha=1}^n \Psi^{\text{visco},\alpha}(\mathbf{E}, \mathbf{A}) \quad (13)$$

donde, a su vez, la contribución elástica puede ser dividida en una contribución desviadora y volumétrica:

$$\Psi^{\text{elas}}(\mathbf{E}) = \Psi^{\text{dev}} + \Psi^{\text{vol}}; \quad (14)$$

$$\Psi^{\text{dev}} = \frac{\mu}{2} (\bar{I}_1 - 3), \quad \Psi^{\text{vol}} = \frac{K}{2} (J - 1)^2 \quad (15)$$

donde μ y K son el módulo a cizalla y el módulo de compresibilidad, respectivamente; y $\bar{I}_1 = J^{-2/3} I_1$.

En lo referente a la parte viscoelástica, esta se define a partir de la incorporación del modelo microscópico en la ley de hiperelastividad macroscópica, propuesto por [15]. A partir de esta formulación, se define el tensor $\mathbf{A}$, el cual proporciona información asociada a la microdeformación de la subred viscoelástica. Por lo tanto, el término de la energía de Helmholtz asociado a dicha contribución se define como:

$$\Psi^{\text{visco},\alpha}(\mathbf{E}, \mathbf{A}) = \frac{1}{4} \mu^{\text{visco},\alpha} [(\mathbf{A}^{(\alpha)} : \bar{\mathbf{E}}) - \ln(\det \mathbf{A}^{(\alpha)})] \quad (16)$$

donde $\mu^{\text{visco},\alpha}$ es el módulo a cizalla de la rama viscoelástica α .

- **Visco-hiperplasticidad:** siguiendo la fórmula implementada por [16], definimos el material como uno tipo Kirchhoff-Saint Venant:

$$\Psi(\mathbf{E}) = \frac{1}{2} \lambda (\text{tr}[\mathbf{E}])^2 + \mu \text{tr}[\mathbf{E}^2]. \quad (18)$$

y a dicha función de energía, se le añade una contribución asociada a la plasticidad, la cual es dependiente de la velocidad de cizalla $\dot{\gamma}$ y se actualiza mediante un algoritmo J-2 tipo *return mapping*. Se define como:

$$f(\mathbf{M}^e, \beta) = ||s|| - \sqrt{2} k(\beta) \left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_0} \right)^m; \quad s = \text{dev} \boldsymbol{\tau} \quad (19)$$

donde $\mathbf{M}^e$ es el tensor elástico de tensiones de Mandel, $k(\beta)$ es el módulo de endurecimiento plástico isotrópico dependiente del parámetro de endurecimiento β ; $\boldsymbol{\tau}$ es el tensor de tensiones de Kirchhoff; $\dot{\gamma}_0$ es la velocidad de deformación a cizalla límite para causar deformación plástica y m es la sensibilidad al *ratio* de la velocidad. Para más información con respecto al tratamiento de este material, se invita a los lectores a mirar la referencia [17].

3. RESULTADOS

3.1 Placa asimétrica doblemente entallada

Se examina una probeta de doble entalladura dispuesta asimétricamente con la superficie inferior con una condición de contorno de apoyos fijos, mientras que la

superficie superior tiene un desplazamiento vertical hasta el fallo de dicha placa. En este contexto, se han realizado varios análisis paramétricos con los tres materiales diferentes para demostrar el potencial de las formulaciones implementadas.

Para empezar, en la Fig. 3 se muestra la evolución de la grieta para uno de los casos de material hiperplástico, para demostrar que la implementación es capaz de llevar a resultados conclusivos coherentes con la teoría. Puede observarse como la nucleación del fallo comienza en las vecindades de la entalla de forma simultánea para ambos lados y como la trayectoria que siguen ambas fisuras termina por converger en el centro.

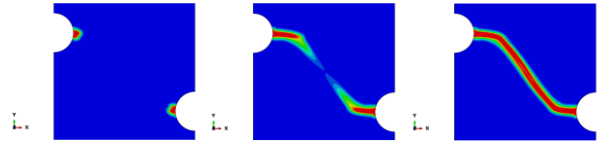


Figura 3. Isocontornos del parámetro de phase-field para la probeta doblemente entallada con material hiperplástico. Se representa la evolución de la grieta para $\Psi_0 = 5 \text{ N/mm}$.

A continuación, se presentan aquí varias gráficas en las que se observa que el comportamiento mecánico se ve influido por los parámetros intrínsecos a cada ley material, lo cual demuestra la correcta implementación de cada teoría. Primero, en la Fig. 4 se representan las curvas fuerza-desplazamiento para diferentes casos de material hiperplástico en los que se ve la influencia del parámetro de Ψ_0 , que se define como el *threshold* para que haya fractura dúctil, ya sea para prolongar la fractura más en el régimen plástico o para que el mecanismo de propagación de la grieta cambie.

En cuanto a los materiales visco-hiperelástico y visco-hiperplástico, en las Figs. 5 y 6, respectivamente, se presentan también varias curvas fuerza-desplazamiento en la que se observa la influencia de la velocidad de ensayo, incrementando la carga máxima en la que se propaga la grieta para mayores velocidades de deformación.

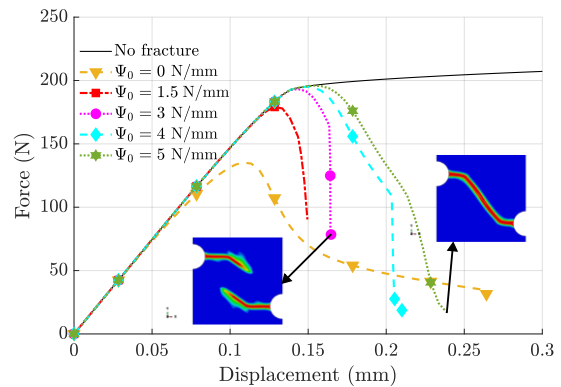


Figura 4. Curvas fuerza-desplazamiento para varios valores diferentes de Ψ_0 en la placa hiperplástica.

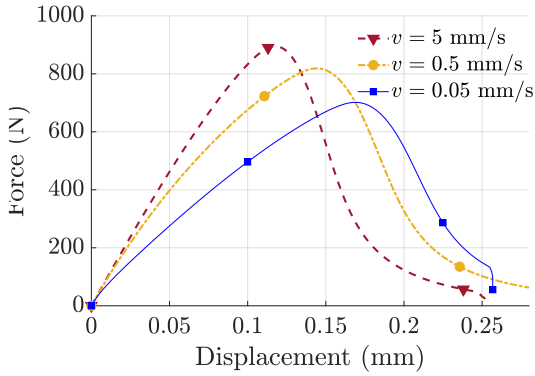


Figura 5. Curvas fuerza-desplazamiento para varios valores diferentes de velocidad de ensayo en la placa visco-hiperelástica.

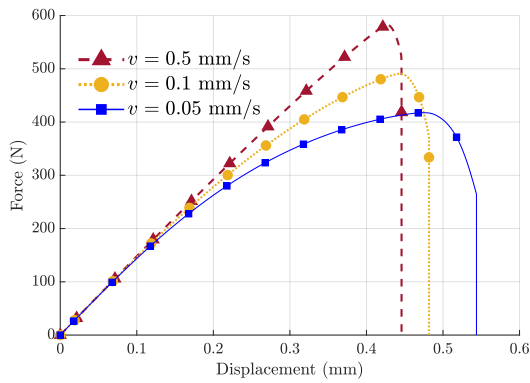


Figura 6. Curvas fuerza-desplazamiento para varios valores diferentes de velocidad de ensayo en la placa visco-hiperplástica.

3.2 Cilindro con un agujero bajo condiciones de carga mixta.

Por último, se considera una *solid shell* de tipo cilíndrico con un agujero en el centro bajo condiciones de carga a tracción y flexión, por lo que la activación de los parámetros ANS y EAS es muy conveniente para evitar los fenómenos de bloqueo.

En la Fig. 7 se representan curvas fuerza-desplazamiento para diferentes parámetros de Ψ_0 . Se puede decir que la implementación es lo suficientemente robusta para capturar regímenes dúctiles prolongados bajo condiciones de carga mixta que en interpolaciones simples darían lugar a situaciones de bloqueo.

Por último, en la Fig. 8 se observa que también para dichas condiciones tan complejas conseguimos capturar la dependencia de la velocidad de ensayo llegando a resultados conclusivos sin mostrar patologías de bloqueo. El patrón de fractura para un material viscoelástico se presenta en la Fig. 9, mostrando una dirección de propagación de grieta perpendicular a la carga a tracción, a pesar de la inclusión de flexiones en el cilindro.

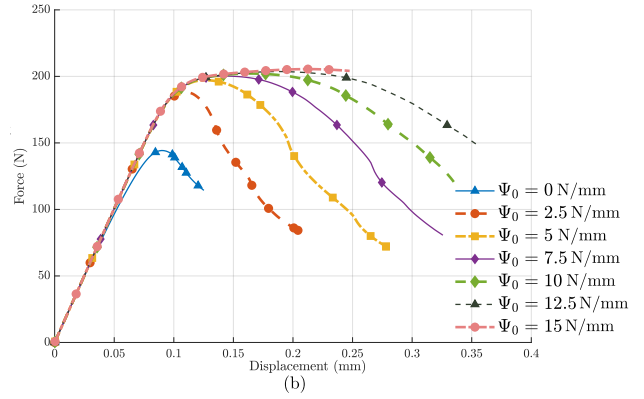


Figura 7. Curvas fuerza-desplazamiento para varios valores diferentes de Ψ_0 en el cilindro hiperplástico.

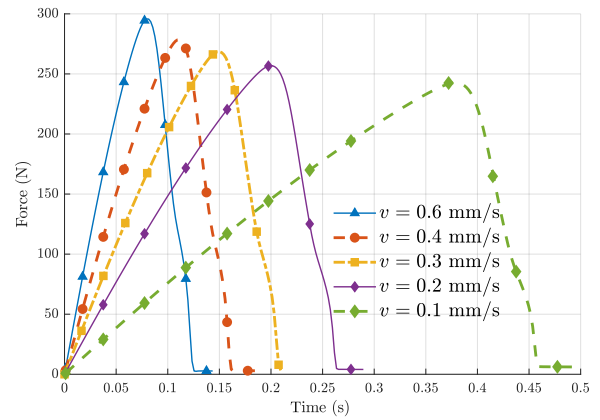


Figura 8. Curvas fuerza-desplazamiento para varios valores diferentes de Ψ_0 en el cilindro visco-hiperelástico.

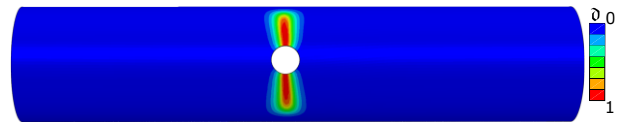


Figura 9. Isocontornos del parámetro de phase-field para el cilindro con un agujero sometido a cargas de flexión y tracción, simultáneamente. Se representa la evolución para un material hiper-viscoplastico con una velocidad de reacción de $v = 0.5 \text{ mm/s}$.

4. CONCLUSIONES

En este trabajo se ha presentado la implementación numérica de un código FEM no lineal que integra modelos hiperplásticos, visco-hiperelásticos y visco-hiperplásticos en el modelado de *solid shells* para el análisis de fractura. Se han incorporado las técnicas EAS y ANS para mitigar bloqueos numéricos y la técnica de *phase-field* para la simulación de grietas.

La formulación propuesta ha sido validada mediante experimentos numéricos en placas doblemente entalladas con disposición asimétrica para capturar la fractura dúctil. Dichas implementaciones han mostrado la

capacidad para capturar trayectorias de grieta y efectos plásticos en *solid shells*. A continuación, se han aplicado dichas implementaciones en geometrías cilíndricas sometidas a cargas mixtas, reafirmando su capacidad para representar desplazamientos grandes y regímenes plásticos bastante prolongados en condiciones de carga que para formulaciones de MEF simple se verían dificultadas por los fenómenos de bloqueo numérico.

En conclusión, los resultados demuestran el potencial que esta formulación puede tener para aplicaciones industriales, como en los sectores aeroespacial y automotriz, donde los efectos mecánicos inelásticos y la fractura en placas y láminas son aspectos clave. Por ello, los algoritmos de MEF se han publicado en línea, permitiendo que investigadores que modelan la fractura en placas y láminas inelásticas puedan beneficiarse de esta implementación para así facilitar el desarrollo de sus estudios.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero del Ministerio de Ciencia e Innovación de España (Proyectos TED2021-131649B-I00 y PID2020-117001GB-I00/AEI/10.13039/501100011033).

REFERENCIAS

- [1] G. Francfort, J.-J. Marigo, *Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids 46 (8) (1998) 1319–1342.
- [2] B. Bourdin, G. A. Francfort, J. J. Marigo, *Numerical experiments in revisited brittle fracture*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids 48 (4) (2000) 797–826.
- [3] A. Griffith, *The Phenomena of Rupture and Flow in Solids*, Philosophical Transactions A, 221 (1920) 163–198.
- [4] H. Amor, J.-J. Marigo, C. Maurini, *Regularized formulation of the variational brittle fracture with unilateral contact: Numerical experiments*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids 57 (8) (2009) 1209–1229.
- [5] C. Miehe, M. Hofacker, F. Welschinger, *A phase field model for rate-independent crack propagation: Robust algorithmic implementation based on operator splits*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 199 (2010) 2765–2778.
- [6] A. Dean, J. Reinoso, N. Jha, E. Mahdi, R. Rolfes, *A phase field approach for ductile fracture of short fibre reinforced composites*, Theoretical and Applied Fracture Mechanics 106 (2020) 102495.
- [7] O. Gültekin, H. Dal, G. A. Holzapfel, *A phase-field approach to model fracture of arterial walls: Theory and finite element analysis*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 312 (2016) 542–566.
- [8] H. Ulmer, M. Hofacker, C. Miehe, *Phase field modeling of fracture in plates and shells*, PAMM 12 (1) (2012) 171–172.
- [9] G. Kikis, M. Ambati, L. De Lorenzis, S. Klinkel, *Phase-field model of brittle fracture in reissner–mindlin plates and shells*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 373 (2021) 113490.
- [10] M. Schwarze, S. Reese, *A reduced integration solid-shell finite element based on the eas and the ans concept—large deformation problems*, International Journal for Numerical Methods in Engineering 85 (3) (2011) 289–329.
- [11] P. K. A. V. Kumar, A. Dean, S. Sahraee, J. Reinoso, M. Paggi, *Non-linear thermoelastic analysis of thin-walled structures with cohesive-like interfaces relying on the solid shell concept*, Finite Elements in Analysis and Design 202 (2022) 103696.
- [12] J. Reinoso, M. Paggi, C. Linder, *Phase field modeling of brittle fracture for enhanced assumed strain shells at large deformations: formulation and finite element implementation*, Computational Mechanics 59 (6) (2017) 981–1001.
- [13] Z. Liu, J. Reinoso, M. Paggi, *Phase field modeling of brittle fracture in large-deformation solid shells with the efficient quasi-newton solution and global–local approach*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 399 (2022).
- [14] M. J. Borden, T. J. Hughes, C. M. Landis, A. Anvari, I. J. Lee, *A phase-field formulation for fracture in ductile materials: Finite deformation balance law derivation, plastic degradation, and stress triaxiality effects*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 312 (2016) 130–166.
- [15] C. Linder, M. Tkachuk, C. Miehe, *A micromechanically motivated diffusion-based transient network model and its incorporation into finite rubber viscoelasticity*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids 59 (10) (2011).
- [16] S. Chester (2008).
- [17] A. Valverde-González, P. K. A. V. Kumar, A. Quintanas-Corominas, J. Reinoso, *A finite element implementation of phase-field approach of fracture for nonlinear solid shells including inelastic material behavior*, Engineering Fracture Mechanics 304 (2024), 110123.

MEJORA DE LA METODOLOGÍA PHASE-FIELD PARA LA FRACTURA DÚCTIL MEDIANTE EL USO DE LA TÉCNICA EAS EN PROBLEMAS DE BLOQUEO

P. Olivares-Rodríguez^{ab*}, J. Reinoso^{ab}, A. Quintanas-Corominas^c, I. G. García^b

^aGrupo de Ingeniería de Estructuras y Materiales, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Sevilla
C/ Virgen de África 7, 41011 Sevilla, España

^bDepartamento de Mecánica de Medios Continuos y Teoría de Estructuras, Escuela Técnica Superior de Ingeniería,
Universidad de Sevilla, Camino de los Descubrimientos S/N, 41092 Sevilla, España

^cBarcelona Supercomputing Center Plaza Eusebi Güell 1-3, Barcelona, España

*Persona de contacto: polivares@us.es

RESUMEN

Los problemas de bloqueo son una patología bien conocida que afectan a los modelos de carácter elastoplástico debido a fenómenos de incompresibilidad. Su efecto y mecanismos de alivio para su resolución han sido estudiados durante varias décadas. Uno de estos mecanismos se basa en la mejora de la formulación a nivel de elemento del campo de desplazamientos, mediante la introducción de técnicas de “Enhanced Assumed Strains” (EAS). Dicha metodología radica en la introducción de un campo de deformaciones “incompatible”, que permite suplir la deficiencia de la aproximación del campo de desplazamientos debido a la falta de términos para el establecimiento de polinomios completos. Este trabajo persigue el estudio de cómo el bloqueo influencia las soluciones en modelos elastoplásticos dentro del contexto de la fractura dúctil, desarrollando una metodología específica de implementación de la técnica EAS. Además, esta metodología se validará con una serie de ejemplos representativos.

PALABRAS CLAVE: Método de los Elementos Finitos, Fractura Dúctil, Bloqueo, Metodología EAS

ABSTRACT

Locking problems are a well-known pathology that affects finite element elastoplastic models due to incompressibility phenomena. The effect and relief mechanisms for their resolution have been studied for several decades. One of these mechanisms is based on improving the element-level formulation of the displacement field through the introduction of “enhanced assumed strains” (EAS) techniques. This methodology is based on introducing an “incompatible” strain field, which helps overcome the limitations in the displacement field approximation that arise from insufficient terms needed to construct complete polynomials. This work aims to study how locking influences solutions in elastoplastic models within the context of ductile fracture, developing a specific methodology for implementing the EAS technique. Additionally, this methodology will be validated through a series of representative examples.

KEYWORDS: Finite Element Method, Ductile Fracture, Locking, EAS Methodology

Uno de los principales focos del desarrollo de la mecánica de la fractura computacional reside en su enfoque variacional, estudiado y validado a lo largo de estas dos últimas décadas, y cuyo origen reside en las investigaciones de [1]. Una de las vías que cuenta con mayor repercusión para su implementación y tratamiento numérico es el “Phase Field Approach to Fracture” (PFAF) [2], abriendo nuevas vías a la predicción de fenómenos de iniciación y propagación de la fractura en sólidos con comportamiento frágil mediante una implementación sencilla. Esta técnica está basada en la regularización de la superficie discontinua de la grieta mediante el uso de la variable phase-field (ϕ) dentro de una formulación de carácter no local. La Figura 1 muestra, para un sólido genérico de dominio B y contorno ∂B , cómo la grieta (representada mediante el campo discreto Γ) es aproximada mediante

esta variable, que actúa en la banda delimitada por la longitud característica (l_c).

Una de las principales ventajas, y en la cual reside su relativa fácil implementación, es su habilidad para predecir la propagación de familias de grietas complejas aún manteniendo su consistencia, en términos energéticos, con la visión de la Mecánica de la Fractura Elástica Lineal (LEFM) propuesta por Griffith, sin la necesidad de técnicas de seguimiento de grieta adicionales [3, 4]. Este hecho hace idónea esta metodología para la modelización de materiales con comportamiento puramente frágil. Sin embargo, en la mayoría de materiales estructurales, como los metales, se observa que no se manifiesta un comportamiento puramente frágil, sino que aparece un comportamiento de carácter dúctil, gobernado por la aparición de

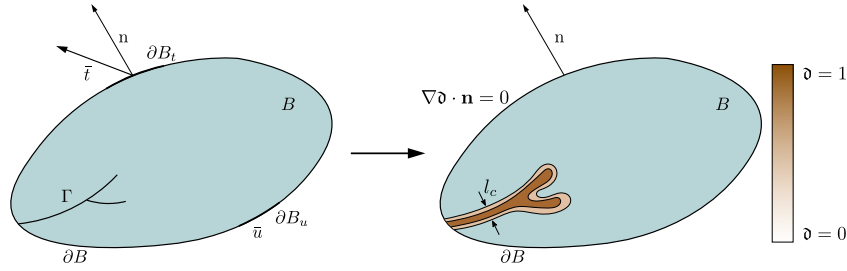


Figura 1: Regularización de una grieta genérica según la metodología PFAF.

deformaciones plásticas. Este hecho, entre otros, crea la necesidad de la modelización de la fractura dúctil, la cual puede establecerse de igual manera mediante el PFAF.

Uno de los principales problemas a la hora de trabajar con este tipo de modelos es la aparición del bloqueo en la solución, lo que impide obtener un resultado aceptable del campo de deformaciones plásticas, y por ende, de los mecanismos de colapso y fractura. Este fenómeno [10] está asociado a la dificultad que sufren los elementos finitos de formulación estándar para capturar los incrementos de deformación desviadora puros, conduciendo a inconsistencias dependientes de la malla. Para aliviar esta problemática existen diversos métodos, como la técnica B-bar, el uso de elementos de mayor orden, estrategias de estabilización y formulaciones mixtas de elementos finitos, como la técnica EAS (“Enhanced Assumed Strains”). Dicha técnica consiste, grosso modo, en el enriquecimiento del campo de deformaciones a través de la introducción de un campo de deformaciones no compatible, asociado a un número de modos que suplen la deficiencia de la formulación de elementos finitos estándar lineales.

En base a esta problemática, en este trabajo se propone un esquema de implementación robusta de la técnica EAS para la resolución de problemas de bloqueo dentro de un modelo básico de fractura dúctil, mediante el PFAF. Además, se expondrán una serie de ejemplos donde se podrá observar el bloqueo de la solución de elementos finitos, y cómo, mediante la implementación de la técnica EAS, se obtienen resultados más precisos y estables, permitiendo una representación más fiel del comportamiento del material en condiciones de fracturación dúctil.

La estructura de este trabajo se organiza de la siguiente manera. En primer lugar, se expone la formulación teórica empleada, haciendo énfasis en la incorporación de la técnica *Enhanced Assumed Strains* (EAS) como estrategia para mitigar los efectos del bloqueo (Sec. 1). A continuación, se describe la implementación numérica desarrollada (Sec. 2) y se analizan dos casos de estudio representativos, evaluando el impacto de la técnica EAS en los resultados obtenidos (Sec. 3). Finalmente, se presentan las principales conclusiones derivadas del estudio (Sec. 4).

1. ACOPLAMIENTO DE LA FORMULACIÓN EAS AL PFAF

En esta sección se introducirá brevemente la formulación mixta asumida para el campo de deformaciones, en base a [5–7]. Se introduce la descomposición del campo de deformaciones en la forma:

$$\hat{\varepsilon} = \underbrace{\nabla_{\mathbf{x}}^s \mathbf{u}}_{\text{compatible}} + \underbrace{\tilde{\varepsilon}}_{\text{incompatible}} = \varepsilon + \tilde{\varepsilon} \quad (1)$$

donde $\tilde{\varepsilon}$ hace referencia al campo de deformaciones incompatible que se caracteriza por ser discontinuo a nivel de elemento en la subsecuente implementación por el método de los elementos finitos.

A continuación, en aras de obtener la formulación débil de la ecuación a implementar, empleamos el principio variacional de Verbeke-Hu-Washizu bajo la hipótesis de deformaciones infinitesimales para obtener la expresión del potencial del sistema:

$$\begin{aligned} \Pi_{VHW}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}, \hat{\varepsilon}) = & \int_{\Omega} \Psi(\hat{\varepsilon}) \, d\Omega + \\ & + \int_{\Omega} (\tilde{\varepsilon} - \nabla_{\mathbf{x}}^s \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega - \underbrace{\int_{\Omega} \tilde{\mathbf{F}}^V \cdot \mathbf{u} \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_t} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} \, d\Omega}_{\Pi_{ext}} \end{aligned} \quad (2)$$

siendo $\mathbf{u}$, $\boldsymbol{\sigma}$, y $\hat{\varepsilon}$ los campos principales del problema. La función potencial de energía libre de Helmholtz $\Psi(\hat{\varepsilon})$ se ha empleado como el potencial termodinámico que define la ley constitutiva. Los valores extremos del potencial pueden obtenerse mediante:

$$\begin{aligned} \delta \Pi_{VHW}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}, \tilde{\varepsilon}, \delta \mathbf{u}, \delta \boldsymbol{\sigma}, \delta \tilde{\varepsilon}) &= 0 \\ \forall (\delta \mathbf{u}, \delta \boldsymbol{\sigma}, \delta \tilde{\varepsilon}) &\in \mathcal{U} \times \mathcal{S} \times \mathcal{E} \end{aligned} \quad (3)$$

donde los espacios de funciones para el campo de tensiones y deformaciones incompatibles se definen como:

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &:= \{\delta \boldsymbol{\sigma} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n_{str}}, \boldsymbol{\sigma} \in L_2(\Omega)\}; \\ \mathcal{E} &:= \{\delta \tilde{\varepsilon} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n_{str}}, \tilde{\varepsilon} \in L_2(\Omega)\} \end{aligned} \quad (4)$$

y podemos establecer la variación del potencial total del sistema como:

$$\begin{aligned} \delta \Pi = \frac{\partial \Pi}{\partial \mathbf{u}} \cdot \delta \mathbf{u} + \frac{\partial \Pi}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \delta \boldsymbol{\sigma} + \frac{\partial \Pi}{\partial \tilde{\varepsilon}} : \delta \tilde{\varepsilon} &= 0 \\ \forall (\delta \mathbf{u}, \delta \boldsymbol{\sigma}, \delta \tilde{\varepsilon}) &\in \mathcal{U} \times \mathcal{S} \times \mathcal{E} \end{aligned} \quad (5)$$

y con ello podemos obtener las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \delta_{\mathbf{u}}\Pi &= \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \nabla_{\mathbf{x}}^s \delta \mathbf{u} \, d\Omega - \int_{\Omega} \bar{\mathbf{F}}^V \cdot \delta \mathbf{u} \, d\Omega \\ &\quad - \int_{\partial\Omega_i} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} \, d\Omega = 0 \\ \delta_{\boldsymbol{\sigma}}\Pi &= \int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\sigma} : (\nabla_{\mathbf{x}}^s \mathbf{u} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}) \, d\Omega = 0 \\ \delta_{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}\Pi &= \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}} - \boldsymbol{\sigma} \right) : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \, d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

para todas las variaciones $(\delta \mathbf{u}, \delta \boldsymbol{\sigma}, \delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}) \in \mathcal{U} \times \mathcal{S} \times \mathcal{E}$. Nótese que de los resultados anteriores pueden obtenerse las correspondientes ecuaciones de Euler-Lagrange, las cuales se omiten por brevedad en el documento.

Por otro lado, ya que el espacio de deformaciones incompatibles pertenece a $L_2(\Omega)$, no es preciso garantizar la continuidad; luego estos grados de libertad extra pueden condensarse en la subsecuente formulación de elementos finitos, con el objetivo de minimizar el tamaño del sistema de ecuaciones a resolver. Como apunte final al respecto, la formulación empleada está equipada con condiciones de ortogonalidad entre los espacios de interpolación del campo de tensiones y deformaciones incompatibles [6].

A la formulación introducida en la Ec. (2) puede añadirse la contribución disipativa por fenómenos de fractura en el sólido mediante el PFAF, mediante la adición de un nuevo término:

$$\begin{aligned} \Pi(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}, \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}, \mathfrak{d}, \nabla_{\mathbf{x}} \mathfrak{d}) &= \int_{\Omega} \Psi(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}) \, d\Omega + \int_{\Omega} (\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} - \nabla_{\mathbf{x}}^s \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega + \\ &\quad + \int_{\Omega} \mathcal{G}_c \psi^c(\mathfrak{d}, \nabla_{\mathbf{x}} \mathfrak{d}) \, d\Omega - \Pi_{ext} \end{aligned} \quad (7)$$

donde la variable de phase field $\mathfrak{d}$ y su gradiente espacial $\nabla_{\mathbf{x}} \mathfrak{d}$ se incorporan como variables principales. Los valores extremos de este nuevo funcional pueden obtenerse utilizando procedimientos estándar.

Con respecto a la estrategia de discretización de las variables principales, se adoptará un esquema de interpolación isoparamétrico para los desplazamientos y la variable phase field. De esta forma, haciendo uso de funciones de forma lagrangianas en el espacio natural $\boldsymbol{\xi} = \{\xi^1, \xi^2\} = [-1, 1] \times [-1, 1]$, se obtienen las siguientes aproximaciones a nivel de elemento:

$$\mathbf{u}^e = \sum_{A=1}^{n_n} N_A^e(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{d}_A^e; \quad \mathfrak{d}_j^e = \sum_{A=1}^{n_n} N_A^e(\boldsymbol{\xi}) \hat{\mathfrak{d}}_A^e \quad (8)$$

denotando $\mathbf{d}_A^e$ y $\hat{\mathfrak{d}}_A$ como los valores nodales de los desplazamientos y phase field, respectivamente; donde n_n es el número de nodos a nivel de elemento. Por otro lado, las aproximaciones de la parte compatible del campo total de deformaciones y el gradiente de la variable phase-field,

haciendo uso del operador de compatibilidad, quedan como:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^e = \sum_{A=1}^{n_n} \mathbf{B}_A^u \mathbf{d}_A^e, \quad \nabla_{\mathbf{x}} \mathfrak{d}^e = \sum_{A=1}^{n_n} \mathbf{B}_A^{\mathfrak{d}} \hat{\mathfrak{d}}_A^e, \quad (9)$$

Con respecto a los modos incompatibles, se hace uso de la definición propuesta en [6], cuya principal aplicación se puede encontrar en [8]. A nivel de elemento, se define el siguiente esquema de interpolación:

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^e \stackrel{\text{def}}{=} \frac{J_0}{J(\boldsymbol{\xi})} J_0^{-T} \tilde{M} J_0^{-1} \quad (10)$$

donde $J(\boldsymbol{\xi})$ es el Jacobiano a nivel de elemento, siendo J_0 su valor correspondiente en el centroide del elemento. Por otro lado, $\tilde{M}$ es la matriz de interpolación de modos incompatibles. Para casos 2D se emplea:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \tilde{\varepsilon}_{11} \\ \tilde{\varepsilon}_{22} \\ 2\tilde{\varepsilon}_{12} \end{bmatrix} &= \mathbf{G} \boldsymbol{\alpha}^e; \quad \mathbf{G} = \frac{J_0}{J(\boldsymbol{\xi})} \mathbf{T}_0 \mathbf{M}(\boldsymbol{\xi}); \\ \mathbf{T}_0 &= \begin{bmatrix} J_{011}^2 & J_{021}^2 & J_{011} J_{021} \\ J_{012}^2 & J_{022}^2 & J_{012} J_{022} \\ 2J_{011} J_{012} & 2J_{021} J_{022} & J_{011} J_{022} + J_{012} J_{021} \end{bmatrix}^{-1} \end{aligned} \quad (11)$$

Por último, tal y como se expresa en [6], para los casos de este estudio se utilizará la siguiente forma de la matriz $\tilde{M}$, que está asociada a 7 modos, con el objetivo de prevenir tanto el bloqueo volumétrico como por cizallamiento:

$$\mathbf{M}(\boldsymbol{\xi}) = \begin{bmatrix} \xi^1 & 0 & 0 & 0 & \xi^1 \xi^2 & 0 & 0 \\ 0 & \xi^2 & 0 & 0 & 0 & \xi^1 \xi^2 & 0 \\ 0 & 0 & \xi^1 & \xi^2 & 0 & 0 & \xi^1 \xi^2 \end{bmatrix} \quad (12)$$

2. IMPLEMENTACIÓN DE LA METODOLOGÍA

El sistema obtenido tras la linearización de la formulación débil derivada de la Ec. (7) tiene la siguiente forma, suponiendo una aproximación tipo staggered para la interacción entre los grados de libertad desplazamiento y deformaciones incompatibles con los de phase field:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{dd} & \mathbf{K}_{d\alpha} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{\alpha d} & \mathbf{K}_{\alpha\alpha} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_{\mathfrak{d}\mathfrak{d}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{d} \\ \Delta \boldsymbol{\alpha} \\ \Delta \mathfrak{d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_{\text{ext}} - \mathbf{f}_{\text{int}}^d \\ -\mathbf{f}_{\text{int}}^{\alpha} \\ -\mathbf{f}_{\text{int}}^{\mathfrak{d}} \end{bmatrix} \quad (13)$$

Donde $\mathbf{d}, \boldsymbol{\alpha}, \mathfrak{d}$ hacen referencia a los grados de libertad de desplazamientos, deformaciones incompatibles y phase field, respectivamente. Centrándonos en los dos primeros sistemas de ecuaciones, podemos aplicar la técnica de condensación a los grados de libertad de deformaciones incompatibles con el fin de ahorrar coste computacional. De esta forma, podemos calcular el incremento de deformaciones incompatibles como:

$$\Delta \boldsymbol{\alpha} = -\mathbf{K}_{\alpha\alpha}^{-1} (\mathbf{f}_{\text{int}}^{\alpha} + \mathbf{K}_{\alpha d} \Delta \mathbf{d}) \quad (14)$$

Y sustituyendo en la Ec. (13) la parte del sistema condensado resulta:

$$\begin{aligned} (\mathbf{K}_{dd} - \mathbf{K}_{da} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ad}) \Delta \mathbf{d} &= \mathbf{f}_{\text{ext}} - \mathbf{f}_{\text{int}}^d + \mathbf{K}_{da} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{f}_{\text{int}}^a \\ &\downarrow \\ \tilde{\mathbf{K}}_{dd} \Delta \mathbf{d} &= \mathbf{f}_{\text{ext}} - \tilde{\mathbf{f}}_{\text{int}}^d \end{aligned} \quad (15)$$

Que junto al sistema asociado a los grados de libertad de phase field, es el conjunto de ecuaciones a resolver por el Método de los Elementos Finitos.

Como apunte final a esta sección, a continuación se incluye un esquema del algoritmo para implementar la técnica EAS en una subrutina de usuario:

Dado $\{\mathbf{d}^{(k-1)}, \mathbf{d}^{(k-1)}, \Delta \mathbf{d}^{(k)}, \Delta \mathbf{d}^{(k)}, \alpha^{(k-1)}\}$ como datos iniciales en la iteración k en el incremento $[t_n, t_{n+1}^{(k)}]$:

1. Actualización de los desplazamientos nodales y valor del phase field en los nodos $\mathbf{d}^{(k)} = \mathbf{d}^{(k-1)} + \Delta \mathbf{d}^{(k)}$, $\mathbf{d}^{(k)} = \mathbf{d}^{(k-1)} + \Delta \mathbf{d}^{(k)}$ en la iteración k .
2. Actualización de $\alpha^{(k)}$ a nivel de punto de integración:
 - a) Obtención del campo de tensiones σ^{k-1} y matriz constitutiva elastoplástica $\mathbf{C}^{ep^{k-1}}$ de la iteración anterior.
 - b) Obtención de los operadores $\{\mathbf{f}_{\text{int}}^{\alpha^{(k-1)}}, \mathbf{K}_{aa}^{(k-1)}, \mathbf{K}_{ad}^{(k-1)}\}$
 - c) Cálculo de $\Delta \alpha^{(k)} = -[\mathbf{K}_{aa}^{(k-1)}]^{-1} [\mathbf{f}_{\text{int}}^{\alpha^{(k-1)}} + \mathbf{K}_{ad}^{(k-1)} \Delta \mathbf{d}^{(k)}]$
 - d) Actualización del vector de deformaciones incompatibles $\alpha^{(k)} = \alpha^{(k-1)} + \Delta \alpha^{(k)}$.
3. Cálculo del campo de tensiones σ^k y matriz constitutiva elastoplástica $\mathbf{C}^{ep^k}$ a nivel de punto de integración:
 - a) Cálculo del campo de deformaciones total $\hat{\epsilon}^{(k)} = \mathbf{B}^u \mathbf{d}^{(k)} + \mathbf{G} \alpha^{(k)}$.
 - b) Aplicación del algoritmo de Return Mapping.
4. Cálculo de los operadores $\mathbf{K}_{dd}^{(k)}, \mathbf{K}_{ad}^{(k)}, \mathbf{K}_{da}^{(k)}, \mathbf{K}_{aa}^{(k)}, \mathbf{f}_{\text{int}}^{(k)}$.
5. Aplicación de la condensación estática de $\alpha^{(k)}$ con las Ec.(13)-(15) y construcción de $\tilde{\mathbf{K}}_{dd}^{(k)}$ y $\tilde{\mathbf{f}}_{\text{int}}^{(k)}$.
6. Resolver para un nuevo incremento de desplazamiento $\tilde{\mathbf{K}}_{dd}^{(k)} \Delta \mathbf{d}^{(k+1)} = \mathbf{f}_{\text{ext}} - \tilde{\mathbf{f}}_{\text{int}}^{(k)}$.

3. EJEMPLOS DE VALIDACIÓN

Como vía de validación de la metodología presentada en este trabajo, a continuación se exponen dos ejemplos de aplicación sencillos, y cuya solución es más que conocida en la literatura. En estos ejemplos se podrá observar cómo, al trabajar con una formulación de fractura dúctil estándar, aparece el fenómeno de bloqueo, y al incorporar la técnica EAS en el modelo, este fenómeno desaparece y nos permite mejorar los resultados, permitiendo argumentar su validez. Para la modelización del material se empleará el modelo elastoplástico básico de Von Mises

con endurecimiento isótropo y lineal, que está caracterizado por 4 constantes. Por otro lado, el comportamiento a fractura se define mediante las 2 constantes requeridas en el modelo de phase field.

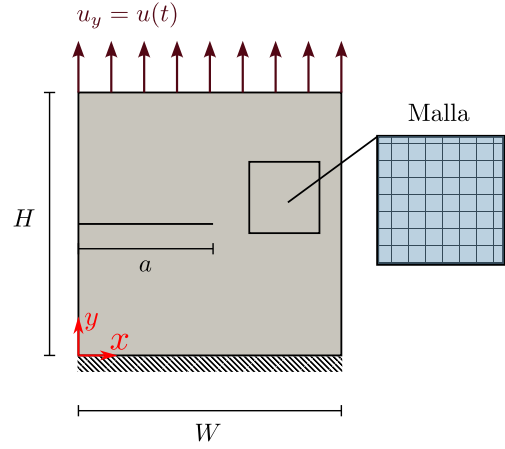


Figura 2: Geometría y malla del sólido en forma de rectángulo con grieta lateral.

Como primer ejemplo (véase Figura 2) se modelará un sólido de forma rectangular 2-D de dimensiones $H = 10$ mm y $W = 10$ mm. Este sólido posee una grieta de longitud $a = 5$ mm. Las propiedades del material pueden consultarse en la Tabla 1. Este sólido se somete a un desplazamiento impuesto en su contorno superior de 0,2 mm, mientras que el contorno inferior posee condiciones de empotramiento. La malla de elementos finitos empleada es de carácter regular, empleando 13608 elementos rectangulares lineales de dimensión 0,2 mm aproximadamente.

Propiedad	Ejemplo 1	Ejemplo 2
Módulo de Young [MPa]	30000	30000
Coefficiente de Poisson [-]	0,3	0,3
Límite Elástico [MPa]	100	50
Módulo de Endurecimiento [MPa]	10	0
Tenacidad a Fractura [MPa·mm]	2	100
Longitud Característica [mm]	0,4	5

Tabla 1: Propiedades de los materiales empleados en los ejemplos de validación.

Los resultados de la aplicación del modelo, tanto sin EAS como con EAS, se presentan en la Figura 3. Se verifica que, en todos los casos, la solución cualitativa obtenida corresponde a una banda de cizalladura con una inclinación de 45° , en concordancia con la teoría. En particular, al emplear la técnica EAS (caso b de la Figura 3), la banda de cizalladura es más concentrada y estrecha, mientras que, en ausencia de EAS (caso a de la Figura 3), la banda tiene un carácter más disperso. Este efecto influye directamente en la forma de la solución de la variable de phase-field, evidenciándose que el ancho de la

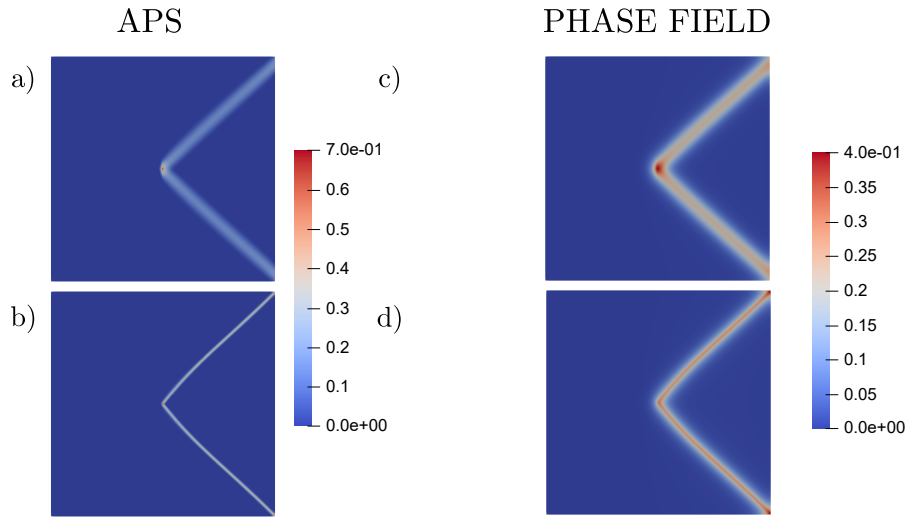


Figura 3: Resultados del modelo para la deformación plástica equivalente (APS) y phase field. Los casos a) y c) están asociados al modelo sin emplear EAS y c) y d) al modelo empleando EAS.

zona de fractura es más difuso en el caso sin EAS (caso c de la Figura 3) en comparación con el caso con EAS. Como consecuencia, la longitud característica del modelo de phase-field, equivalente al ancho de la zona de proceso, pierde efectividad en ausencia de EAS.

Para el segundo ejemplo se pretende modelar el mecanismo de colapso de Plandtl [9], tal y como se muestra en la Figura 4, en condiciones de deformación plana. Dicho mecanismo está formado por una cuña activa, una cuña pasiva y una zona intermedia denominada de plasticidad radial, con forma de espiral logarítmica. Las dimensiones del sólido son $H = 200$ mm y $W = 300$ mm. La zona de aplicación de la presión transmitida por la cimentación tiene una extensión de $a = 70$ mm. Las propiedades del material se presentan en la Tabla 1, mientras que las condiciones de contorno modelan simetría en los bordes laterales y empotramiento en el borde inferior, representando el contacto con un sólido de rigidez significativamente mayor. En el contorno superior se aplica un desplazamiento vertical en la zona delimitada por a de 10 mm, para garantizar las condiciones de colapso. Se han empleado, de nuevo, elementos rectangulares regulares de

longitud igual a 2,5 mm, formando una malla de 11040 elementos.

Los resultados del modelo implementado, sin el empleo de la técnica EAS como con su empleo, se presentan en la Figura 5.

Como principal resultado, se observa que la ausencia del empleo de la técnica EAS conduce a la obtención de un mecanismo de colapso incorrecto, mientras que la aplicación de dicha técnica (caso a de la Figura 3) permite reproducir el mecanismo correcto, en concordancia con lo descrito en [9]. Este efecto se debe al fenómeno de bloqueo, que impide desde el inicio la formación de la banda de cizalladura inclinada a 45° , la cual delimita la cuña activa, sustituyéndola por una banda de cizalladura vertical. Además, las líneas de colapso obtenidas determinan la trayectoria de propagación de la variable de phase field, lo que permite representar con mayor claridad el mecanismo de colapso en el caso con la técnica EAS (caso d de la Figura 3).

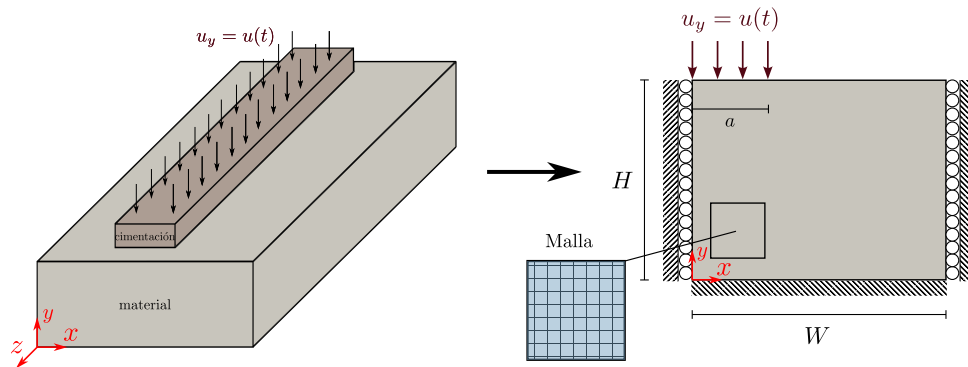


Figura 4: Caso de estudio, geometría y malla para el modelo del problema de colapso de Plandtl.

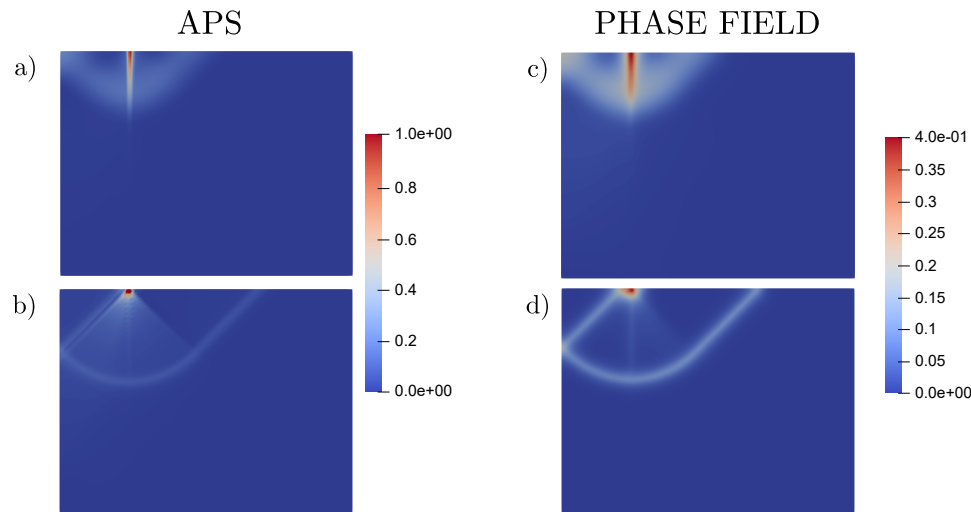


Figura 5: Resultados del modelo para la deformación plástica equivalente (APS) y phase field. Los casos a) y c) están asociados al modelo sin emplear EAS y b) y d) al modelo empleando EAS.

4. CONCLUSIONES

En este trabajo se ha analizado la influencia del fenómeno de bloqueo en la modelización de fractura dúctil mediante la metodología *phase-field*, proponiendo una estrategia de implementación basada en la técnica *Enhanced Assumed Strains* (EAS) para mitigar sus efectos.

Los resultados obtenidos evidencian que, en el primer caso de estudio, la ausencia de la técnica EAS conduce a una banda de cizalladura más difusa, lo que afecta la precisión de la solución en términos de la variable *phase-field* y la caracterización del ancho de la zona de fractura. En el segundo caso, la falta del empleo del EAS impide la correcta formación de la banda de cizalladura inclinada a 45° , derivando en un mecanismo de colapso erróneo. En contraste, la incorporación de EAS en ambos casos permite obtener soluciones más precisas, de acuerdo con la teoría de referencia.

AGRADECIMIENTOS

POR y JR agradecen su apoyo al Ministerio de Ciencia e Innovación de España (Project TED2021-131649B-I00), y POR, AQC e IGG a través del proyecto nacional PID2020-117001GB-I00. Además, POR agradece el apoyo de la Universidad de Sevilla a través del contrato predoctoral otorgado en la convocatoria VIPPIT-2020-II.2.

REFERENCIAS

- [1] GA Francfort and J-J Marigo. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46(8):1319–1342, 1998.
- [2] B. Bourdin, G.A. Francfort, and J-J. Marigo. The variational approach to fracture. *Journal of Elasticity*, 91(1):5–148, Apr 2008.
- [3] C. Miehe, F. Welschinger, and M. Hofacker. Thermodynamically consistent phase-field models of fracture: Variational principles and multi-field fe implementations. *Numerical Methods in Engineering*, 83(10):1273 – 1311, 2010.
- [4] Markus Klinsmann, Daniele Rosato, Marc Kamlah, and Robert M. McMeeking. An assessment of the phase field formulation for crack growth. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 294:313–330, 2015.
- [5] J. C. Simo and M. S. Rifai. A class of mixed assumed strain methods and the method of incompatible modes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 29(8):1595–1638, 1990.
- [6] U. Andelfinger. *Untersuchungen zur Zuverlässigkeit hybrid-gemischter Finiter Elemente für Flächentragwerke*. PhD thesis, University of Stuttgart, Stuttgart, 1991.
- [7] M. Bischoff and I. Romero. A generalization of the method of incompatible modes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 69(9):1851–1868, 2007.
- [8] J. C. Simo and F. Armero. Geometrically non-linear enhanced strain mixed methods and the method of incompatible modes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33(7):1413–1449, 1992.
- [9] L. Prandtl. *Hauptaufsätze: Über die eindringungsfestigkeit (härte) plastischer baustoffe und die festigkeit von schneiden*. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 1, 1921.
- [10] J.C. Nagtegaal, D.M. Parks, and J.R. Rice. On numerically accurate finite element solutions in the fully plastic range. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 4(2):153–177, 1974.

PREDICCIONES COMPUTACIONALES DE LA FRAGILIZACIÓN POR HIDRÓGENO EN TUBERÍAS SOLDADAS DESTINADAS AL TRANSPORTE DE HIDRÓGENO PRESURIZADO

L. Castro^{1*}, C. Betegón¹, E. Martínez-Pañeda²

¹ SIMUMECAMAT Research Group. Universidad de Oviedo

Edificio Departamental Oeste. 7.1.10. Campus Universitario de Gijón. 33203, Gijón, España

² Department of Engineering Science, University of Oxford, Oxford OX1 3PJ, UK

^{1*} Persona de contacto: castrolucas@uniovi.es

RESUMEN

En este proyecto se presenta una novedosa metodología computacional para estudiar la integridad estructural de tuberías soldadas destinadas al transporte de hidrógeno a presión mediante modelos virtuales. En la primera etapa de la simulación, se modela el proceso de soldadura mediante el método de los elementos finitos con acoplamiento termo-mecánico, obteniendo las tensiones residuales generadas durante el proceso. A continuación, se presenta un modelo Phase Field que incorpora en sus ecuaciones constitutivas la acumulación de daño por fatiga, permitiendo de esta forma obtener las leyes de velocidad de crecimiento de grieta del acero analizado mediante un modelo virtual de los ensayos de fatiga realizados al aire. Una vez ajustado el modelo Phase Field tanto para predecir el comportamiento a fatiga como para predecir el comportamiento a fractura de los tres materiales de la soldadura (BM-HAZ-WM) analizados en ensayos experimentales, se realiza el análisis del comportamiento a fractura de una tubería ensayada a escala real para predecir la fatiga asistida por hidrógeno. Tras verificar que las predicciones computacionales del modelo virtual reproducen fielmente los ensayos experimentales, esta metodología permite examinar la interacción entre las condiciones del proceso de soldadura, las propiedades mecánicas y térmicas del material, la difusión de hidrógeno, el efecto de los tratamientos térmicos y las cargas que soporta la tubería, así como su papel en el comportamiento a fractura de tuberías soldadas, proporcionando claves para mejorar su integridad estructural en aplicaciones reales de transporte de hidrógeno.

PALABRAS CLAVE: Fragilización por hidrógeno, Fatiga, Tuberías Soldadas, Modelos Virtuales.

ABSTRACT

This study presents a novel computational methodology for assessing the structural integrity of welded pipelines intended for pressurized hydrogen transport using virtual models. In the first stage of the simulation, the welding process is modeled through the finite element method with thermo-mechanical coupling, allowing for the computation of residual stresses induced during the process. Subsequently, a Phase Field model is introduced, incorporating fatigue damage accumulation within its constitutive equations, thereby enabling the derivation of crack growth rate laws for the analyzed steel via a virtual model of fatigue tests conducted in air. Once the Phase Field model is calibrated to accurately predict both fatigue and fracture behavior of the three weld regions (BM-HAZ-WM) examined in experimental tests, a fracture analysis of a full-scale pipeline specimen is conducted to predict hydrogen-assisted fatigue. Following validation of the computational model against experimental results, this methodology facilitates an in-depth examination of the interactions between welding process conditions, the mechanical and thermal properties of the material, hydrogen diffusion, the effects of post-weld heat treatments, and the applied loading conditions, as well as their influence on the fracture behavior of welded pipelines. The findings provide critical insights for enhancing the structural integrity of steel pipelines in real-world hydrogen transport applications.

KEYWORDS: Hydrogen Embrittlement, Fatigue, Welded Pipes, Virtual Models.

1. INTRODUCCIÓN

El avance hacia un modelo energético global más sostenible ha impulsado el desarrollo de fuentes de energía renovables, destacando el hidrógeno como un vector energético clave en la transición hacia una economía descarbonizada [1]. El transporte y almacenamiento de hidrógeno requiere la implementación de una infraestructura robusta, siendo las tuberías con uniones soldadas los elementos

estructurales más comúnmente utilizados en las actuales redes de distribución. En consecuencia, el análisis de la integridad estructural de las tuberías soldadas adquiere una importancia crucial para garantizar el desempeño fiable y seguro de estas instalaciones.

Durante el proceso de soldadura se producen transformaciones microestructurales debido a los ciclos térmicos, generando tres regiones claramente diferenciadas en la unión soldada: el metal de soldadura

(WM), la zona afectada térmicamente (HAZ) y el metal base (BM), cada una con diferentes propiedades mecánicas y comportamientos frente a la fractura, así como distinta susceptibilidad a la fragilización por hidrógeno [2]. La alta susceptibilidad de las zonas soldadas a este fenómeno se debe principalmente a la heterogeneidad microestructural entre las distintas regiones (WM-HAZ-BM) y a las tensiones residuales generadas durante el proceso de soldadura.

En la actualidad, con el objetivo de estudiar los efectos de la fragilización por hidrógeno en uniones soldadas, se han llevado a cabo numerosos estudios experimentales para caracterizar las propiedades mecánicas y evaluar la influencia del hidrógeno en el comportamiento a fractura de las diferentes regiones de tuberías soldadas [3,4]. Sin embargo, obtener resultados representativos mediante ensayos experimentales es complicado debido a la dificultad en la extracción de probetas de las zonas soldadas, lo cual introduce variabilidad en los resultados. Por ello, el uso de técnicas de simulación computacional, como las aplicadas en este trabajo, resulta esencial para superar estas limitaciones experimentales, permitiendo una evaluación más precisa y sistemática de la integridad estructural de las uniones soldadas en presencia de hidrógeno.

La metodología propuesta en este estudio está basada en el desarrollo de modelos computacionales que inicialmente realizan la simulación numérica del proceso de soldadura mediante el método de los elementos finitos con acoplamiento termo-mecánico. Posteriormente, se desarrolla un modelo de daño basado en la técnica Phase Field que incorpora en sus ecuaciones constitutivas la acumulación de daño por fatiga. Este modelo Phase Field se calibra mediante simulaciones que reproducen ensayos experimentales sencillos realizados en laboratorio (ver [2]) del comportamiento a fractura de materiales soldados y posteriormente es integrado en un modelo virtual de una tubería real soldada. Las predicciones computacionales que arroja el modelo virtual reproducen fielmente los resultados experimentales del novedoso ensayo a escala real realizado recientemente en [5]. Esta validación posibilita, por tanto, analizar mediante simulación computacional el comportamiento de tuberías soldadas reales sometidas a diversas situaciones de carga, así como evaluar de manera sistemática escenarios complejos relacionados con la difusión de hidrógeno, presencia de defectos en la soldadura o incluso sobre los efectos de tratamientos térmicos en el comportamiento a fatiga de tuberías soldadas.

2. TUBERÍA SOLDADA ANALIZADA.

2.1 Geometría de la tubería soldada analizada.

La soldadura analizada en este estudio es una soldadura longitudinal con 2 cordones sobre una tubería de un acero X80 con un radio interno $r_i = 587.5$ mm y un espesor $t = 22$ mm, tal y como se muestra en la Figura 1. Gracias a la simetría inherente de una soldadura longitudinal, se desarrolló un modelo 2D, lo que simplifica el análisis, reduce la complejidad del modelo y, por lo tanto, facilita

el proceso de simulación numérica. Basándose en la composición química del acero X80 [2] y utilizando el software JMatPro se extrapolaron las propiedades termo-mecánicas del acero X80 desde temperatura ambiente hasta temperaturas de fusión de 1500°C , lo que permitió simular numéricamente el proceso de soldadura.

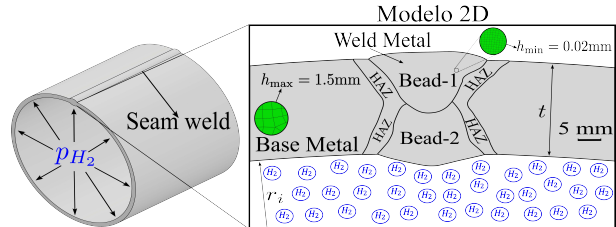


Figura 1. Representación esquemática del modelo 2D de la soldadura (2 pasadas: Bead-1 y Bead-2), que muestra las características de la malla y las dimensiones geométricas: radio interno $r_i = 587.5$ mm y espesor $t = 22$ mm y tamaño a escala de las 3 zonas de la soldadura (WM-HAZ-BM) analizada en [2]. Los detalles del refinamiento de la malla muestran una transición gradual desde un tamaño de elemento de 1.5 mm en los extremos hasta 0.02 mm en la zona soldada.

2.2 Simulación del proceso de soldadura.

Para simular el proceso de soldadura, se utilizó un complemento para Abaqus llamado AWI (Abaqus Welding Interface), el cual proporciona una interfaz gráfica de usuario para configurar la simulación del proceso de soldadura en Abaqus/CAE. En particular, permite establecer las propiedades de transferencia de calor que ocurren en el proceso de soldadura por electrodo, requiriendo únicamente como input del modelo la evolución de las propiedades termo-mecánicas del material analizado y la geometría de la soldadura.

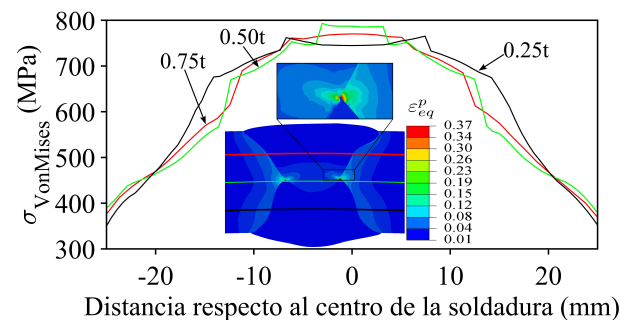


Figura 2. Distribución de las tensiones equivalentes σ_{vonMises} en función de la localización en la soldadura, analizada a diversas profundidades del espesor de la tubería: $0.25t$, $0.5t$ y $0.75t$, así como la distribución de la deformación plástica equivalente ϵ_{eq}^p .

Las tensiones residuales obtenidas superan el límite elástico del acero X80 (570 MPa) en gran parte de la región soldada, tal y como se puede apreciar en la Figura 2. Además, se observa una acumulación significativa de deformaciones plásticas en la intersección de los cordones de soldadura y en la zona afectada térmicamente (HAZ).

3. MODELO MULTIFÍSICO PHASE FIELD PARA CARGAS CÍCLICAS.

3.1 Modelo de difusión de hidrógeno multitrampa.

La difusión de hidrógeno en los aceros está influenciada por trampas microestructurales, considerándose en este estudio las tres principales que contiene el acero X80: dislocaciones, intercaras cementita-ferrita e intercaras martensita-austenita (M/A). La ecuación que describe la difusión de hidrógeno y que está gobernada por la tensión hidrostática se caracteriza por una modificación de la ley de Fick y viene dada según la ecuación (1), siendo D_e el coeficiente de difusión efectivo definido según la ecuación (2):

$$\frac{D}{D_e} \frac{dC_L}{dt} = \mathcal{D} \nabla^2 C_L - \nabla \left(\frac{DC_L}{RT} V_H \nabla \sigma_H \right) \quad (1)$$

$$\frac{D}{D_e} = 1 + \sum_i \left(\frac{K^{(i)} N_T^{(i)} / N_L}{[1 + (K^{(i)} - 1) C_L / N_L]^2} \right) \quad (2)$$

donde V_H es el volumen parcial molar de hidrógeno y σ_H la tensión hidrostática, C_L la concentración en la red, N_L es la densidad de lugares vacantes en la red del acero, $K^{(i)}$

una constante de equilibrio $K_T^{(j)} = \exp \left(\frac{-W_B^{(j)}}{RT} \right)$, siendo $W_B^{(j)}$ la energía de enlace de cada trampa. Además, la $N_T^{(i)}$ es la densidad de trampas en la fase matriz del acero. Por otro lado, se ha propuesto un esquema de atrapamiento dependiente de la deformación plástica, con el objetivo de recoger de manera fenomenología el incremento de la densidad de trampas en dislocaciones con el aumento de deformación plástica. Dicho esquema se puede observar en la siguiente expresión:

$$N_T^{dis} = \frac{\sqrt{2} \rho_{dis}}{d} \quad (3)$$

donde d es el parámetro de red ($d = 2.866 \times 10^{-10} \text{m}$), ρ_{dis} es la densidad de dislocaciones, que se relaciona con la densidad de trampas según la expresión (4), donde $\rho_0 = 10^{10} \text{m}^{-2}$ y $\gamma = 10^{16} \text{m}^{-2}$:

$$\begin{cases} \rho_{dis} = \rho_0 + 2\gamma \varepsilon_{eq}^p; & \varepsilon_{eq}^p \leq 0.5 \\ \rho_{dis} = \rho_0 + \gamma; & \varepsilon_{eq}^p > 0.5 \end{cases} \quad (4)$$

Las densidades supuestas en el resto de trampas y las energías de enlace consideradas en este estudio han sido obtenidas de la literatura, y se muestran en la Tabla 1, además, los autores recomiendan consultar [6], para ver más detalles de esta formulación.

Tabla 1. Energías de enlace W_B y densidad de trampas N_T consideradas para el acero X80.

Tipo de trampa	$W_B (\text{kJ/mol})$	$N_T (\text{kJ/mol})$
Intercaras M/A	47.1	1.0×10^{23}
Dislocaciones	25.0	4.9×10^{23}
Intercaras $\alpha - \text{Fe}_3\text{C}$	13.5	1.0×10^{23}

3.2 Modelización Phase Field.

La técnica Phase Field consiste en la implementación de un modelo de daño mediante el método de elementos finitos, basado en un criterio energético, para predecir la nucleación y propagación de grietas en sólidos. Esta predicción se consigue introduciendo en el modelo una variable de campo de fase, ϕ , que regulariza la zona de fractura discreta, donde $\phi = 1$ representa el material completamente dañado y $\phi = 0$ denota el material intacto. La transición suave entre estos estados se logra mediante una función de densidad de energía, ecuación (5). La densidad de energía libre total, definida sobre el dominio del sólido elasto-plástico Ω , se expresa como:

$$\Psi = \int_{\Omega} \psi + \gamma(\phi) G_c(C_L) \quad (5)$$

donde ψ es la densidad de energía de deformación, $G_c(C_L)$ representa la tenacidad a la fractura dependiente del hidrógeno, y $\gamma(\phi)$ es la función de regularización de la grieta:

$$\gamma(\phi) = \frac{1}{2l_c} (\phi^2 + l_c^2 |\nabla \phi|^2) \quad (6)$$

donde l_c es el parámetro de escala que gobierna el ancho de la zona de proceso de fractura. En este estudio, se emplea la formulación AT-2 [7], la cual garantiza una zona de proceso de fractura bien definida al relacionar l_c con las propiedades del material de la siguiente manera:

$$l_c = \frac{27EG_c(C_L)}{256\sigma_c^2} \quad (7)$$

donde E es el módulo de Young, y σ_c es el umbral de tensión crítica para la iniciación de la fractura. Por otro lado, la densidad de energía de deformación del sólido elastoplástico ψ se define como:

$$\psi = g(\phi) \psi_e^+(\varepsilon^e) + \psi_e^-(\varepsilon^e) + g_p(\phi) \psi_p(\varepsilon_{eq}^p) \quad (8)$$

donde $\psi_e^+ = \frac{K}{2} \langle \text{tr} \varepsilon^e \rangle^2 + G \varepsilon_{dev}^e$; ε_{dev}^e , $\psi_e^- = \frac{K}{2} \langle -\text{tr} \varepsilon^e \rangle^2$ y

$\psi_p = \frac{\sigma_y^2}{E(n+1)} \left(\left(1 + \frac{E \varepsilon_{eq}^p}{\sigma_y} \right)^{(n+1)} - 1 \right)$. En las ecuaciones

anteriores K es el módulo de compresibilidad, G es el módulo de corte, σ_y es la tensión de fluencia, n es el exponente de endurecimiento, ε^e es el tensor de deformación elástica, y ε_{eq}^p es la deformación plástica equivalente. Esta formulación incorpora una separación volumétrica-desviadora [7] para evitar la propagación de grietas bajo condiciones de compresión. En este estudio, se emplean dos funciones de degradación: la función de degradación elástica $g(\phi) = (1 - \phi)^2$ que reduce la rigidez del material debido a la fractura y $g_p(\phi) = \beta g(\phi) + (1 - \beta)$, $0 \leq \beta \leq 1$, que degrada tanto la superficie de fluencia como la energía plástica, siguiendo los estudios [8] y [9]. Además, se introduce en el modelo

una función no decreciente $\mathcal{H}$ para garantizar la irreversibilidad del daño. Considerando los supuestos constitutivos mencionados, y aplicando el teorema de la divergencia a la ecuación (8), se obtiene el problema acoplado de deformación elastoplástica y fractura definido por las ecuaciones (9) y (10):

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0, \text{ donde } \boldsymbol{\sigma} = g(\phi)\mathbf{E}:(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^p),$$

$$\sigma_{dev} = g_p(\phi)\widehat{\sigma}_y(\varepsilon_{eq}^p) \text{ si } \varepsilon_{eq}^p > 0 \quad (9)$$

$$f_\alpha(\bar{\alpha})G_c(C_L)\left(\frac{\phi}{l_c} - l_c \nabla^2 \phi\right) = 2(1 - \phi)\mathcal{H},$$

$$\mathcal{H} := \max_{\tau \in [0, t]} \{\psi_\varepsilon^+(\tau)\} + 0.1\psi_p \quad (10)$$

donde $\mathbf{E}$ denota el tensor de elasticidad de cuarto orden. La ecuación (9) gobierna el equilibrio mecánico, mientras que la ecuación (10) describe la evolución de la variable de campo de fase ϕ , la cual representa la degradación debido a la fragilización por hidrógeno a través de la dependencia de la tenacidad a la fractura G_c con la concentración de hidrógeno en la red C_L . Dicha relación representa el fenómeno de la fragilización por hidrógeno y será estudiada en el siguiente subapartado. Además, el modelo Phase Field propuesto considera la degradación por fatiga incorporando en el modelo la función de $f_\alpha(\bar{\alpha})$, cuyos parámetros se describen en el subapartado 3.5. La implementación de este modelo se llevó a cabo mediante el método de elementos finitos, donde el comportamiento mecánico elastoplástico del modelo Phase Field se implementó en una subrutina UMAT de Abaqus, mientras que la evolución de la variable de campo de fase ϕ se incorporó mediante un enfoque de analogía térmica, siguiendo la metodología descrita en [10] e implementada en una subrutina UMATHT de Abaqus y la difusión de hidrógeno siguiendo la implementación realizada en [6] mediante una subrutina UMATHT de Abaqus.

3.3 Modelización numérica de la fragilización por hidrógeno.

La reducción en la tenacidad a la fractura $f(C)$ se modela utilizando el enfoque fenomenológico propuesto por [8]. La degradación de la tenacidad a la fractura en función de la concentración de hidrógeno asumida en este estudio puede expresarse como:

$$f(C) = J_{Ic}(C)/J_{Ic}(0) \quad (11)$$

donde $J_{Ic}(0)$ representa la tenacidad a la fractura en un ambiente libre de hidrógeno, y $J_{Ic}(C)$ denota la tenacidad a la fractura obtenida a partir de las curvas de resistencia al crecimiento de grietas (J-R) en especímenes sometidos a diferentes cargas de hidrógeno. Los valores de tenacidad a la fractura se determinan cuando la extensión de la grieta alcanzó 0.2 mm en las curvas J-R. Se asume que la degradación de la tenacidad a la fractura, dada por la relación $f(C) = J_{Ic}(C)/J_{Ic}(0)$ es equivalente a la

reducción en la tasa de liberación de energía local $G_c(C_L)/G_c(0)$. En consecuencia, la función de degradación derivada experimentalmente $f(C)$ puede incorporarse al modelo Phase Field desarrollado en el subapartado anterior estableciendo la relación $G_c(C_L) = f(C_L)G_c(0)$ siendo la ley de degradación: $f(C) = 0.068 + 0.931 \exp(-9C_L^{0.8})$, la cual ha sido obtenida basándose en los estudios realizados en [8].

3.4 Modelización numérica del comportamiento a fractura de la tubería soldada.

Los valores de tenacidad a la fractura utilizados en el modelo Phase Field $G_c(0)$ fueron calculados ajustando las curvas J-R de las tres zonas de soldadura obtenidas a partir de ensayos experimentales realizados al aire [2]. Las curvas de resistencia se obtienen mediante simulaciones numéricas con el modelo de Phase Field siguiendo el procedimiento descrito en [8]. Calibrando el modelo, se reproduce el comportamiento a fractura de las tres zonas de la soldadura (BM-HAZ-WM) en ensayos realizados al aire tal y como se puede observar en la Figura 3. Cabe destacar en este punto, que el modelo propuesto es capaz de predecir con precisión el comportamiento a fractura de un acero sometido a presión de hidrógeno basándose únicamente en un elemento de acoplamiento entre el proceso de daño y la difusión de hidrógeno: la degradación de la tenacidad a fractura $f(C)$. No obstante, este modelo es incapaz de reproducir el comportamiento a fractura de aceros sometidos a cargas de hidrógeno cíclicas. Así pues, en el siguiente apartado se presenta la implementación llevada a cabo para reproducir la fatiga asistida por hidrógeno mediante modelos virtuales.

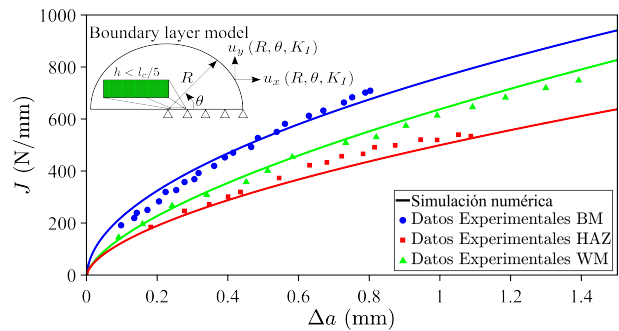


Figura 3. Predicciones computacionales de las curvas de resistencia (J-R) obtenidas al aire mediante ensayos de crecimiento de grieta para los tres materiales de la soldadura longitudinal analizada en este estudio[2], obtenidas mediante un modelo Boundary Layer 2D.

3.5 Modelización del comportamiento a fatiga del acero X80.

La modelización numérica del fenómeno de fatiga de este estudio, se basa en la formulación propuesta por [11], donde la tenacidad a fractura G_c se degrada mediante la función de degradación $f_\alpha(\bar{\alpha})$, la cual evoluciona en función de una variable de historia acumulativa $\bar{\alpha}$, que a su vez se expresa como función de una variable de estado

α , que captura la física del daño por fatiga. En coherencia con el balance de energía de fractura discutido anteriormente en el apartado 3.2, se asume que el daño por fatiga está impulsado por la energía almacenada en el sólido y, en consecuencia, el parámetro α se define como $\alpha = \psi$. La función de degradación por fatiga utilizada en este estudio se define como:

$$f_{\alpha}(\bar{\alpha}) = \begin{cases} 1; \bar{\alpha} \leq \alpha_T \\ \left(\frac{2\alpha_T}{\bar{\alpha} + \alpha_T} \right)^2; \bar{\alpha} > \alpha_T \end{cases} \quad (12)$$

donde α_T es un parámetro de ajuste que representa el umbral de fatiga, utilizado para dotar al modelo de un límite de resistencia del material, por debajo del cual no ocurre daño cíclico. La variable $\bar{\alpha}$ en un instante t se calcula según la ecuación (13), donde $\Delta\bar{\alpha}$ se muestra en la ecuación (14).

$$\bar{\alpha}_{n+1} = \bar{\alpha}_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \dot{\bar{\alpha}} \, d\tau = \bar{\alpha}_n + \Delta\bar{\alpha} \quad (13)$$

Con el principal objetivo de tener en cuenta el efecto de la tensión media en la velocidad de crecimiento de grieta y garantizar la coherencia dimensional, se introduce en el modelo el parámetro $\alpha_N = \frac{G_c}{12l_c}$, definido según [11].

Finalmente se muestra la definición de $\Delta\bar{\alpha}$:

$$\Delta\bar{\alpha} = \frac{\alpha_{n+1} - \alpha_n}{\alpha_N} \left(\frac{\alpha_{n+1} + \alpha_n}{2} \right) H \left(\frac{\alpha_{n+1} - \alpha_n}{\Delta t} \right) \quad (14)$$

donde $H(\cdot)$ es la función Heaviside. Para el acero X80 utilizado en este estudio y basándose en las leyes de velocidad de crecimiento de grieta obtenidas al aire para este acero en [4], se ha ajustado el modelo Phase Field del tal manera que $\alpha_T = 180 \text{ N/mm}^2$.

4. RESULTADOS

4.1 Predicciones computacionales del comportamiento a fatiga.

En la Tabla 2 se muestran las propiedades introducidas en el modelo, que junto con las tensiones residuales mostradas en la Figura 2, son los inputs del modelo virtual.

Tabla 2. Propiedades mecánicas y de difusividad utilizadas en el modelo virtual [2].

Propiedad	Base Metal	HAZ	Weld Metal
$E(\text{MPa})$	190480	202010	180300
$\sigma_y(\text{MPa})$	570	660	688
$n(-)$	0.1	0.08	0.07
$G_c(\text{N/mm})$	90	50	60
$D_H(\text{mm}^2/\text{s})$	4.18×10^{-5}	3.42×10^{-5}	2.71×10^{-4}

Para verificar la metodología llevada a cabo en este estudio se comparan los resultados obtenidos en la velocidad de crecimiento de grieta de una tubería soldada ensayada a escala real en [5], con las predicciones del modelo, mostrando una buena coherencia y verificando de este modo la eficacia de la metodología implementada en este estudio tal y como se puede apreciar en la Figura 4. Introduciendo en nuestro modelo virtual un defecto idéntico al introducido en el ensayo real, se calculan las

tasas de crecimiento de grieta en función de la amplitud del factor de intensidad de tensiones ΔK_I obtenido desde la normativa API 579-1/ASME FFS-1, y cuya expresión analítica se muestra en la ecuación (15):

$$\Delta K_I = \frac{\Delta P R_o^2}{R_o^2 - R_i^2} \sqrt{\pi a} \left[2G_0 - 2G_1 \left(\frac{a}{R_i} \right) + 3G_2 \left(\frac{a}{R_i} \right)^2 - 4G_3 \left(\frac{a}{R_i} \right)^3 + 5G_4 \left(\frac{a}{R_i} \right)^4 \right] \quad (15)$$

siendo ΔP la amplitud de la carga, R_i y R_o los radios interno y externo respectivamente de la tubería y G_i constantes definidas en la normativa en función del tamaño de grieta a . El defecto inicial se trata de una grieta radial de longitud efectiva $a_0 = 1.7 \text{ mm}$, el cual se ha introducido en la HAZ de la soldadura longitudinal tal y como se puede observar en la Figura 4.

4.2 Efecto de tratamientos térmicos PWHT en el comportamiento a fatiga.

En la industria, los tratamientos térmicos post-soldadura (Post Weld Heat Treatment, PWHT) son ampliamente utilizados, ya que se realizan después del proceso de ensamblaje de tuberías con el objetivo de reducir las tensiones residuales generadas. Numerosos estudios recientes han demostrado poder modelizar numéricamente esta relajación de tensiones, mostrando que el mecanismo de relajación de tensiones se produce por fluencia. Siguiendo la modelización numérica empleada en [12] sobre tratamientos térmicos en tuberías de acero X80 soldadas, se ha modelizado el tratamiento térmico. Dicho tratamiento consta de 3 etapas: (1) calentamiento (3h) velocidad de calentamiento: $3.88 \text{ }^\circ\text{C/min}$, (2) mantenimiento de la temperatura (6h): $700 \text{ }^\circ\text{C}$ y (3) enfriamiento (3h) velocidad de enfriamiento: $-3.88 \text{ }^\circ\text{C/min}$. El tratamiento realizado es suficiente para reducir en un 65.6% las tensiones residuales en la zona soldada [12]. Aplicando estos resultados a nuestro modelo virtual, se ha realizado la predicción del efecto del tratamiento térmico en el comportamiento a fatiga de la tubería mostrando como la velocidad de crecimiento de grieta se reduce notablemente tras el PWHT, aproximadamente en un 50% (ver Figura 4).

5. CONCLUSIONES

Las conclusiones obtenidas de este estudio evidencian la eficacia de la metodología computacional desarrollada para evaluar la integridad estructural de tuberías soldadas destinadas al transporte de hidrógeno a presión:

- Se ha demostrado que el uso de modelos virtuales que incorporan la técnica Phase Field, son capaces de reproducir con precisión los mecanismos de fractura y fatiga en tuberías soldadas.

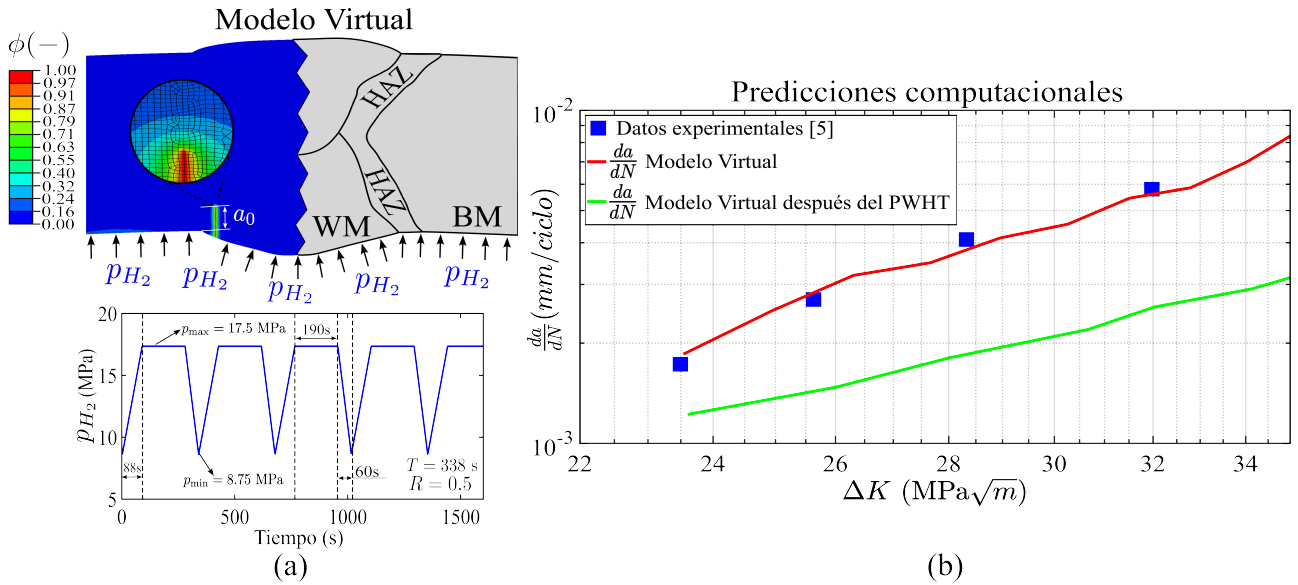


Figura 4. Predicciones computacionales del comportamiento a fractura ante cargas cíclicas del modelo virtual: (a) Esquema representativo del modelo virtual utilizado, donde se observa el defecto inicial a_0 , el cual coincide con el implementado en la tubería del ensayo a escala real (ver [5]). Además, se observa la carga cíclica aplicada durante el ensayo real y el ensayo virtual. (b) Se presentan las predicciones computacionales del modelo, junto con la velocidad de crecimiento de grieta obtenida tras la aplicación del tratamiento térmico post-soldadura (PWHT).

- La validación de la metodología computacional desarrollada frente a datos experimentales confirma su capacidad predictiva, proporcionando una herramienta fiable para el análisis y la optimización de estructuras soldadas sometidas a cargas cíclicas de hidrógeno presurizado.
- Las predicciones computacionales indican que el tratamiento térmico de recocido a 700 °C durante 6 horas es capaz de reducir en un 50% la velocidad de crecimiento de grieta en una tubería soldada.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer al Ministerio de Ciencia e Innovación la financiación recibida a través de la ayuda MCINN-23-CPP2021-008986.

REFERENCIAS

- [1] T. T. Le *et al.*, “Fueling the future: A comprehensive review of hydrogen energy systems and their challenges,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 54, pp. 791–816, Feb. 2024.
- [2] Y. Yang, L. Shi, Z. Xu, H. Lu, X. Chen, and X. Wang, “Fracture toughness of the materials in welded joint of X80 pipeline steel,” *Eng. Fract. Mech.*, vol. 148, pp. 337–349, 2015.
- [3] J. A. Ronevich, E. J. Song, B. P. Somerday, and C. W. San Marchi, “Hydrogen-assisted fracture resistance of pipeline welds in gaseous hydrogen,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 46, no. 10, pp. 7601–7614, 2021.
- [4] C. S. Marchi and J. Ronevich, “Implications of Gaseous Hydrogen on Welded Construction of Pipelines SAND2022-0820 PE,” no. January, 2022.
- [5] B. Bezensek, O. J. Huising, L. Bacchi, P. Roovers, and E. Bertelli, “Eprg Full Scale Fatigue Crack Growth Test on a Modern Linepipe Material in Gaseous Hydrogen,” *Proc. ASME 2024 Press. Vessel. Pip. Conf. (PVP2024)*, 29July-02Aug2024, pp. PVP2024-124195, 2024.
- [6] R. Fernández-Sousa, C. Betegón, and E. Martínez-Pañeda, “Analysis of the influence of microstructural traps on hydrogen assisted fatigue,” *Acta Mater.*, vol. 199, pp. 253–263, Oct. 2020.
- [7] H. Amor, J. J. Marigo, and C. Maurini, “Regularized formulation of the variational brittle fracture with unilateral contact: Numerical experiments,” *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 57, no. 8, pp. 1209–1229, 2009.
- [8] T. K. Mandal, J. Parker, M. Gagliano, and E. Martínez-Pañeda, “Computational predictions of weld structural integrity in hydrogen transport pipelines,” *Int. J. Hydrogen Energy*, no. 1, 2024.
- [9] J. Wijnen, J. Parker, M. Gagliano, and E. Martínez-Pañeda, “A computational framework to predict weld integrity and microstructural heterogeneity: Application to hydrogen transmission,” *Mater. Des.*, vol. 249, no. November 2024, p. 113533, 2025.
- [10] Y. Navidtehrani, C. Betegón, and E. Martínez-Pañeda, “A simple and robust Abaqus implementation of the phase field fracture method,” *Appl. Eng. Sci.*, vol. 6, Jun. 2021.
- [11] P. Carrara, M. Ambati, R. Alessi, and L. De Lorenzis, “A framework to model the fatigue behavior of brittle materials based on a variational phase-field approach,” *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 361, p. 112731, 2020.
- [12] X. Huang, H. Liu, C. Huang, J. Cui, Z. Xiao, and X. Zhu, “Creep relaxation to relieve residual stress in girth-butt welded X80 pipelines: Simulation and experiment,” *Thin-Walled Struct.*, vol. 205, no. PC, p. 112597, 2024.

APLICACIÓN DEL CAMPO DE FASES PARA PREDECIR EL EFECTO DE LA RUGOSIDAD SUPERFICIAL EN LA FATIGA DE ALTO CICLO

S. Jimenez Alfaro^{1,2}, E. Martinez Pañeda^{2*}

¹ Imperial College London – Department of Civil and Environmental Engineering, Exhibition Road SW7 2AZ, London, United Kingdom

² University of Oxford – Department of Engineering Science, Parks Road OX1 3PJ, Oxford, United Kingdom

* Persona de contacto: emilio.martinez-paneda@eng.ox.ac.uk

RESUMEN

La rugosidad superficial es un factor crítico que influye en la vida en fatiga de los componentes estructurales. Su efecto se cuantifica comúnmente mediante un coeficiente de corrección conocido como factor de superficie. En este artículo, se propone un marco numérico basado en el campo de fases para estimar el factor de superficie, teniendo en cuenta la naturaleza estocástica de la rugosidad superficial. El modelo se valida con datos experimentales existentes. Además, se investiga la influencia de parámetros clave en la vida en fatiga de superficies rugosas, específicamente la topología de la superficie y la tensión de fractura. Se observa un efecto significativo de la rugosidad superficial cuando aumenta la rugosidad media y disminuye la longitud de correlación del perfil de la superficie.

PALABRAS CLAVE: Rugosidad, Fatiga, Campo de Fases.

ABSTRACT

Surface roughness is a crucial aspect affecting the fatigue lifespan of structural components. Its impact is typically assessed using a correction coefficient referred to as the surface factor. This paper introduces a phase-field-based numerical framework to evaluate the surface factor while considering the stochastic characteristics of surface roughness. The model is verified against existing experimental data. Additionally, the study examines the effect of key parameters on the fatigue performance of rough surfaces, particularly surface topology and fracture stress. A notable influence of surface roughness is observed when the average roughness increases and the correlation length of the surface profile decreases.

KEYWORDS: Roughness, Fatigue, Phase Field.

1. INTRODUCCIÓN

La rotura por fatiga es reconocida como la principal causa de fallo en componentes sometidos a carga. Este fenómeno está influenciado por múltiples factores, incluyendo la composición del material, los procesos de fabricación y las condiciones ambientales. Entre estos, el acabado superficial es especialmente crítico, ya que las grietas por fatiga suelen iniciarse en la superficie, donde las irregularidades actúan como concentradores de tensión y favorecen la nucleación de grietas. Para abordar esta influencia, se aplica comúnmente un factor de corrección conocido como factor de superficie (K_s) para ajustar las propiedades de fatiga obtenidas a partir de especímenes pulidos. Definido inicialmente por Marin [1] en 1962, el factor de superficie se expresa como la relación entre la resistencia a la fatiga de un espécimen rugoso y la de un espécimen pulido. En la literatura, se han propuesto diversos modelos para definir el factor de superficie en función de diferentes propiedades, tales

como métricas de acabado superficial, el tipo de proceso de acabado y la resistencia a la tracción del material.

Para materiales de acero, K_s se correlaciona frecuentemente con el límite de fatiga, proporcionando un punto de referencia y destacando la importancia de la rugosidad superficial en el régimen de fatiga de alto ciclo (HCF), como se ha demostrado ampliamente [2]. Sin embargo, identificar una metodología precisa para describir K_s sigue siendo un desafío debido a la diversidad de aleaciones y procesos de mecanizado.

Varios estudios se han centrado en derivar expresiones para el factor de superficie basándose en datos experimentales de fatiga. En especial, se destacan los ensayos de Noll y Lipson en 1946 [3], donde se recopilaban un extenso conjunto de datos sobre la resistencia a la fatiga de aceros con diferentes valores de dureza y condiciones superficiales. Varios estudios han modelado la rugosidad superficial como una serie de muescas microscópicas, derivando expresiones para

estimar el factor de superficie con mayor precisión. Inicialmente, en 1961, Neuber introdujo un factor de concentración de tensiones estático K_t basado en los principios de la mecánica de fractura [4]. Sin embargo, dado que K_t tiende a proporcionar resultados muy conservadores, fue modificado mediante la aplicación de expresiones semiempíricas, como la propuesta por Peterson [5].

Una alternativa a estas técnicas semianalíticas es la aplicación de un modelo de daño continuo (CDM) [6] combinado con una representación topológica de la microestructura del material. En este tipo de modelos, ampliamente utilizados para predecir la iniciación y propagación de grietas, se introduce una variable de daño para describir la degradación del material. Aunque los CDM pueden proporcionar buenas aproximaciones, su implementación numérica puede generar imprecisiones. Esta limitación surge de la dependencia del mallado inherente a los CDM, ya que la tasa de daño presenta una singularidad en la punta de la grieta [7]. Este problema puede resolverse introduciendo un término de gradiente en la formulación, como se ha demostrado en el conocido modelo de campo de fases (PF) para fractura [7]. Una aproximación de este modelo PF a la fractura por fatiga puede lograrse incorporando una función de degradación por fatiga que ajuste la fractura a lo largo de los ciclos, en función de una variable histórica [8]. Este concepto fue extendido al HCF por Golahmar et al. [9]. A pesar de su aplicabilidad, el modelo PF no se ha utilizado para estudiar el efecto de la rugosidad superficial en la falla por fatiga.

Como se mencionó anteriormente, un aspecto clave en el estudio numérico de la rugosidad superficial (particularmente en el Método de los Elementos Finitos) es el diseño de una malla que reproduzca con precisión la topología de la superficie, la cual es inherentemente estocástica. En la literatura se han propuesto diversas estrategias, entre las que destaca la generación de microestructuras mediante teselaciones de Voronoi [2], donde los nodos se extruyen aleatoriamente para definir el perfil de rugosidad. No obstante, este método no captura la longitud de correlación de los perfiles rugosos reales y depende de la rugosidad media, mientras que otras métricas, como la rugosidad cuadrática media (RMS), resultan más efectivas en el análisis de fatiga, ya que representan mejor los defectos más críticos en la superficie de la pieza. Además, los resultados precisos solo se obtienen si se conoce el tamaño de grano, lo que nuevamente requiere mediciones ópticas mediante el método planimétrico. En 2023, Loth et al. [10] propusieron una nueva metodología para generar perfiles rugosos en superficies 3D. Esta herramienta ha sido aplicada con éxito en óptica y se basa en una distribución estocástica que considera la longitud de correlación del perfil de la superficie.

En este contexto, el objetivo principal de este estudio es desarrollar un marco numérico capaz de describir el

efecto de la rugosidad superficial en el régimen HCF. El modelo propuesto combina el avanzado modelo de campo de fases para fractura por fatiga presentado en la Ref. [11] con la herramienta estocástica para el diseño de mallas introducida en la Ref. [13]. Por primera vez, la evolución del factor de superficie en función de las métricas de rugosidad y las propiedades del material se representa mediante un enfoque puramente numérico. Esto proporciona una nueva perspectiva sobre la reducción de la vida en fatiga para una determinada rugosidad superficial y propiedades del material, eliminando la necesidad de campañas experimentales extensas y costosas.

2. DESCRIPCION DEL MODELO DE CAMPO DE FASES PARA PREDECIR LA FRACTURA POR FATIGA

En el modelo de campo de fases para fractura, la grieta se representa con una variable escalar suave y continua ϕ , denominada variable de daño o de campo de fase, que toma valores entre 0 (material intacto) y 1 (material completamente dañado). Una condición clave en el modelo es el cumplimiento de la condición de irreversibilidad, $\dot{\phi} \geq 0$. Para un sólido con dominio Ω y contorno $\partial\Omega$ el modelo se define a través de las siguientes expresiones

$$\nabla \cdot \sigma + \mathbf{b} = 0 \text{ in } \Omega \quad (1)$$

$$\sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t} \text{ on } \partial_t \Omega \quad (2)$$

$$g'(\phi)\mathcal{H} + \frac{G_c f(\bar{\alpha})}{2c_w} \left(\frac{w'(\phi)}{2\ell} - \ell \nabla^2 \phi \right) - \frac{G_c \ell}{2c_w} \nabla f(\bar{\alpha}) \nabla \phi = 0 \quad (3)$$

donde $\mathbf{b}, \mathbf{t}$ representan las fuerzas de volumen y de contorno que actúan en el material en el dominio Ω y el contorno $\partial_t \Omega \in \Omega$, respectivamente, y σ el tensor de tensiones. En la Eq. (3) $g(\phi)$ representa la función de degradación,

$$g(\phi) = (1 - \phi)^2, \quad (4)$$

mientras que $w(\phi)$, ℓ y c_w son parámetros dependientes del modelo escogido, en este caso el conocido como AT1 donde

$$w(\phi) = \phi, \ell = \frac{3EG_c}{8\sigma_c^2} \text{ y } c_w = 2/3. \quad (5)$$

En la Eq. (5) E es el módulo de Young, G_c es la tasa crítica de liberación de energía, y σ_c es la tensión de rotura. La variable $\mathcal{H}$ en la Eq. (3) es conocida como la variable histórica,

$$\mathcal{H} = \max \left\{ \max_{\tau \in [0, t]} \psi_{eo}^+(\varepsilon(\mathbf{u})), \mathcal{H}_{\min} \right\}, \quad (6)$$

donde $\mathcal{H}_{\min} = \frac{3G_c}{16\ell}$ y $\psi_{eo}^+(\varepsilon(\mathbf{u}))$ es la contribución de las deformaciones en tensión a la densidad de energía no

dañada. La función $f(\bar{\alpha})$ representa la degradación de la tenacidad a la fractura debido a la fatiga. De acuerdo al modelo presentado en [11], esta puede definirse como

$$f(\bar{\alpha}) = \left(1 - \frac{\bar{\alpha}}{\bar{\alpha}_0}\right)^2, \quad (7)$$

siendo $\bar{\alpha}_0$ un parámetro de ajuste con la curva SN del material, para lo que se hace uso de un punto de la misma (N_*, σ_*)

$$\bar{\alpha}_0 = \frac{N_* \left(\frac{\sigma_*}{\sigma_c}\right)^{2n}}{\left(1 - \frac{\sigma_*}{\sigma_c}\right)} \quad (8)$$

donde n es un parámetro que depende de los coeficientes de la regla de Basquin, $\sigma = aN^{-b}$,

$$n = \frac{-C_1}{b} + C_2. \quad (9)$$

Los coeficientes C_1, C_2 de la Eq. (9) fueron ajustados en la Ref. [11] según la función de degradación $f(\bar{\alpha})$ escogida. Finalmente, $\bar{\alpha}$ fue definida en [11] de forma incremental,

$$\bar{\alpha}_i = \bar{\alpha}_{i-1} + \Delta\bar{\alpha} \quad (10)$$

donde

$$\Delta\bar{\alpha} = \left(\frac{\alpha_{max}}{\alpha_n}\right)^n \left(\frac{1-R}{2}\right)^{2\kappa n} h(\alpha_{max}) \quad (11)$$

siendo

$$h(\alpha_{max}) = \text{Heaviside}\left(\max_{\tau \in [0, t]} \alpha_{max} \left(\frac{1-R}{2}\right)^{2\kappa} - \alpha_e\right) \quad (12)$$

Diferentes parámetros se distinguen en este modelo, $\alpha_n = \frac{\sigma_c \varepsilon_c}{2}$ donde ε_c es la tensión crítica a la rotura, R es el ratio de tensiones $R = \frac{\sigma_{max}}{\sigma_{min}}$, α_e es un parámetro relacionado con la resistencia a la fatiga, σ_e , una tensión que normalmente se define a un millón de ciclos siguiendo la regla de Basquin. Una primera aproximación para este modelo se obtendría aplicando el modelo unidimensional, $\alpha_n = \frac{\sigma_e}{2E}$. Finalmente κ es un parámetro que en [11] se estima como 0.5.

3. DESCRIPCION DEL MODELO PARA GENERAR SUPERFICIES RUGOSAS

La rugosidad de la superficie se refiere a las desviaciones en la dirección normal z de una superficie real con respecto a su forma nominal. Se caracteriza comúnmente mediante diversas métricas, siendo la rugosidad media R_a y la rugosidad cuadrática media R_q las más utilizadas.

$$R_a = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |z_i| \quad (13)$$

$$R_q = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_i^2} \quad (14)$$

En el modelo presentado en la Ref. [10], la desviación de altura de un conjunto de puntos en la malla de la superficie lisa (pulida), se define siguiendo un procedimiento estocástico gaussiano.

$$\mathbf{z} = [z_0, \dots, z_i, \dots, z_N] = R_q L w. \quad (15)$$

donde w es un ruido blanco gaussiano y L se define a partir de las posiciones iniciales de los nodos de la superficie pulida t , haciendo la descomposición de Cholesky de la matriz R ,

$$R_{ij} = \exp\left(\frac{-|t_i - t_j|^2}{2\ell_{cor}}\right) \quad (16)$$

siendo ℓ_{cor} la longitud de correlación, que se define en a través de la función de autocorrelación (ACF) atendiendo a diferentes criterios encontrados en la literatura: (1) el valor para el ACF disminuye al 10% de su valor inicial, (2) el valor para el que la ACF es igual a $1/e$, donde e es la constante de Napier, y (3) el valor para el que la ACF alcanza 0.2. En este artículo, se analizan estas opciones para identificar el criterio más adecuado. Con esto se consigue generar perfiles aleatorios como el de la Figura 1, donde se representan varias distribuciones para una rugosidad media $R_a = 1.5 \mu\text{m}$ y se comparan con los datos reales de la Ref. [2].

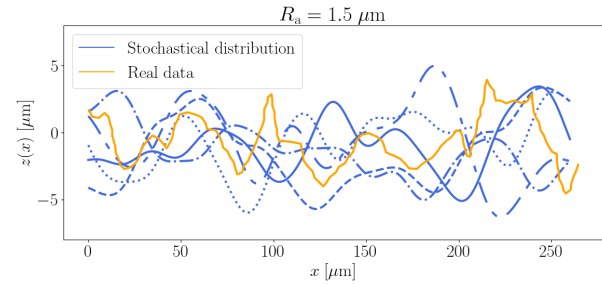


Figura 1. Ejemplo de varios perfiles de la rugosidad generados con la herramienta numérica.

4. RESULTADOS

En primer lugar los parámetros del modelo se ajustan haciendo uso de la curva SN del espécimen pulido, obtenida de la Ref. [2]. Tal y como puede observarse en la Figura 2, el modelo presentado en la Sección 2 logra capturar de forma precisa esta curva.

A continuación, para diferentes valores de R_a se aplicaran las herramientas descritas en la Sección 2 y 3 para determinar el impacto de la rugosidad en la vida a fatiga. Para $R_a = 0.5, 1.5 \mu\text{m}$ se comparan estos resultados con los de los experimentos en la Ref. [2]. A modo de ejemplo, la Figura 3 ilustra como se determina la longitud de correlación para uno de los

casos experimentales, donde se dispone del perfil de rugosidad, en este caso $R_a = 1.5 \mu\text{m}$

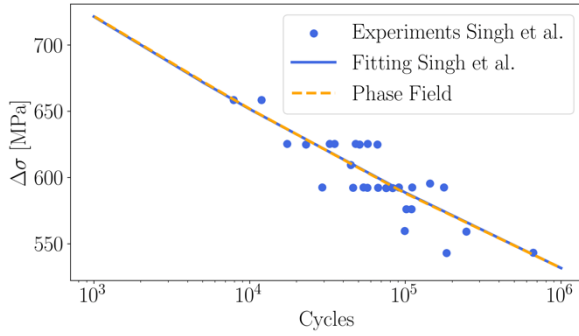


Figura 2. Curva S-N de la superficie pulida. Comparación con los experimentos [2].

La Figura 4 muestra la comparación con los resultados experimentales. Como puede verse la herramienta reproduce curvas paralelas, que son una buena aproximación en el régimen HCF. En el régimen LCF el efecto de la plasticidad modifica la pendiente de la curva SN en las superficies rugosas, alejando los resultados experimentales de los numéricos.

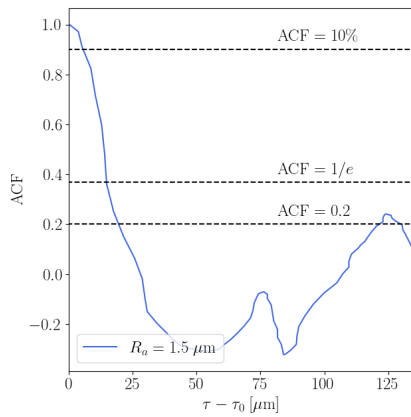


Figura 3. Función de autocorrelación para uno de los experimentos [2].

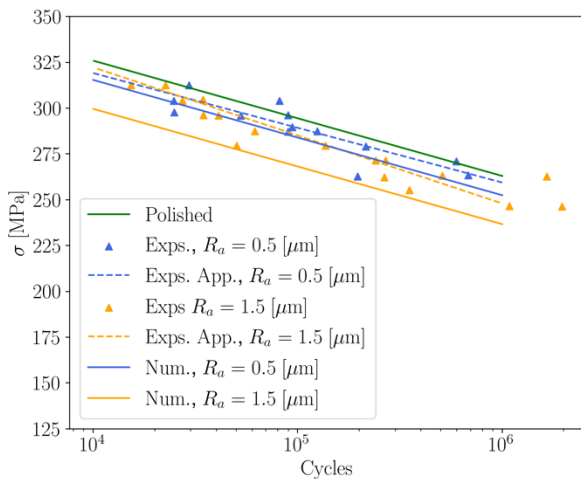


Figura 4. Comparación con los resultados experimentales de la superficie rugosa [2].

En la Figura 5 se muestra un mapa con los valores del factor de superficie como función de la rugosidad media y la longitud de correlación. Los valores más grandes (más cercanos a 1), que indican una menor influencia de la rugosidad en la vida útil a fatiga de la muestra, corresponden a grandes ℓ_{cor} y pequeños R_a . Por el contrario, los valores más pequeños de K_s se obtienen para pequeños ℓ_{cor} y grandes R_a . Este valor alcanza aproximadamente 0.5, lo que coincide con los valores mínimos estimados empíricamente en la literatura.

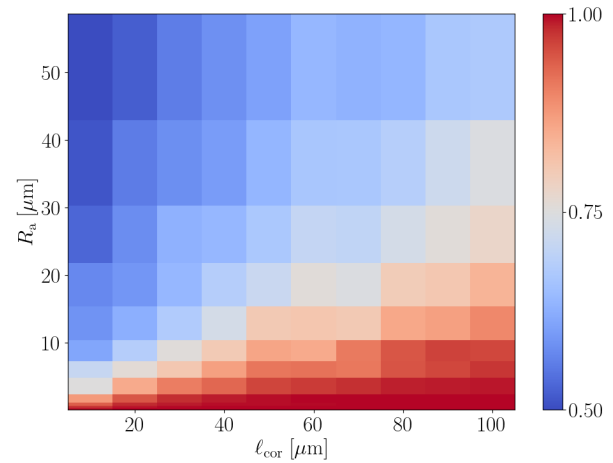


Figura 6: Mapa del factor de superficie.

5. CONCLUSIONES

Este artículo presenta un nuevo marco computacional para predecir la vida en fatiga de componentes rugosos en el régimen de fatiga de alto ciclo. Su principal ventaja es que solo requiere parámetros básicos del perfil de rugosidad, al tiempo que incorpora la naturaleza estocástica del fenómeno analizado. Entre sus capacidades, destaca la estimación del factor de superficie, el parámetro más utilizado para cuantificar la influencia de la rugosidad en la fatiga. El modelo ha sido validado con resultados empíricos de la literatura, demostrando una alta precisión cuando se conoce el perfil de rugosidad (es decir, la longitud de correlación y la rugosidad superficial media). Según los resultados de este estudio, el criterio 0.2 para definir la longitud de correlación ofrece la mejor concordancia con los datos experimentales. En los casos en que la longitud de correlación es desconocida, el modelo es capaz de proporcionar un rango de valores que aproximan los resultados experimentales.

Otra ventaja importante de la herramienta propuesta es que su enfoque puramente computacional permite generar mapas de operación, cuya obtención experimental sería extremadamente costosa. En particular, este estudio analiza la influencia de tres parámetros: la rugosidad superficial media, la longitud de correlación y la resistencia a la tracción. Los

resultados muestran que, en general, una longitud de correlación pequeña y una alta rugosidad superficial media aumentan la severidad del fenómeno, lo que puede volverse especialmente crítico, reduciendo la resistencia a la fatiga del componente hasta la mitad. Por otro lado, un incremento en la resistencia a la fractura puede disminuir el factor de superficie, aunque este efecto se vuelve despreciable a medida que la resistencia a la tracción sigue aumentando.

Uno de los aspectos clave de este estudio es la naturaleza estocástica de la rugosidad. Para tener esto en cuenta, la herramienta genera perfiles de rugosidad siguiendo una distribución gaussiana. Este análisis ha demostrado cómo la aleatoriedad afecta los resultados de las muestras y cómo obtener resultados fiables al incorporar esta característica inherente de las superficies rugosas.

Esta herramienta se ha aplicado al acero, ya que es el metal más estudiado en términos de rugosidad y cuenta con la mayor cantidad de datos disponibles, lo que permite una validación exhaustiva del marco computacional. Sin embargo, el modelo también puede aplicarse a otros metales, como el aluminio, permitiendo analizar el comportamiento de nuevos materiales bajo condiciones de rugosidad y convirtiéndose en una valiosa herramienta de diseño.

AGRADECIMIENTOS

S. Jimenez-Alfaro agradece a la Fundación Iberdrola en el marco del acuerdo de subvención Marie Skłodowska-Curie No. 101034297. E. Martínez-Pañeda agradece el apoyo financiero del programa Future Leaders Fellowship de UKRI [subvención MR/V024124/1].

REFERENCIAS

- [1] J. Marin, Mechanical behavior of engineering materials, Prentice-Hall, 1962.
- [2] K. Singh, F. Sadeghi, M. Correns, T. Blass, A microstructure-based approach to model effects of surface roughness on tensile fatigue, *International Journal of Fatigue* 129 (2019) 105229.
- [3] C. Noll, C. Lipson, Allowable working stresses, *Conference Proceedings of the Society for Experimental Mechanics Series* 3 (2) (1946) 89–109.
- [4] H. Neuber, Theory of Stress Concentration for Shear-Strained Prismatical Bodies With Arbitrary Nonlinear Stress-Strain Law, *Journal of Applied Mechanics* 28 (4) (1961) 544–550.

- [5] R. Peterson, Notch Sensitivity, in: G. Sines, J. Waisman (Eds.), *Metal Fatigue*, Mc Graw-Hill, 1959, pp. 293–306.
- [6] J. L. Chaboche, Continuum Damage Mechanics: Part I—General Concepts., *Journal of Applied Mechanics* 55 (1) (1988) 59–64.
- [7] P. Li, W. Li, B. Li, S. Yang, Y. Shen, Q. Wang, K. Zhou, A review on phase field models for fracture and fatigue, *Engineering Fracture Mechanics* 289 (2023) 109419.
- [8] P. Carrara, M. Ambati, R. Alessi, L. De Lorenzis, A framework to model the fatigue behavior of brittle materials based on a variational phase-field approach, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 361 (2020) 112731.
- [9] A. Golahmar, C. F. Niordson, E. Martinez-Pañeda, A phase field model for high-cycle fatigue: Total-life analysis, *International Journal of Fatigue* 170 (2023) 107558.
- [10] F. Loth, T. Kiel, K. Busch, P. T. Kristensen, Surface roughness in finite-element meshes: application to plasmonic nanostructures, *Journal of the Optical Society of America B* 40 (3) (2023) B1–B7.

MODELIZACIÓN NUMÉRICA Y VALIDACIÓN EXPERIMENTAL DEL SPRAY QUENCHING: EVOLUCIÓN DE TENSIONES RESIDUALES Y MICROESTRUCTURAL EN SECCIÓN DE TUBO

G. Cortabitarte^{1*}, A. Iglesias¹, X. Telleria¹, M. Martinez-Agirre¹, I. Llavori¹, M. Larrañaga¹, J. A. Esnaola¹

¹ Facultad de ingeniería de Mondragon Unibertsitatea – Departamento de Mecánica y Producción Industrial, Loramendi 4, Arrasate-Mondragon 20500, Spain

* Persona de contacto: gcortabitarte@mondragon.edu

RESUMEN

El *spray-quenching* es un tratamiento térmico avanzado utilizado para endurecer materiales mediante un enfriamiento controlado que combina chorros de aire y agua. Este método es ampliamente empleado en la industria, especialmente en aplicaciones como el temple continuo de tubos a través de su superficie exterior.

En este trabajo, se presenta una simulación termo-mecánica acoplada del proceso de *spray-quenching* aplicada a una sección de tubo. El modelo permite predecir tanto la evolución microestructural del material como las tensiones residuales generadas durante el enfriamiento, parámetros críticos para evaluar la integridad estructural del componente y evitar defectos como grietas.

Para validar la precisión del modelo numérico, se realizaron mediciones experimentales en las piezas tratadas. Las tensiones residuales fueron evaluadas mediante técnicas de difracción de rayos X y la técnica de incremental *hole drilling*, mientras que la evolución microestructural se analizó utilizando un microscopio electrónico de barrido (SEM). Los resultados obtenidos muestran una excelente correlación entre las predicciones del modelo y los datos experimentales, destacando la fiabilidad de la simulación como herramienta para optimizar el diseño y la operación de procesos industriales.

PALABRAS CLAVE: Spray-Quenching, Tensiones Residuales, Modelización Numérica.

ABSTRACT

Spray quenching is an advanced heat treatment process used to harden materials through controlled cooling that combines air and water sprays. This method is widely employed in industries, particularly in applications such as the continuous quenching of tubes through their external surface.

This study presents a coupled thermomechanical simulation of the spray quenching process applied to a tube section. The model predicts both the microstructural evolution of the material and the residual stresses generated during cooling, which are critical parameters for assessing the structural integrity of the component and preventing defects such as cracks.

To validate the accuracy of the numerical model, experimental measurements were performed on the treated parts. Residual stresses were evaluated using X-ray diffraction and incremental hole drilling techniques, while the microstructural evolution was analysed using a scanning electron microscope (SEM). The results demonstrate excellent agreement between the model predictions and the experimental data, highlighting the reliability of the simulation as a tool to optimize the design and operation of industrial processes.

KEYWORDS: Spray-Quenching, Residual Stresses, Numerical Modelling.

1. INTRODUCCIÓN

El uso de tratamientos térmicos en aceros es habitual en procesos de fabricación de componentes estructurales y mecánicos como engranajes, vigas, ejes, maquinaria y componentes de automoción. Uno de estos tratamientos es el *spray-quenching*, un proceso de enfriamiento controlado que permite modificar las propiedades mecánicas del material mediante la generación de microestructuras endurecidas y la introducción de tensiones residuales (TR). Este tratamiento busca alcanzar un equilibrio entre dureza y tenacidad, garantizando el cumplimiento de los requisitos funcionales del componente tratado [1].

El *spray-quenching* consiste en calentar el componente hasta una temperatura superior a la de austenización

(entre 800-1000 °C) y enfriarlo de forma controlada mediante la pulverización de un medio refrigerante, como agua o soluciones poliméricas. La velocidad de enfriamiento resultante depende de factores como la conductividad térmica del material, la geometría del componente y la distribución del flujo del refrigerante. Este proceso induce transformaciones de fase en el acero, generando estructuras como martensita, bainita o perlita, dependiendo de la cinética de enfriamiento [2].

En comparación con el temple por inmersión, el *spray-quenching* permite un mayor control sobre la distribución de temperaturas y velocidades de enfriamiento, reduciendo distorsiones geométricas y tensiones internas excesivas. Sin embargo, la presencia de gradientes térmicos significativos puede inducir TR considerables

debido a las diferencias en la velocidad de contracción volumétrica entre la superficie y el núcleo del componente. Las zonas cercanas a la superficie experimentan un enfriamiento más rápido, lo que resulta en la formación de estructuras más duras y una mayor resistencia en comparación con las zonas internas. Como consecuencia, la superficie tiende a generar tensiones compresivas mientras que el núcleo presenta tensiones tractivas, lo que puede afectar el comportamiento mecánico del componente en servicio [3].

Las TR generadas durante el *spray-quenching* pueden influir en la resistencia a la fatiga, la estabilidad dimensional y la integridad estructural del componente. En algunos casos, una distribución inadecuada de TR puede provocar la iniciación de grietas o la falla prematura del material. Por ello, es fundamental comprender y modelar el proceso con precisión para predecir la evolución de las TR y las transformaciones microestructurales [4].

El modelado numérico basado en el método de elementos finitos (FEM) permite simular el proceso de *spray-quenching*, proporcionando información detallada sobre la evolución térmica, la cinética de transformación de fase y la distribución de TR en el componente tratado. Para lograr una simulación representativa, es necesario considerar la evolución de la temperatura en cada instante del proceso, ya que tanto la velocidad de enfriamiento como las propiedades termo-mecánicas del material varían espacial y temporalmente. Un modelo FEM preciso debe ser capaz de asignar propiedades dependientes de la temperatura y la microestructura a cada elemento del dominio de cálculo, permitiendo así predecir con precisión el estado final del componente tras el tratamiento térmico [1].

Dada la importancia de estos factores, el presente trabajo tiene como objetivo la modelización numérica y validación experimental del *spray-quenching* en secciones de tubo, evaluando la evolución de las TR y la microestructura generada. Para ello, se emplearán simulaciones numéricas basadas en FEM y técnicas experimentales de caracterización de TR y microestructura, con el fin de validar y mejorar los modelos predictivos existentes.

2. METODOLOGIA

Se ha analizado un tubo API 5L X70 con un espesor de pared de 12 mm. Este tipo de tubos es sometido a un tratamiento de temple continuo, tanto en la parte exterior como en la interior, mediante la aplicación de agua a presión, lo cual imita el proceso de *spray-quenching*.

2.1 Modelización numérica

El tratamiento se ha modelado de forma desacoplada: en primer lugar, se han calculado las temperaturas mediante un modelo térmico, y, posteriormente, se ha utilizado la

evolución de las temperaturas obtenidas en una simulación mecánica.

El objetivo de la modelización térmica es obtener la velocidad de enfriamiento no uniforme en el componente, la cual tiene un impacto directo en la predicción de tensiones residuales, microestructura y propiedades del material. No obstante, con el objetivo de reducir el alto coste computacional asociado a la dinámica de fluidos durante el proceso, la metodología propuesta consta de dos partes. Primero, se ha ajustado el coeficiente de transferencia de calor (HTC por sus siglas en inglés) mediante simulación inversa basada en mediciones experimentales obtenidas por termopares. De esta manera, ha sido posible obtener la magnitud transitoria del HTC a lo largo de todo el proceso de enfriamiento en ambas superficies del tubo. A continuación, se emplea un modelo numérico basado en la dinámica de fluidos computacional (CFD por sus siglas en inglés). De esta manera, ha sido posible obtener la distribución no homogénea de la temperatura debido a la extracción de calor no uniforme que ocurre sobre la superficie del material. Para ello, se ha empleado el modelo de fases discretas para modelizar la adición de partículas de agua en el chorro de aire del *espray*. Al tratarse de un enfriamiento continuo y estático, la distribución no uniforme se mantiene inalterada durante el proceso de refrigeración. Por tanto, ha sido posible combinar el HTC transitorio obtenido por simulación inversa con la distribución no homogénea obtenida por CFD, y conseguir las distribuciones no uniformes y transitorias del HTC a lo largo del proceso.

Una vez calculada la evolución térmica, se realiza un segundo modelo mecánico en el que se determinan las tensiones residuales y la evolución microestructural. Para modelar el comportamiento del material, es fundamental conocer tanto la evolución microestructural como la velocidad de enfriamiento y la temperatura de cada elemento del modelo.

Para predecir la evolución microestructural, es imprescindible disponer del diagrama CCT (Continuous Cooling Transformation) del material, el cual ha sido estimado utilizando el modelo de Nishikawa [5]. Se ha modelado la transformación difusiva de la austenita en bainita, ferrita y perlita, considerando el tiempo de nucleación, así como la transformación no difusiva de la austenita en martensita mediante la ecuación de Koistinen-Marburger. La dureza del material se ha calculado en función del porcentaje de cada fase presente en los diferentes elementos, utilizando las ecuaciones empíricas desarrolladas por Maynier et al. [6], las cuales se detallan a continuación.

$$\begin{aligned}
HV_M &= 127 + 949C + 27Si + 11Mn + 16Cr + 8Ni + 21\log v_R \\
HV_B &= -323 + 185C + 330Si + 153Mn + 144Cr + 191Mo + \\
&65Ni + (\log v_R)(89 + 53C - 55Si - 22Mn - 20Cr - 33Mo - 10Ni) \\
HV_{F-P} &= 42 + 223C + 53Si + 30Mn + 7Cr + 19Mo + 12.6Ni + \\
&(\log v_R)(10 - 19Si + 8Cr + 4Ni + 130V)
\end{aligned}$$

Donde v_R es la velocidad de enfriamiento

$$HV = \frac{\%FP \cdot HV_{F-P} + \%B \cdot HV_B + \%M \cdot HV_M}{100}$$

La evolución de las tensiones residuales se ha modelado mediante una subrutina UMAT, empleando un modelo de material dependiente de la velocidad de enfriamiento y la temperatura, desarrollado por Telleria et al. [7].

2.2 Proceso experimental

El tramo de tubo ha sido sometido a un proceso de temple por ambos lados mediante dos espráis, uno en cada cara, como se ilustra en la Figura 1. Este sistema permite ajustar la mezcla de aire y agua mediante la modificación de parámetros como la presión de aire, el caudal de aire y el flujo másico de agua, lo que posibilita el control preciso de la velocidad de enfriamiento y, en consecuencia, la obtención de una microestructura y tensiones residuales controladas. Adicionalmente, se ha diseñado y fabricado un marco específico para alojar el tubo, asegurando su correcta alineación y centrado con respecto a los espráis.

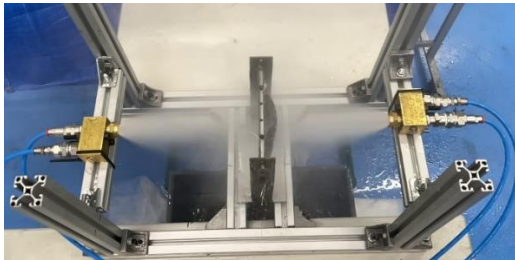


Figura 1. Set-up experimental de temple por spray

El enfriamiento se ha llevado a cabo bajo las condiciones especificadas en la Tabla 1:

Tabla 1. Parámetros de proceso de spray

H	230 mm
P_{aire}	2,7 bar
P_{agua}	1,3 bar
Q_{aire}	320 L/min
$\dot{m}_{\text{aire}}$	6,4e-4 kg/s
$\dot{m}_{\text{agua}}$	0,06 kg/s

Para controlar el proceso de enfriamiento y, posteriormente, calcular el coeficiente de transferencia de calor necesario para el análisis numérico, se han instalado termopares desde la parte exterior del tubo hasta el centro, en 5 puntos a lo largo del espesor (ver

Figura 2). De esta manera, se monitoriza la temperatura del tubo en su zona central y a distintas distancias de la superficie.

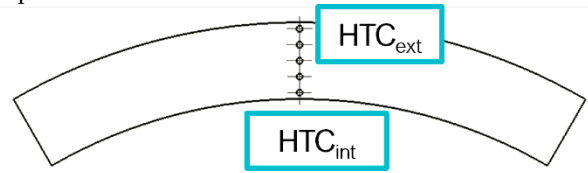


Figura 2. Disposición de los termopares en el tubo

Tras realizar el proceso de temple por spray, se han medido las tensiones residuales superficiales mediante la técnica de *hole drilling*, con el fin de validar las tensiones predichas por el modelo numérico. Además, se han realizado mediciones de dureza Vickers y se ha observado la microestructura del tubo mediante un microscopio óptico, para validar las predicciones de dureza y el porcentaje de fases en el material.

3.RESULTADOS

3.1 Evolución térmica

Una vez realizados los ensayos experimentales, se ha realizado el ajuste del HTC mediante simulación inversa. La Figura 3 muestra la magnitud del HTC transitorio a lo largo del proceso de enfriamiento.

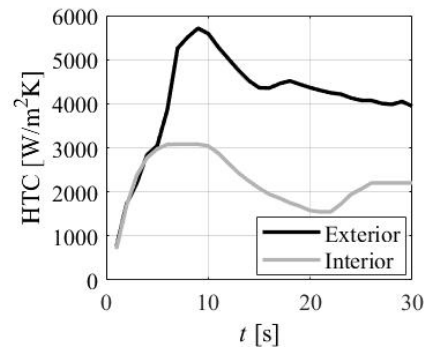


Figura 3. Variación del HTC en la superficie exterior e interior del tubo durante el temple.

Del mismo modo, se han obtenido la distribución no homogénea del HTC, es decir, la huella del spray, mediante simulación CFD (ver Figura 4)

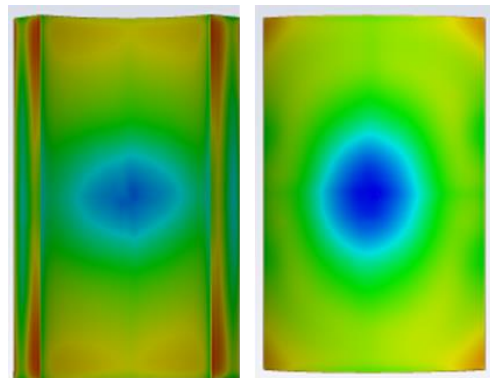


Figura 4. Distribución no homogénea del HTC en ambas superficies del tubo.

Finalmente, la Figura 5 presenta la evolución experimental y numérica de la temperatura en la superficie exterior, interior y el núcleo del material durante el proceso de temple.

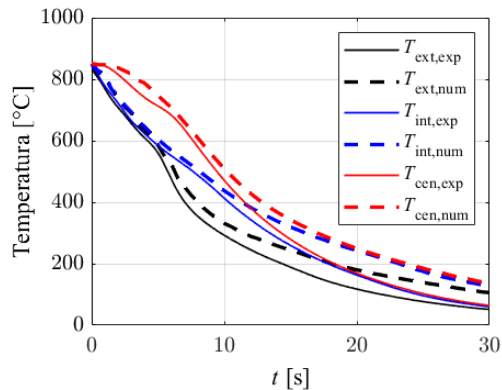


Figura 5. Variación de la temperatura en la superficie y núcleo durante el temple: medidas experimentales y predicción mediante simulación numérica.

Es posible observar diferencias de hasta el 8% al inicio del enfriamiento ($T > 600\text{ °C}$), el cual se considera clave en lo que a la generación de tensiones residuales y microestructura se refiere.

3.2 Evolución microestructural

Una vez calculada la evolución de la temperatura del tubo, se ha calculado la evolución microestructural y de durezas del tubo, a partir de las curvas CCT estimadas con el modelo de Nishikawa [5]. En la Figura 6 se muestra que, tras el enfriamiento, se obtiene mayor porcentaje de bainita en la zona central y superficial donde el enfriamiento es mas lento. A partir de la Figura 7, se observa una microestructura con una disposición acicular y de aspecto algo desordenado, lo que sugiere una posible microestructura bainítica con ferrita, que coincide con los resultados numéricos obtenidos.

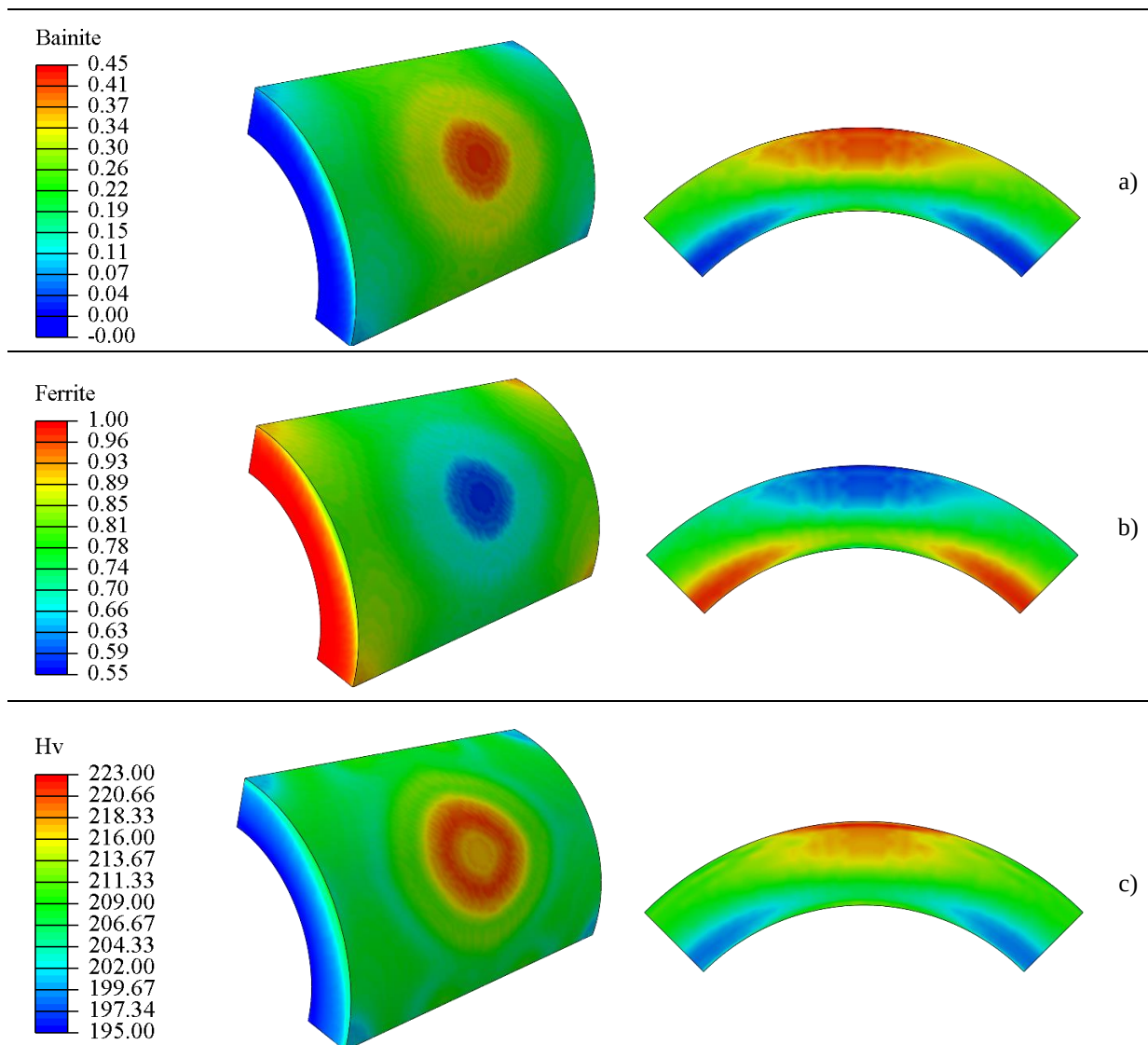


Figura 6. Resultados de la microestructura tras el proceso de espray. a) Porcentaje de bainita, b) Porcentaje de Ferrita y c) Dureza final del tubo

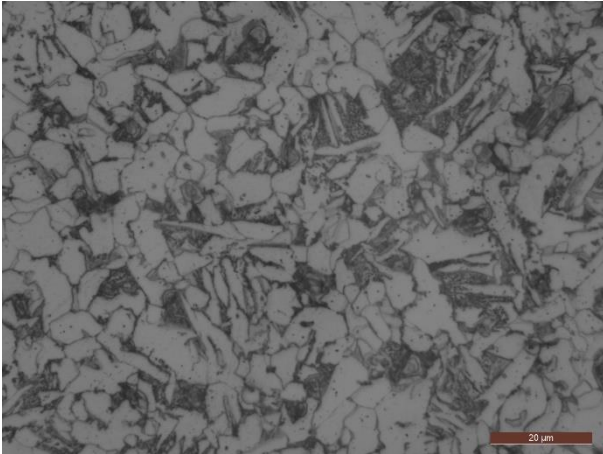


Figura 7. Microestructura del tubo tras el proceso de temple por spray

En la Figura 6.c, se observa que la dureza es algo mayor en las zonas donde el enfriamiento se ha realizado de forma más rápida, donde existe mayor porcentaje de bainita. Sin embargo, la dureza no cambia en exceso y oscila entre 223 y 195 HV. Se han realizado mediciones en la zona del núcleo de la pieza obteniendo valores entre 200 y 210 HV que coinciden muy bien con los resultados numéricos.

3.3 Predicción de tensiones residuales

La Figura 8 muestra las tensiones en dirección tangencial al tubo que son muy similares a las obtenidas en dirección axial. Se observa que las tensiones de la superficie son compresivas, siendo estas máximas en la zona de impacto directo del spray, ya que el enfriamiento es mas rápido en esta zona. Se han realizado una primera medición experimental en la zona central del tubo, mediante *hole drilling* obteniendo valores entre -140 y -160MPa. Esto sugiere que existe la necesidad de realizar más ensayos, y que las propiedades del material deben ser caracterizadas, ya que gran parte de las propiedades se han estimado.

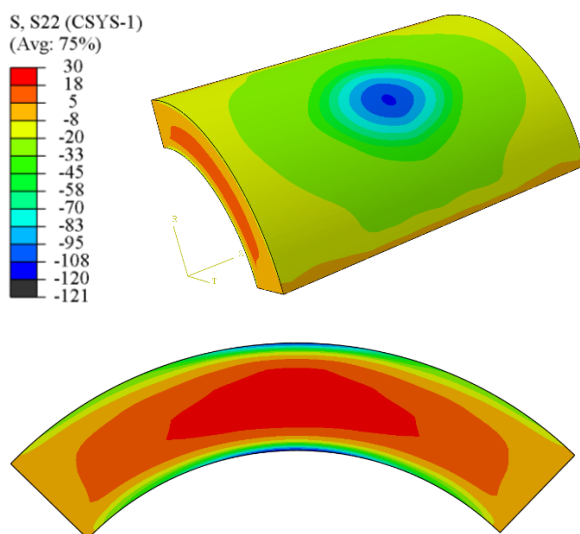


Figura 8. Tensiones residuales en dirección tangencial al tubo

4. CONCLUSIONES Y LINEAS FUTURAS

La metodología propuesta predice la evolución del patrón de temperaturas, microestructura, dureza y tensiones residuales en el proceso de spray quenching. Sin embargo, la precisión del cálculo depende en gran medida de la caracterización del material API 5L X70, por lo que se prevé realizar un estudio para determinar su evolución microestructural y propiedades mecánicas a distintas velocidades de enfriamiento y temperaturas

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer el apoyo financiero proporcionado por el Gobierno Vasco mediante el proyecto ICME23.

REFERENCIAS

- [1] E. Bulut, G. Sevilgen, F. Eşiyok, F. Öztürk, and T. T. Abi, "Three dimensional numerical analysis of heat transfer during spray quenching of 22MnB5 steel with a single nozzle," *Heat and Mass Transfer/Waerme- und Stoffuebertragung*, vol. 57, no. 6, pp. 961–974, Jun. 2021, doi: 10.1007/S00231-020-02992-W/FIGURES/19.
- [2] H. K. D. H. Bhadeshia and R. W. K. Honeycombe, "Preface to the Third Edition," in *Steels: Microstructure and Properties (Fourth Edition)*, Fourth Edition., H. Bhadeshia and R. Honeycombe, Eds., Butterworth-Heinemann, 2017, p. xv. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-100270-4.00022-6>.
- [3] M. A. González-Melo, O. A. Rodríguez-Rodríguez, B. Hernández-Morales, and F. A. Acosta-González, "Numerical Model of Simultaneous Multi-Regime Boiling Quenching of Metals," *Journal of Manufacturing and Materials Processing* 2024, Vol. 8, Page 31, vol. 8, no. 1, p. 31, Feb. 2024, doi: 10.3390/JMMP8010031.
- [4] M. R. Guechi, P. Desevaux, and P. Baucour, "On the Numerical and Experimental Study of Spray Cooling," *The Journal of Computational Multiphase Flows*, vol. 5, no. 4, pp. 239–249, Dec. 2013, doi: 10.1260/1757-482X.5.4.239.
- [5] A. Nishikawa, "Python code for calculating transformation diagrams (TTT and CCT curves) for steels." Accessed: Mar. 13, 2025. [Online]. Available: <https://github.com/arthurshn/transformation-diagrams>
- [6] P. H. Maynier and J. D. Manager, "Prediction of Microstructure via Empirical Formulae Based on CCT Diagrams," *The Metallurgical Society/AIME*, 1978.
- [7] X. Telleria *et al.*, "Metodología para contemplar tensiones residuales en componentes de acero tratados térmicamente por temple y revenido," 2023.

PREDICCIÓN NUMÉRICA DE DUREZA Y TENSIONES RESIDUALES EN ENGRANES DE ACERO TEMPLADOS POR INDUCCIÓN

Aritz Goñi^{1*}, Unai Segurajauregi¹, Jon Ander Esnaola², Maialen Areitioaurtena¹, Mario Javier Cabello¹

¹ Ikerlan Technology Research Centre, Basque Research and Technology Alliance (BRTA), Paseo J.M. Arizmendiarieta 2, 20500 Arrasate-Mondragon, Spain

² Department of Mechanics and Industrial Manufacturing, Mondragon Unibertsitatea, Loramendi 4, 20500 Arrasate-Mondragon, Spain

* Persona de contacto: agoni@ikerlan.es

RESUMEN

El temple por inducción es un proceso de fabricación ampliamente empleado en la industria que se aplica para mejorar las propiedades mecánicas de los componentes y optimizar su comportamiento a fatiga, fractura y desgaste. La inducción localiza el calentamiento en la superficie del material, generando una capa templada de alta dureza. El principal efecto del proceso que impacta en la vida a fatiga de los componentes es la aparición de tensiones residuales, presentando un patrón compresivo en la superficie, transformándose en tracción en la zona de transición y disminuyendo gradualmente en la zona sin tratar. Sin embargo, la predicción de las tensiones residuales es aún un reto para la comunidad científica, especialmente en componentes industriales complejos, debido al alto coste computacional por el carácter multifísico del proceso. En este trabajo se presenta un modelo térmico-metalúrgico-mecánico acoplado de elementos finitos en el software ANSYS® para predecir las propiedades mecánicas y las tensiones residuales generadas durante el proceso de temple por inducción en un diente de engrane de acero 42CrMo4. Los resultados obtenidos mediante este modelo de simulación se utilizarán en cálculos posteriores a fatiga para considerar el efecto del proceso de fabricación en la integridad estructural de los componentes.

PALABRAS CLAVE: Temple por inducción, Modelo numérico, tensión residual, Dureza, Engranaje.

ABSTRACT

Induction hardening is a widely used manufacturing process in industry to improve mechanical properties of components and to optimise their fatigue, fracture and wear behaviour. Induction heating localises the heat on the material's surface, creating a hardened layer of high hardness. The main effect of the process that impacts the fatigue life of the components is the appearance of residual stresses showing a compressive pattern on the surface, transitioning to tensile in the transition zone and gradually decreasing in the untreated zone. However, predicting residual stresses is still a challenge for the scientific community, especially in complex industrial components, due to the high computational cost of the process's multiphysical nature. This study presents a coupled thermal-metallurgical-mechanical finite element model in ANSYS® software to predict mechanical properties and residual stresses generated during the induction hardening process in a 42CrMo4 steel gear tooth. The results obtained through this simulation model will be used in subsequent fatigue calculations to account for the manufacturing process's effect on the structural integrity of components.

KEYWORDS: Induction hardening, Numerical model, Residual stress, Hardness, Gear.

1. INTRODUCCIÓN

Los engranajes, fundamentales en la transmisión de movimiento en industrias como la automotriz, aeronáutica o eólica, requieren tratamientos térmicos para mejorar sus propiedades mecánicas. Uno de los métodos más empleados en su fabricación es el temple por inducción, ya que endurece la superficie sin afectar el núcleo del material, optimizando así su resistencia y durabilidad. Este tratamiento térmico genera una capa

martensítica de alta dureza en la superficie de los componentes. Para lograrlo, se eleva la temperatura de la pieza por encima de su punto de austenización mediante corrientes inducidas por un inductor cercano a la pieza, a través del cual fluye una corriente alterna y posteriormente se enfría rápidamente mediante una solución de agua y polímero [1]. La profundidad de la capa templada puede alcanzar hasta 10 mm, dependiendo de la intensidad de la corriente, la frecuencia y el tiempo de proceso.

Aunque el principal objetivo del temple por inducción es la generación de una capa endurecida de alta resistencia mecánica, el proceso también conlleva efectos adicionales que deben considerarse. Uno de los más relevantes, debido a su impacto en la resistencia a fatiga de los componentes, son las tensiones residuales. Éstas suelen presentar un patrón compresivo en los primeros milímetros de profundidad, el cual se transforma en tracción en el límite de la capa templada y disminuye gradualmente en la zona no tratada. Este comportamiento mejora la resistencia a fatiga, ya que las tensiones de compresión retrasan la iniciación de grieta y limitan su propagación [2]. Por ello, la correcta predicción de las tensiones residuales generadas en el temple por inducción es clave para realizar análisis de fatiga precisos.

La simulación y el modelado del temple por inducción se han convertido en herramientas fundamentales para optimizar parámetros de proceso y mejorar la calidad de los componentes. Park *et al.* [3] desarrollaron un modelo numérico que integra análisis térmico, mecánico y metalúrgico para evaluar la distribución de fases microestructurales y tensiones residuales en engranajes tratados por inducción; sin embargo, los resultados tensionales no coincidieron plenamente con los datos experimentales. Asimismo, Shen *et al.* [4] y Shi *et al.* [5] emplearon una aproximación numérica similar para su estudio del temple por inducción de cigüeñales de automoción y árboles de levas de un motor marino respectivamente. Por último, destaca también el trabajo de Javaheri *et al.* [6], quienes combinaron simulaciones numéricas con datos experimentales para predecir la microestructura y la dureza en tuberías templadas por inducción. El alto contenido multifísico de las simulaciones unido a la complejidad de los procesos y las geometrías de los componentes industriales, antojan un alto coste computacional de los cálculos.

En este trabajo se presenta un modelo acoplado electromagnético-térmico-mecánico-metalúrgico para calcular la capa templada, el perfil de durezas y las tensiones residuales en un engranaje de multiplicadora de turbinas eólicas. Se plantean estrategias de simulación computacionalmente eficientes y robustas, buscando el compromiso entre rapidez de cálculo y precisión de resultados. Los resultados de estos modelos de simulación pueden emplearse en posteriores cálculos estructurales de fatiga, dado el alto efecto de estos en el comportamiento en servicio de este tipo de componentes.

2. CASOS DE ESTUDIO

El material de estudio es un acero 42CrMo4, ampliamente utilizado en componentes estructurales como rodamientos o engranajes, sujetos a altas sollicitaciones a fatiga. La composición química del acero se presenta en la Tabla 1, expresada en porcentaje de

masa. Antes del temple por inducción del caso de estudio, el material tiene una dureza aproximada de 320HV.

Tabla 1. Composición química del acero 42CrMo4.

% C	% Mn	% Cr	% Mo
0.45	0.90	1.20	0.30
% Si	% P	% S	% Cu
0.40	0.025	0.035	≤0.4

El presente estudio se centra en un caso industrial de temple por inducción en barrido aplicado a un engranaje de multiplicadora de un aerogenerador. El tratamiento térmico se lleva a cabo de forma secuencial, procesando diente por diente. Para este proceso, se considera una corriente media de 9000 A pico con una frecuencia de 10 kHz. El inductor, con forma de V, está diseñado para ajustarse a la geometría del engranaje y se desplaza a una velocidad de 3.5 mm/s a lo largo de cada diente. Posterior al inductor, se desplaza una ducha a la misma velocidad. La Figura 1 (izq.) muestra el caso industrial de engrane analizado. En este trabajo, se estudia el temple por inducción en barrido aplicado al engranaje inferior (en gris), el cual cuenta con 24 dientes, un módulo de 8, una longitud de 32 mm y un diámetro primitivo de 96 mm. Por otro lado, la Figura 1 (dcha.) ilustra la reducción del modelo utilizada en el análisis, donde se consideran únicamente los dos dientes en contacto con el inductor.

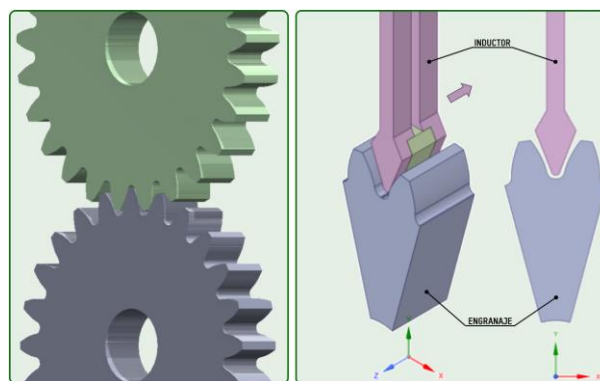


Figura 1. Caso industrial de engrane analizado(izq.) y simplificación del caso para simulación (dcha.).

2.1. Propiedades de material

Para modelar el proceso de temple por inducción, es fundamental conocer diversas propiedades de material. La permeabilidad magnética y la resistividad eléctrica fueron determinadas en un estudio previo de los autores [7], mientras que la conductividad térmica y el calor específico se tomaron del trabajo de Montalvo-Urquiza *et al.* (2013) [8].

Por otro lado, la obtención del diagrama de Transformación de Enfriamiento Continuo (CCT) del material analizado, se realizaron ensayos de dilatometría [9]. En este trabajo, se emplea la técnica del Coeficiente de Expansión Térmica (CTE) equivalente, en la cual el CTE se calcula a partir de los ensayos de dilatometría. Como se muestra

en la Figura 2, se identificaron dos valores de CTE, dependiendo de la fase microestructural y su transformación. Este enfoque de CTE equivalente tiene en cuenta tanto la expansión o contracción volumétrica debida a las transformaciones de fase como los CTE específicos de cada fase.

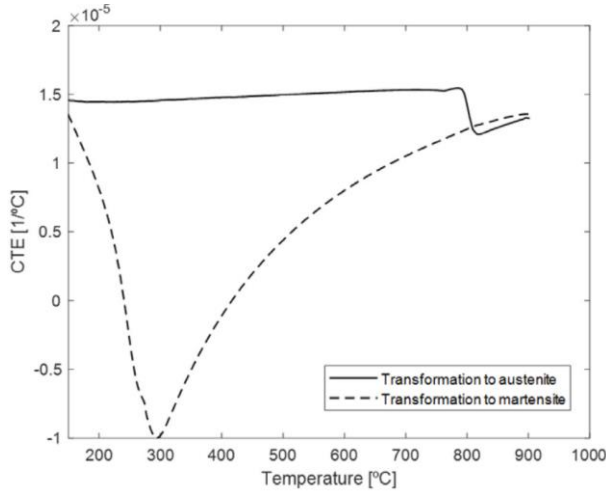


Figura 2. Coeficiente de Expansión Térmica equivalente [9].

Por último, para calcular las propiedades mecánicas del material, se empleó la correlación entre el límite elástico y la dureza propuesta por Pavlina *et al.* [10]. Además, el límite elástico varía con la temperatura según la ecuación ajustada de Guo *et al.* (2008) [11]. Estas ecuaciones se integraron en el modelo numérico, siendo esenciales para el cálculo de las tensiones residuales.

3. MODELO NUMÉRICO DE TEMPLE POR INDUCCIÓN

El proceso de temple por inducción involucra múltiples fenómenos físicos, incluyendo electromagnéticos, térmicos, microestructurales y mecánicos. Estas disciplinas están interconectadas y presentan numerosas interacciones que deben considerarse en un modelo de simulación numérica para garantizar una representación precisa del proceso.

3.1. Acoplamiento electromagnético-térmico

El apartado electromagnético se rige por las ecuaciones de Maxwell las cuales describen los fenómenos electromagnéticos que ocurren durante el calentamiento por inducción. A través de estas ecuaciones, es posible calcular el calor generado en el interior de la pieza [12].

La solución del campo electromagnético mediante el método de elementos finitos conlleva un alto coste computacional, especialmente en el análisis de casos industriales complejos. Para abordar esta limitación, los autores desarrollaron y validaron un modelo semi-analítico, en el cual las ecuaciones de Maxwell se

resuelven una única vez a temperatura ambiente. Posteriormente, el modelo ajusta analíticamente las propiedades electromagnéticas en función de la temperatura de la pieza. Para una descripción detallada del modelo semi-analítico, se remite al lector al trabajo de Areitioaurtena *et al.* (2021) [7].

En la fase de enfriamiento, se ha implementado un coeficiente de transferencia de calor por convección obtenido a través de mediciones de temperatura experimentales, siguiendo el método presentado por Liščić and Filetin [13], para simular las duchas. La fracción de austenita transformada se describe mediante la ecuación modificada de Koistinen y Marburger [14], mientras que la transformación martensítica no difusiva se define mediante la relación establecida por Koistinen y Marburger [15].

3.2. Cálculo mecánico

El mapa térmico transitorio, previamente resuelto, se emplea para calcular los efectos mecánicos generados por el proceso de temple por inducción en el componente.

La dureza del material depende de las fases microestructurales y de la composición química del material. Utilizando las ecuaciones presentadas por Maynier *et al.* (1977) [16], es posible calcular la dureza Vickers para cada fase. La ecuación (1) describe la dureza de la martensita en función de la composición química del material y la velocidad de enfriamiento calculada a 700°C . En el submodelo de durezas, es crucial definir las temperaturas críticas de inicio (AC_1) y fin (AC_3) de austenización, ya que estas delimitan las zonas de temple, transición y material base. En este trabajo, estas temperaturas se han fijado en 793°C y 810°C respectivamente.

$$HV_M = 127 + 949C + 27Si + 11Mn + 8Ni + 16Cr + 21 \log(V_r) \quad (1)$$

Para el cálculo de las tensiones residuales generadas en el temple por inducción, se utiliza el tensor de velocidad de deformación total, que se expresa mediante la ecuación (2) [17]. En esta ecuación ϵ_{ij}^{el} , ϵ_{ij}^{th} , ϵ_{ij}^{tr} , ϵ_{ij}^{pl} y ϵ_{ij}^{tp} representan la deformación elástica, la deformación térmica, la deformación de transformación, la deformación plástica convencional y la plasticidad inducida por la transformación (TRIP), respectivamente.

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}^{el} + \epsilon_{ij}^{th} + \epsilon_{ij}^{tr} + \epsilon_{ij}^{pl} + \epsilon_{ij}^{tp} \quad (2)$$

La deformación elástica se define mediante la relación constitutiva entre tensiones, siguiendo la ley de Hooke, que depende del módulo de Young y de la relación de Poisson del material. La deformación térmica está causada por la dilatación y contracción isotrópica del material debido al cambio de temperatura. Cada fase microestructural tiene un Coeficiente de Expansión

Térmica (CTE) diferente, el cual se evalúa mediante ensayos de dilatometría. Al producirse una transformación de fase, se genera un cambio volumétrico debido a la reestructuración atómica. El enfoque del CTE equivalente utilizado en este trabajo permite considerar la deformación de transformación junto con la deformación térmica. Por otro lado, para representar la deformación plástica convencional, se emplea un modelo de endurecimiento isotrópico bilineal. Finalmente, la plasticidad inducida por la transformación (TRIP) es una deformación plástica que se observa durante las transformaciones microestructurales bajo tensiones distintas de cero. La expresión generalizada para los estados de tensión multiaxial puede formularse en base al modelo de Greenwood-Johnson [18].

Este modelo de simulación multifísico ha sido implementado en la versión 2020R1 de ANSYS®, combinando el lenguaje de programación APDL con las subrutinas desarrolladas en el lenguaje Fortran (UPF).

3.3. Modelado del caso de estudio

El modelo numérico del diente de engrane es un modelo combinado. El análisis térmico es tridimensional y utiliza un total de 50000 elementos de primer orden, en el que se analizan dos dientes, como muestra la Figura 1 (dcha.). El proceso se considera secuencial, comenzando con el calentamiento en barrido a 3.5 mm/s y con una duración de 21s, seguidos del enfriamiento simultáneo de todo el diente mediante duchas estáticas durante 30s, hasta que la pieza se enfría por debajo de 100°C. Por otro lado, el análisis mecánico se realiza en un modelo bidimensional, utilizando 2000 elementos de segundo orden, y en este caso, se analiza únicamente un único diente con el fin de reducir las exigencias computacionales.

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los resultados presentados en este trabajo se dividen en dos categorías: resultados térmicos (temperaturas) y resultados mecánicos (dureza, capa de temple y tensiones residuales). Estos resultados se obtienen exclusivamente mediante cálculos numéricos y se presentan tanto a nivel global (mediante mapas de colores) como a nivel local (mediante evolución puntual).

4.1. Resultados térmicos

La Figura 3 muestra cuatro instantes representativos durante el proceso de calentamiento del engrane; en el primer instante, el centro del inductor está alineado con el borde de entrada del engranaje; en el segundo, el inductor está centrado en el engranaje; en el tercer instante, el centro del inductor se encuentra alineado con el borde de salida del engranaje; y finalmente, se muestra el instante final del proceso. Además, se ha realizado un corte en el pie para facilitar la visualización de los resultados. En esta Figura 3, se observa que en los

primeros instantes del proceso (4.5s), solo se calienta la base del engrane. A medida que avanza el barrido del inductor a lo largo del diente (13.5s), se puede apreciar cómo se supera la temperatura de austenización completa (810°C) en todo el flanco del diente.

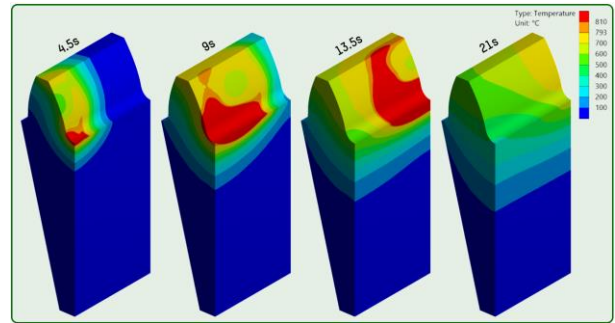


Figura 3. Temperaturas en varios instantes del proceso de calentamiento en el diente de engrane.

Además, en estos mismos resultados térmicos, se ha extraído la evolución térmica durante el proceso de calentamiento en 6 puntos de la geometría del engranaje, los cuales se distinguen en la Figura 4 (izq.). Los puntos azules se encuentran justo en el centro del valle, mientras que los puntos naranjas están ubicados en el centro del flanco. En cuanto a su ubicación concreta, los puntos centrales (2) están centrados en el diente, mientras que los puntos restantes (1 y 3) se encuentran 10 mm desplazados respecto al centro.

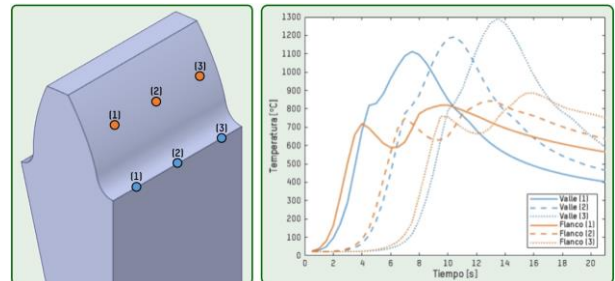


Figura 4. Ubicación de los puntos de análisis (izq.) y evolución térmica transitoria de estos (dcha.)

La Figura 4 (dcha.) muestra la evolución térmica en varias zonas del diente. Lo primero que se observa es que el valle del engrane alcanza, en cualquier caso, una temperatura máxima 300°C más alta que el flanco. Esto se debe a la geometría específica del inductor en relación con el diente. Mientras que el inductor es perfectamente recto en los costados, el flanco presenta una curvatura notable, lo que provoca que, en la zona cercana al pico del diente, el *gap* inductor-diente sea mayor que en otras zonas del flanco, siendo este *gap* considerablemente mayor que el que existe en el valle. De esta manera se concentra más el calor en la zona del valle, resultado en temperaturas más altas. Además, se puede observar el efecto mencionado previamente; en los instantes iniciales del proceso (punto 1) la temperatura máxima es inferior a la de los instantes finales (punto 3).

Por otro lado, en la temperatura del flanco, se aprecia el efecto que tiene el paso del inductor: en la zona central apenas se calienta, mientras que en sus dos extremos la temperatura es mucho mayor, dejando una zona interna sin alcanzar altas temperaturas. Este efecto también es evidente en la Figura 4 (dcha.), donde la temperatura de los puntos del flanco aumenta inicialmente, disminuye durante unos segundos y luego vuelve a aumentar hasta alcanzar su pico máximo.

4.2. Resultados mecánicos

En la Figura 5 se muestra la capa de temple generada, representada mediante la dureza y el mapa de tensión residual axial (en la dirección del barrido), considerando tres cortes del diente de engrane. Estos cortes se han definido en la misma zona que en los resultados térmicos, incluyendo un corte central del diente (2) y dos cortes desplazados 10mm respecto al centro del engrane (1 y 3).

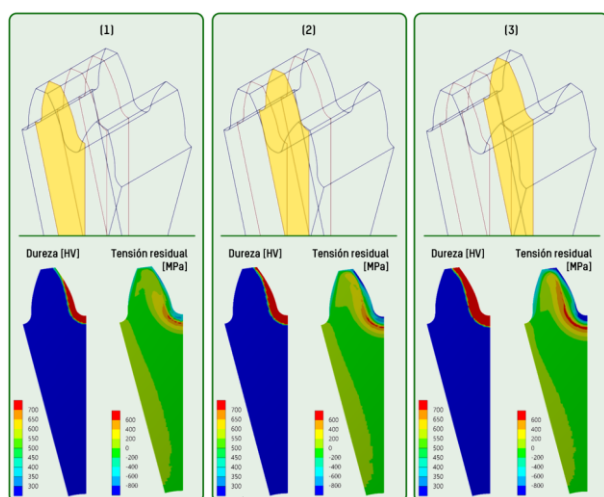


Figura 5. Dureza final y tensión residual axial en el plano central y en dos planos desplazados 10 mm

En la Figura 5 se observa que la capa de temple aumenta en profundidad a medida que avanza el proceso de barrido. En el primer corte, la punta del diente no alcanza a templarse por completo; sin embargo, en el corte final, la capa templada se vuelve homogénea en todo el contorno y alcanza una profundidad aproximada de 3 mm. Este comportamiento está directamente relacionado con las temperaturas alcanzadas durante el calentamiento. En los instantes iniciales del proceso (puntos 1 en la Figura 4), las temperaturas máximas son notablemente inferiores a las de los instantes finales (puntos 3). Se presume que este mismo efecto curre en el interior de la pieza, donde las temperaturas internas en las primeras etapas del barrido son más altas que en las etapas finales, lo que da lugar a una capa templada más profunda.

Con respecto a las tensiones residuales, se observa un patrón similar al de la dureza. En la parte inicial del barrido (1), las tensiones residuales axiales son más bajas, mientras que en los instantes finales del proceso

(3) alcanzan sus valores más altos. Además, los valores pico de tracción, en los tres cortes analizados, se encuentran inmediatamente después de la zona de transición, donde el material adquiere una dureza similar a la del material base.

Por otro lado, se ha analizado la tensión residual axial en profundidad en los mismos seis puntos donde previamente se estudió la temperatura, como se muestra en la Figura 6 (izq.). La Figura 6 (dcha.), por su parte, presenta la evolución de la tensión residual axial en profundidad de esos seis puntos.

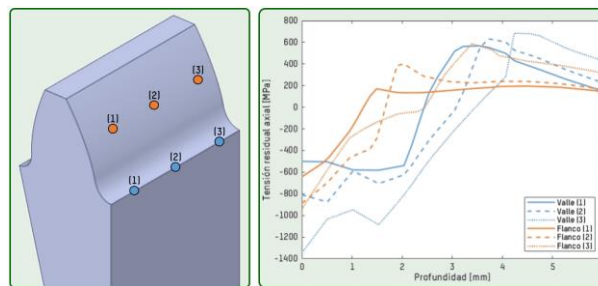


Figura 6. Ubicación de los puntos de análisis (izq.) y tensión residual axial en profundidad de estos (dcha.)

Al analizar la Figura 6, se observa que la tendencia en los 6 *paths* analizados es la esperada. En zona superficial y subsuperficial, se concentran los valores más altos de compresión; posteriormente ocurre una transición hacia valores de tracción; y finalmente, tras alcanzar el máximo valor tractivo, las tensiones se relajan progresivamente hacia el interior de la pieza.

Comparando los puntos del flanco entre sí y los puntos del valle entre sí, se aprecia una correlación directa con la capa templada observada en la Figura 5. En la transición de la capa templada es donde se produce el cambio de tensiones hacia valores de tracción, un comportamiento que se refleja en la Figura 6; se aprecia que esta zona de transición se desplaza aproximadamente 1 mm hacia el interior al avanzar del punto (1) al (2) y del (2) al (3). Asimismo, los valores más bajos de tensiones máximas de compresión y tracción ocurren en el punto (1), mientras que los más altos aparecen en el punto (3). Este fenómeno está directamente relacionado con el mapa térmico. En la Figura 4, se observa que los picos térmicos más bajos corresponden a los puntos (1) mientras que los más altos aparecen en los puntos (3). Como resultado, los gradientes térmicos son más reducidos en los puntos (1) y más pronunciados en los puntos (3), lo que resulta en valores de tensión axial residual más elevados en este último.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo se ha simulado el temple por inducción en barrido con el fin de predecir los efectos generados por el proceso en el acero 42CrMo4. El modelo se ha testado en un diente de engrane. Para ello, se ha empleado un

modelo numérico de elementos finitos acoplado electromagnético, térmico, microestructural y mecánico utilizando el software ANSYS® y las subrutinas de usuario. Con este estudio se han obtenido las siguientes conclusiones:

- El proceso de barrido tiene un efecto notable en la redistribución de las tensiones durante el calentamiento por inducción. Esto afecta considerablemente los resultados tensionales en profundidad en las diferentes zonas de la pieza.
- Las tensiones residuales se ven afectadas principalmente por el mapa térmico. En el caso del engranaje, en la parte final del proceso de barrido se encuentran las temperaturas pico más altas, generando gradientes térmicos más altos y todo ello resultando en tensión residuales axiales mayores.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen la financiación recibida por el programa BIKAINTEK 020-B2/2023 del Gobierno Vasco a través del programa de ayudas a la formación de Doctorados industriales 2023.

REFERENCIAS

- [1] D.W. Kim, H.H. Cho, W.B. Lee, K.T. Cho, Y.G. Cho, S.J. Kim, H.N. Han. *A finite element simulation for carburizing heat treatment of automotive gear ring incorporating transformation plasticity*. Materials & Design 99 (2016) 243-253.
- [2] J. Schijve. *Fatigue Structures and Materials*, 2nd edition. Springer (2009).
- [3] S. Park, D.W. Kim, J.H. Kim, S.Y. Lee, D. Kwon, H.N. Han. *A finite element simulation for induction heat treatment of automotive drive shaft*. ISIJ International 60 (2020) 1333-1341.
- [4] S. Shen, Q. Gao, H. Hu, Y. Xu, S. Sun. *The High Cycle Bending Fatigue Property of Quenched Crankshaft Based on the Stress Field Intensity Method and the Multi-physics Field Coupling Numerical Simulation Approach*. International Journal of Precision Engineering and Manufacturing (2024).
- [5] X. Shi, K. Wang, G. Li, C. Lyu, L. Zhao, J. Chen, L. Sun, H. Wu. *Study on Temperature Field Uniformity of Dynamic Induction Heating for Camshaft of Marine Diesel Engine*. Machines 12 (2024).
- [6] V. Javaheri, A. Pohjonen, J.I. Asperheim, D. Ivanov, D. Porter. *Physically based modeling, characterization and design of an induction hardening process for a new slurry pipeline steel*. Materials and Design 182 (2019).
- [7] M. Areitioaurtena, U. Segurajauregi, V. Akujarvi, M. Fisk, I. Urresti, E. Ukar. *A semi-analytical coupled simulation approach for induction heating*. Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences 8 (2021).
- [8] M. Areitioaurtena, U. Segurajauregi, M. Fisk, M.J. Cabello, E. Ukar. *Numerical and experimental investigation of residual stresses during the induction hardening of 42CrMo4 steel*. European Journal of Mechanics, A/Solids 96 (2022).
- [9] J. Montalvo-Urquiza, Q. Liu, A. Schmidt. *Simulation of quenching involved in induction hardening including mechanical effects*. Computational Materials Science 79 (2013) 639-649.
- [10] E.J. Pavlina, C.J. Van Tyne. *Correlation of yield strength and tensile strength with hardness for steels*. Journal of Materials Engineering and Performance 17 (2008) 888-893.
- [11] Z. Guo, N. Saunders, J.P. Schille. *Modelling phase transformations and material properties critical to simulation of heat treatment distortion in steels*. Proceedings of the 17th IFHTSE Congress 2 (2008) 753-756.
- [12] M. Fisk, L.E. Lindgren, W. Datchary, V. Deshmukh. *Modelling of induction hardening in low alloy steels*. Finite Elements in Analysis and Design 144 (2017) 61-75.
- [13] B. Liščić, T. Filetin. *Measurement of quenching intensity, calculation of heat transfer coefficient and global database of liquid quenchants*. Materials Engineering 19 (2012) 52-63.
- [14] J. Xia, H. Jin. *Numerical modeling of coupling thermal – metallurgical transformation phenomena of structural steel in the welding process*. Advances in Engineering Software 115 (2017) 66-74.
- [15] D. Koistinen, R. Marburger. *A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels*. Acta Metallurgica 7 (1959) 59-60.
- [16] P. Maynier, B. Jungmann, J. Dollet. *Creusot-loire system for the prediction of the mechanical properties of low alloy steel products*. Hardenability concepts with applications to steel (1977) 518-545.
- [17] S. Sjöström. *The Calculation of Residual Stress. Measurement of Residual and Applied Stress Using Neutron Diffraction*. 67.91 (1992).
- [18] J. Rohde, A. Jeppson. *Literature review of heat treatment simulations with respect to phase transformation, residual stresses and distortion*. Scandinavian Journal of Metallurgy 29 (2000) 47-62.

ALGORITMO DE ELEMENTOS FINITOS PARA PROBLEMAS ANTIPLANOS CON SUPERFICIES DE GURTIN-MURDOCH

M.A Herrera-Garrido^{1,2}, V. Mantič^{1*}, S.G. Mogilevskaya³

¹ Escuela Técnica Superior de Ingeniería, Universidad de Sevilla, Camino de los Descubrimientos s/n, 41092 Sevilla, España

² Escuela Politécnica Superior, Universidad de Sevilla, C\ Virgen de África 7, 41011 Sevilla, España

³ Department of Civil, Environmental, and Geo- Engineering, University of Minnesota, 500 Pillsbury Drive S.E., Minneapolis, MN, 55455, USA

*Persona de contacto: mantic@us.es

RESUMEN

Presentamos un algoritmo de elementos finitos diseñado para resolver problemas antiplanos en dominios elásticos con bordes cubiertos por capas delgadas (de grosor despreciable) y rígidas, modeladas según la teoría de superficies de Gurtin-Murdoch. Estas superficies pueden ser abiertas o cerradas, con geometrías suaves o irregulares. Las ecuaciones principales se derivan de la formulación variacional.

El algoritmo utiliza una discretización con elementos finitos triangulares y elementos lineales estándar para aproximar los desplazamientos. No obstante, para abordar el comportamiento singular cerca de los extremos de superficies abiertas, se desarrolló un elemento singular innovador que mejora significativamente la precisión en dichas regiones. Además, se incluyen ejemplos numéricos que demuestran la capacidad del método para ofrecer resultados confiables y precisos en diversos escenarios. Estos ejemplos destacan la efectividad del enfoque al capturar con precisión las singularidades y resolver problemas complejos en dominios elásticos con geometrías variadas.

PALABRAS CLAVE: Superficies Gurtin-Murdoch; Método de los Elementos Finitos; Elasticidad antiplana; Singularidad en tensiones;

ABSTRACT

We present a finite element algorithm designed to solve antiplane problems in elastic domains with boundaries coated by thin (negligible thickness) and stiff layers, modeled using the Gurtin-Murdoch surface theory. These surfaces can be open or closed, with smooth or non-smooth geometries. The governing equations are derived from a variational formulation. The algorithm employs a discretization using triangular finite elements and standard linear elements to approximate displacements. However, to address the singular behavior near the tips of open surfaces, an innovative singular element was developed, significantly improving accuracy in those regions. Additionally, numerical examples are included to demonstrate the method's ability to provide reliable and precise results in various scenarios. These examples highlight the approach's effectiveness in accurately capturing singularities and solving complex problems in elastic domains with diverse geometries.

KEYWORDS: Gurtin-Murdoch material surface; Finite Element Method; Antiplane elasticity; Stress singularities.

1. INTRODUCCIÓN

En este trabajo vamos a considerar el modelo antiplano para la modelización de estructuras compuestas con láminas de recubrimiento rígidas ultradelgadas. Estas láminas se modelan mediante materiales de tipo superficie sin grosor pero con su propia energía elástica. La teoría sobre este tipo de material fue desarrollada por Gurtin y Murdoch en 1970s [1, 2] pero no fue hasta el rápido avance en el uso de nanomateriales cuando esta teoría ha cobrado mayor interés. En estos problemas, las superficies de material juegan un papel crucial en la

transmisión de esfuerzos y pueden introducir singularidades que afectan el comportamiento mecánico global del sistema.

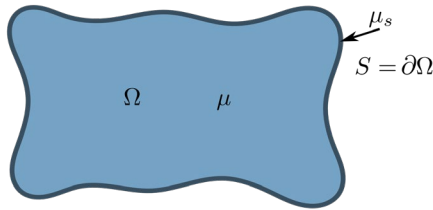
Este trabajo presenta el desarrollo de un algoritmo de elementos finitos (FEM) específicamente diseñado para abordar estos problemas de manera eficiente. Se basa en una formulación variacional que incorpora explícitamente los efectos de la superficie de material, permitiendo capturar su influencia en los desplazamientos y esfuerzos dentro del dominio elástico. Adicionalmente, se han diseñado elementos finitos especiales para abordar de manera efectiva las

singularidades que pueden aparecer en las puntas de superficies abiertas.

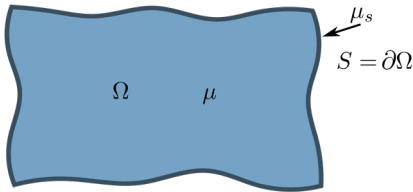
Dado que estos problemas han sido abordados en la literatura mediante métodos analíticos y numéricos, este trabajo busca validar la precisión y eficiencia del algoritmo FEM comparando sus resultados con soluciones de referencia. Se demuestra que la metodología desarrollada permite obtener resultados robustos y confiables, lo que la convierte en una herramienta útil para la simulación de materiales avanzados y nanodispositivos.

2. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

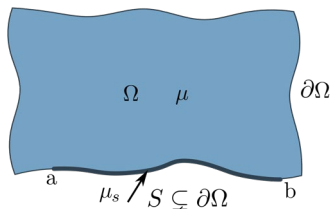
Se considera un problema de deformación antiplana en un dominio elástico isotrópico bidimensional (Ω), cuyo contorno ($\partial\Omega$) está parcial o completamente recubierto por una superficie de material de Gurtin-Murdoch (S), que se manifiesta mediante saltos en tensión a través de la superficie, [1, 2, 3]. La propiedad elástica del dominio viene dada por el módulo longitudinal tangencial μ y el parámetro elástico para la superficie Gurtin-Murdoch, el módulo superficial μ_s (N/m). Este parámetro, está conectado con el módulo longitudinal tangencial μ_L de la lámina mediante la relación $\mu_s = h_L \mu_L$, si μ_L y el grosor de la capa h_L están elegidos apropiadamente.



(a). Dominio Ω rodeado por una superficie material S suave.



(b). Dominio Ω rodeado por una superficie material S suave



(c). Dominio Ω parcialmente rodeado por una superficie material abierta S con extremos a y b

Figura 1. Bocetos de las geometrías del problema con la superficie material en el borde del dominio.

El modelo excluye tensiones residuales para garantizar la consistencia con la formulación antiplano [4]. Se

establecen condiciones de contorno de Dirichlet y Neumann sobre distintas partes de la frontera, permitiendo la presencia de superficies materiales abiertas o cerradas, incluyendo configuraciones con extremos y esquinas, ver Figura 1. Se busca desarrollar un algoritmo basado en el método de elementos finitos (FEM) capaz de capturar con precisión los efectos de la superficie material y las singularidades generadas en su geometría.

3. ECUACIONES DE GOBIERNO DEL PROBLEMA ANTIPLANO CON SUPERFICIES MATERIALES TIPO GURTIN-MURDOCH

El problema de elasticidad antiplano se modela mediante la ecuación de Laplace para el desplazamiento $u_z(x, y)$ en el dominio elástico Ω . Las únicas componentes de tensión no nulas son $\sigma_{xz}(x, y)$ y $\sigma_{yz}(x, y)$.

3.1. Formulación débil del problema de condición de frontera

Para obtener la formulación débil del problema de condición de frontera (BVP por sus siglas en inglés) considerado, primero se definirá la energía potencial para el problema antiplano con material tipo superficie Gurtin-Murdoch y luego se minimizará.

La energía potencial total del sistema en ausencia de fuerzas internas se define como

$$\Pi(u) = E_\Omega(u) + E_S(u) - W(u), \quad (1)$$

donde $E_\Omega(u)$ es la energía elástica en el dominio

$$E_\Omega(u) = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \mu u_{,i} u_{,i} d\Omega, \quad (2)$$

$E_S(u)$ es la energía elástica de la superficie material S

$$E_S(u) = \int_S \frac{1}{2} \mu_s u_{,s} u_{,s} ds, \quad (3)$$

y $W(u)$ es el trabajo externo

$$W(u) = \int_{\partial\Omega_N} u \bar{\tau} d\partial\Omega_N, \quad (4)$$

donde $\bar{\tau}(x, y)$ es la componente de tensión tangencial prescrita en el contorno tipo Neumann, $\partial\Omega_N$. Siguiendo esta nomenclatura, la condición de Dirichlet se prescribe en la parte del contorno $\partial\Omega_D$. En las expresiones anteriores, y en las que seguirán, se ha usado la convención de suma de Einstein, donde los índices repetidos implican suma sobre el rango relevante, y la coma significa diferenciación con respecto a la variable especificada. En este caso, $u_{,i}$ se refiere a las derivadas parciales $\partial u / \partial x$ o $\partial u / \partial y$, mientras que $u_{,s}$ representa la derivada parcial con respecto a la longitud de arco s .

Usando la derivada de Gateaux podemos obtener el punto estacionario de la energía potencial

$$\delta_v \Pi = \frac{d}{dt} \Pi(u + tv)|_{t=0} = 0, \quad (5)$$

Donde $v(x, y)$ es cualquier desplazamiento virtual admisible y nulo en $\partial\Omega_D$, donde el desplazamiento prescrito es $u = \bar{u}$. Sustituyendo (1) en (5) se obtiene la formulación débil del BVP

$$\int_{\Omega} \mu u_{,i} v_{,i} d\Omega + \int_S \mu_S u_{,s} v_{,s} ds = \int_{\partial\Omega_N} \bar{\tau} v ds, \quad \text{con} \\ u|_{\partial\Omega_D} = \bar{u}, \text{ and } \forall v, v|_{\partial\Omega_D} = 0, \quad (6)$$

3.2. Deducción de las ecuaciones de gobierno

Para deducir las ecuaciones de gobierno del BVP, hacemos integración por partes de cada expresión de la izquierda de (6). El primer término lleva a

$$\int_{\Omega} \mu u_{,i} v_{,i} d\Omega = \int_{\partial\Omega \setminus \partial\Omega_D} \mu u_{,n} v ds - \int_{\Omega} \mu (\Delta u) v d\Omega, \quad (7)$$

Siendo n el vector normal unitario en la dirección saliente a la parte correspondiente del contorno, i.e. $u_{,n} = u_{,i} n_i$.

En el caso de una superficie material Gurtin-Murdoch cerrada y suave, el segundo término es

$$\int_S \mu_S u_{,s} v_{,s} ds = \int_S \mu_S \left[(u_{,s} v)_{,s} - u_{,ss} v \right] ds = \\ - \int_{S \setminus \partial\Omega_D} \mu_S u_{,ss} ds. \quad (8)$$

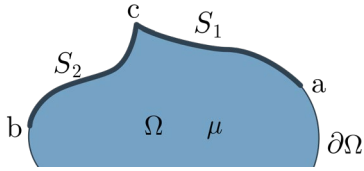


Figura 2. Superficie S no suave formada por dos superficies suaves S_1 y S_2

Para abordar el caso de las superficies materiales Gurtin-Murdoch abiertas y/o no suaves, por simplificar el análisis, pero sin perder la generalidad, consideramos una una superficie material abierta S formada por dos partes suaves S_1 y S_2 , ver Figura 2. De esta manera, S tiene dos extremos a y b , y la unión de las superficies S_1 y S_2 , es la esquina c . En este caso, la integral en el lado izquierdo de (8), puede ser dividida en dos integrales de la siguiente manera:

$$\int_{S_1} \mu_S u_{,s} v_{,s} ds = \mu_S (u_{,s_1} v)|_c - \mu_S (u_{,s_1} v)|_a - \\ \int_{S_1} \mu_S u_{,ss} v ds, \quad (9)$$

y

$$\int_{S_2} \mu_S u_{,s} v_{,s} ds = \mu_S (u_{,s_1} v)|_b - \mu_S (u_{,s_1} v)|_c - \\ \int_{S_2} \mu_S u_{,ss} v ds, \quad (10)$$

donde s_1 y s_2 son los parámetros de longitud de arco en S_1 y S_2 , respectivamente. Quedando de esta manera la formulación débil (6) como

$$\int_{\partial\Omega \setminus \partial\Omega_D} \mu u_{,n} v ds - \int_{\Omega} \mu (\Delta u) v d\Omega + \mu_S (u_{,s_2} v)|_b - \\ \mu_S (u_{,s_2} v)|_c + \mu_S (u_{,s_1} v)|_c - \mu_S (u_{,s_1} v)|_a - \\ \int_{\partial\Omega_N} \bar{\tau} v ds = 0 \quad \forall v, v|_{\partial\Omega_D} = 0. \quad (11)$$

En el caso de una superficie material cerrada o suave, los términos en (11) asociados a los extremos o a la esquina pueden ser suprimidos.

3.3. Sistema final de ecuaciones

Es fácil de demostrar que de esta formulación débil podemos obtener el sistema final de ecuaciones del BVP

$$\mu \Delta u_z = 0, \quad \text{en } \Omega, \quad (12)$$

$$u_z = \bar{u}_z, \quad \text{en } \partial\Omega_D, \quad (13)$$

$$\mu \frac{\partial u_z}{\partial n} = \bar{\tau}, \quad \text{en } \partial\Omega_N \setminus S, \quad (14)$$

$$\mu_S \frac{\partial^2 u_z}{\partial s^2} = \mu \frac{\partial u_z}{\partial n} - \bar{\tau}, \quad \text{en } S \cap \partial\Omega_N, \quad (15)$$

$$\mu_S \frac{\partial u_z}{\partial s} = 0, \quad \text{en los extremos de } S, \quad (16)$$

$$\mu_S \frac{\partial u_z}{\partial s_1} - \mu_S \frac{\partial u_z}{\partial s_2} = 0, \quad \text{en la esquina de } S. \quad (17)$$

La ecuación 15 suele tomar el nombre de condición de contorno no homogénea Ventzel [5].

La única componente relevante del tensor de tensiones de superficie es la tensión superficial σ^S que puede se expresada mediante los desplazamientos como

$$\sigma^S = \mu_S \frac{\partial u_z}{\partial s}, \quad \text{en } S, \quad (18)$$

lo que implica que las condiciones de esquina y extremos pueden ser reformuladas en términos de σ^S . En particular, σ^S se anula en los extremos de las superficies materiales abiertas y es continua en las esquinas.

4. APROXIMACIÓN FEM

4.1. Matriz de rigidez y vector de carga

Se discretiza el dominio Ω usando N_e elementos finitos triangulares Ω_n dando $\bar{\Omega} = \bigcup_{n=1}^{N_e} \bar{\Omega}_n$. La malla consiste en N nodos dados por los puntos (x_n, y_n) para $n = 1, \dots, N$, con funciones de forma asociadas $\psi_n(x, y)$. El tamaño de elemento finito será denotado como $h > 0$.

La solución $u(x, y)$ del BVP es aproximada mediante la siguiente combinación lineal de estas funciones de forma, llamada función de prueba

$$u(x, y) \approx u_h(x, y) = \sum_{n=1}^N u_n \psi_n(x, y) \quad \text{para } (x, y) \in \bar{\Omega} \quad (19)$$

Asumimos que las funciones de forma satisfacen la propiedad de Lagrange $\psi_n(x_m, y_n) = \delta_{mn}$, siendo δ_{mn} la función delta de Kronecker. De esta manera, los coeficientes de la combinación lineal corresponden con los valores nodales de los desplazamientos $u(x_n, y_n) \approx u_n$.

Para los nodos que se encuentren en el contorno Dirichlet, especificamos los valores nodales de los desplazamientos como:

$$u_n = \bar{u}(x_n, y_n) \text{ para } (x_n, y_n) \in \partial\Omega_D, \quad (20)$$

Definiendo un set de valores nodales conocidos para la aproximación de los desplazamientos.

Sustituyendo la aproximación de los desplazamientos $u_h(x, y)$ en la formulación débil en (6), eligiendo $v(x, y) = \psi_m(x, y)$ como la función de prueba, y aproximando la tensión tangencial prescrita $\bar{\tau}$ en $\partial\Omega_N$ mediante la misma función de forma como

$$\bar{\tau}(x, y) \approx \sum_{n=1}^N \bar{\tau}_n \psi_n(x, y), \quad (x, y) \in \partial\Omega_N, \quad (21)$$

podemos deducir el siguiente sistema lineal que determina los valores nodales de desplazamiento desconocidos

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N [\int_{\Omega} \mu \psi_{n,i} \psi_{m,i} d\Omega] u_n + \\ \sum_{n=1}^N [\int_S \mu_S \psi_{n,s} \psi_{m,s} ds] u_n = \sum_{n=1}^N \int_{\partial\Omega_N} [\psi_n \psi_m ds] \bar{\tau}_n, \end{aligned}$$

para $m, \dots, N$ con $(x_m, y_m) \notin \partial\Omega_D$, (22)

De la expresión (22) podemos definir la matriz de rigidez como

$$K_{mn} = \int_{\Omega} \mu \psi_{n,i} \psi_{m,i} d\Omega + \int_S \mu_S \psi_{n,s} \psi_{m,s} ds, \quad (23)$$

y el vector global de cargas como

$$F_m = \sum_{n=1}^N \int_{\partial\Omega_N} [\psi_n \psi_m ds] \bar{\tau}_n, \quad (24)$$

llegando al sistema final en notación matricial

$$\begin{aligned} K_{mn} u_n = F_m \quad \text{para } m = 1, \dots, N \\ \text{con } (x_m, y_m) \notin \partial\Omega_D \text{ y } u_n = \bar{u}(x_n, y_n) \\ \text{para } (x_n, y_n) \in \partial\Omega_D \end{aligned} \quad (25)$$

Resolviendo el sistema en (25), los valores de los desplazamientos en todos los nodos de la malla pueden ser determinados. Los valores de tensiones $\sigma_{iz}(x, y)$, con $i = x, y$, pueden ser obtenidos derivando elemento a elemento de la aproximación FEM del campo de desplazamientos obtenido. Generalmente, el campo de tensiones es discontinuo al obtenerlo elemento a elemento.

4.2. Implementación sin elemento singular

El modelo de elementos finito ha sido implementado en un código MATLAB basado en el procedimiento

desarrollado en [6], añadiendo funciones adicionales para tener en cuenta las contribuciones de las condiciones Gurtin-Murdoch a la matriz de rigidez, tal y como se describe en la formulación débil desarrollada en la Sección 3. En el caso más simple, en el que no se tienen en cuenta las singularidades en tensión, todo el dominio se discretiza usando mallas uniformes, o casi uniformes, de triángulos lineales. Para un elemento lineal, la continuación de la condición Gurtin-Murdoch, el último término en (23), es una submatriz 2×2 asociada con los nodos m y n localizados en la cara del elemento sujeto a esta condición, con la siguiente forma

$$K_{mn}^{GM} = \begin{bmatrix} \frac{1}{h} & -\frac{1}{h} \\ -\frac{1}{h} & \frac{1}{h} \end{bmatrix}, \quad (26)$$

donde h es la distancia entre los nodos m y n .

4.3. Formulación e implementación con elemento singular

Considerando el sistema de coordenadas polares (r, θ) con su origen en el extremo de la superficie material S , con r siendo la distancia a ese extremo. Del comportamiento asintótico de los campos cerca del extremo de S localizado en una parte suave del contorno de Neumann $\partial\Omega_N$, según se presenta en [4], los desplazamientos se comportan como $O(r^{1/2})$ en todas las direcciones radiales excepto en la dirección a lo largo de la superficie material S , donde son del orden $O(r^{1/3})$.

Para discretizar este comportamiento se usará un elemento finito híbrido cuadrático-lineal, ver Figura 3c. De esta manera por un lado aseguramos la compatibilidad con el resto de elementos lineales de la malla, y por otro se modela adecuadamente el comportamiento de los desplazamientos radiales dentro de Ω , usando el desplazamiento estándar del nodo central del elemento cuadrático a 1/4 de distancia del extremo de S . Sin embargo, esta estrategia genera una energía de deformación infinita en S debido a la singularidad $O(r^{-1/2})$ de las deformaciones, que provoca una singularidad no integrable $O(r^{-1})$ en la energía de deformación $E_s(u)$, ver (3).

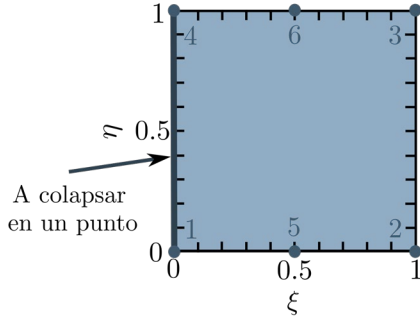
Para evitar este problema, proponemos un nuevo elemento cuadrático-lineal combinado 1/2-1/4 en la punta de S , con el borde cuadrático 1/2 ubicado en S y el borde cuadrático 1/4 ubicado dentro del dominio Ω . Los demás elementos singulares, sin borde en S , deben ser los estándar tipo 1/4 cuadrático-lineal.

4.3.1. Formulación del elemento singular

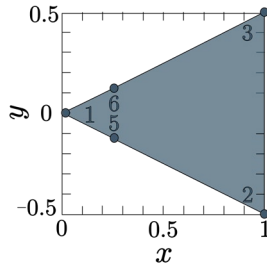
El elemento rectangular de la Figura 3a tiene comportamiento lineal en la dirección η y cuadrático en

la dirección ξ , correspondiendo a las funciones de forma típicas cuadrático lineales.

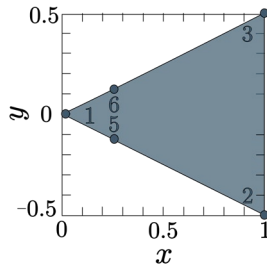
Como usamos elementos isoparamétricos, las funciones geométricas serán las mismas. El elemento triangular en el espacio físico (x, y) , Figuras 3b y c, se obtiene al



(a). Elemento cuadrado en espacio paramétrico



(b). Elemento colapsado cuadrático-lineal en el espacio físico con ambos nodos a un cuarto



(c). Elemento cuadrático-lineal híbrido en el espacio físico

Figura 3. Elementos en el espacio paramétrico y en el geométrico

colapsar todos los puntos en el lado $N_1 - N_4$ del elemento rectangular, en un punto definido por N_1 del elemento triangular. La función de desplazamientos de este nodo viene dada por

$$[N_1(x, y)]_{(x,y)\text{space}} = [N_1(\xi, \eta) + N_4(\xi, \eta)]_{(\xi,\eta)\text{space}} \quad (27)$$

4.3.2. Implementación del elemento singular

Para implementar el elemento singular, el proceso empieza por la parte izquierda de (6)

$$\mu \int_{\Omega_n} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \quad \frac{\partial v}{\partial y} \right) \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} \end{pmatrix} dx dy + \mu_s \int_S \frac{\partial u}{\partial s} \frac{\partial v}{\partial s} ds, \quad (28)$$

siendo ds el diferencial de longitud del elemento sobre la superficie material S . Usamos la matriz Jacobiana para definir el cambio de variables en el primer término de (28)

$$[J]_{2 \times 2} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix}, \quad (29)$$

y en el segundo término de (28)

$$[J]_{1 \times 1} = \left[\frac{\partial s}{\partial \xi} \right], \quad (30)$$

obteniendo la expresión final para la forma bilineal del elemento Ω_n

$$\mu \int_0^1 \int_0^1 \left(\frac{\partial v}{\partial x} \quad \frac{\partial v}{\partial y} \right) ([J]_{2 \times 2}^{-1})^T [J]_{2 \times 2}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} \end{pmatrix} |[J]_{2 \times 2}| d\xi d\eta + \chi_s \mu_s \int_0^1 \frac{\partial u}{\partial \xi} ([J]_{1 \times 1}^{-1})^T [J]_{1 \times 1}^{-1} \frac{\partial v}{\partial s} |[J]_{1 \times 1}| d\xi. \quad (31)$$

Si uno de los lados del elemento Ω_n está en S , entonces $\chi_s = 1$, en cualquier otro caso, $\chi_s = 0$.

Los campos de desplazamiento u y v pueden aproximarse empleando las funciones de forma típicas del elemento cuadrático, considerando $u_1 = u_4$ y $v_1 = v_4$,

$$u = \sum_{i=1}^6 N_i(\xi, \eta) u_i, \quad v = \sum_{i=1}^6 N_i(\xi, \eta) v_i. \quad (32)$$

La matriz de rigidez 5×5 del elemento singular entorno a la punta de la grieta, puede ser expresada como

$$(K_{ij})_{5 \times 5} = \mu \int_0^1 \int_0^1 [B] ([J]_{2 \times 2}^{-1})^T [J]_{2 \times 2}^{-1} [B]^T |[J]_{2 \times 2}| d\xi d\eta + \chi_s \mu_s \int_0^1 [N] [J]_{1 \times 1}^{-1} [N]^T d\xi \quad (33)$$

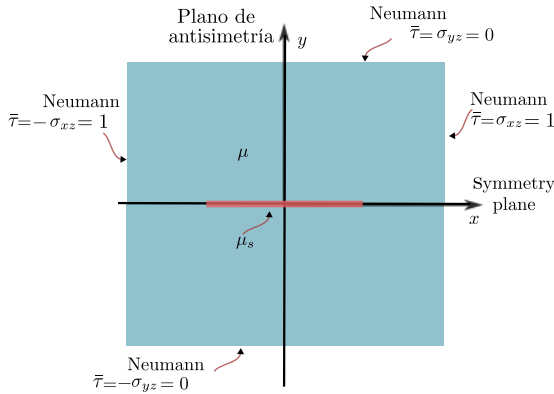
donde la matriz $[B]$ y el vector $[N]$ están definidos como

$$[B] = \begin{pmatrix} \frac{\partial(N_1+N_4)}{\partial \xi} & \frac{\partial(N_1+N_4)}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_2}{\partial \xi} & \frac{\partial N_2}{\partial \eta} \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\partial N_6}{\partial \xi} & \frac{\partial N_6}{\partial \eta} \end{pmatrix}, [N] = \begin{pmatrix} \frac{\partial(N_1+N_4)}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_2}{\partial \xi} \\ \vdots \\ \frac{\partial N_6}{\partial \xi} \end{pmatrix}. \quad (34)$$

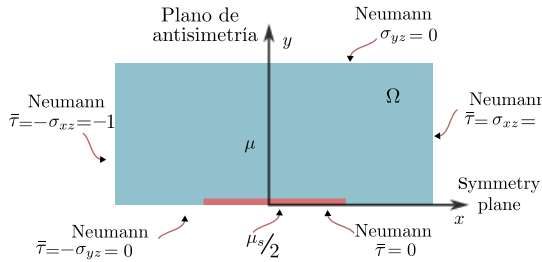
5. EJEMPLOS NUMÉRICOS

Para la verificación tanto de la formulación como del algoritmo, se han comparado los resultados numéricos obtenidos para con las diferentes opciones de geometría mostradas en Figura 1 con soluciones encontradas en la literatura, ver [7, 8]. Por brevedad, en este trabajo se

mostrará solo el caso más novedoso, en el que los resultados se ven mejorados al introducir el nuevo elemento singular híbrido. Este caso es el del dominio parcialmente rodeado por una superficie material abierta S , Figura 1c. En este caso elegimos la geometría mostrada en figura 5, de esta manera podemos comparar los resultados con los mostrados en [4], donde se estudia el problema antiplano de un dominio infinito que contiene una superficie material a lo largo de un segmento recto, y está sujeto a una carga uniforme en el infinito. La solución proporcionada en [4] es también numérica, no encontrando en la literatura ninguna solución analítica disponible. Aprovechando la simetría del problema, podemos simplificarlo considerando solo la mitad superior del modelo mostrado en la Figura 4a. De esta manera, la mitad de la superficie material embebida en el dominio pasa a ser parte del contorno del dominio, ver Figura 4b.



(a). BVP con la superficie material dentro del dominio



(b). BVP equivalente con el dominio parcialmente rodeado de una superficie material S resuelto mediante FEM

Figura 4. Geometría del BVP resuelto

La dificultad principal de este ejemplo radica en considerar las condiciones en los extremos, dadas por (16). En la sección 5.1 se presentarán los resultados obtenidos tanto con la incorporación del elemento singular híbrido como sin él. Y a su vez, estos resultados se compararán con los expuestos en [4], para evaluar la mejora que se logra en los resultados al introducir el elemento singular en la malla.

5.1. Comparación numérica de los resultados

En [4], se aplica la carga $\tilde{\sigma}_{xz}^{\infty} = 1, \tilde{\sigma}_{yz}^{\infty} = 0$. Como en FEM no es posible aplicar cargas en el infinito, asumimos

un dominio lo suficientemente grande y aplicamos las mismas cargas en el contorno. Los resultados se mostrarán de forma adimensional, introduciendo para ello los siguientes parámetros\

$$\gamma = \frac{\mu_l}{\mu_s}, \tilde{u}_z = \frac{u_z}{l}, \tilde{\sigma}_{xz} = \frac{\sigma_{xz}}{\mu}, \tilde{\sigma}_{yz} = \frac{\sigma_{yz}}{\mu}, \tilde{\sigma}^s = \frac{\sigma^s}{\mu l}, x_0 = \frac{x}{l} \quad (35)$$

La malla utilizada sigue el patrón de la mostrada en la Figura 5, con $N=16, 32, 64, 128$ y 256 , donde N es el numero de elementos finitos en los que se discretiza la superficie material S .

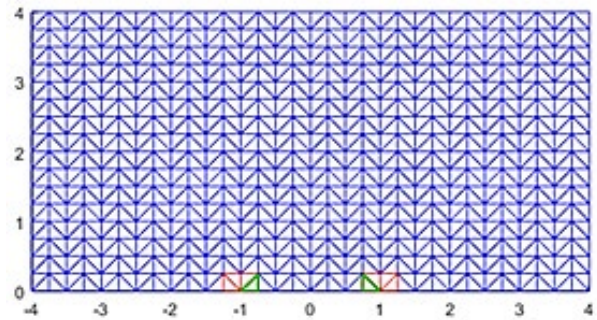


Figura 5. Tipo de malla con $N=8$ usada con elemento singular. Azul: elementos lineales, Rojo: elementos singulares cuadráticos-lineales, Verde: elemento singular híbrido

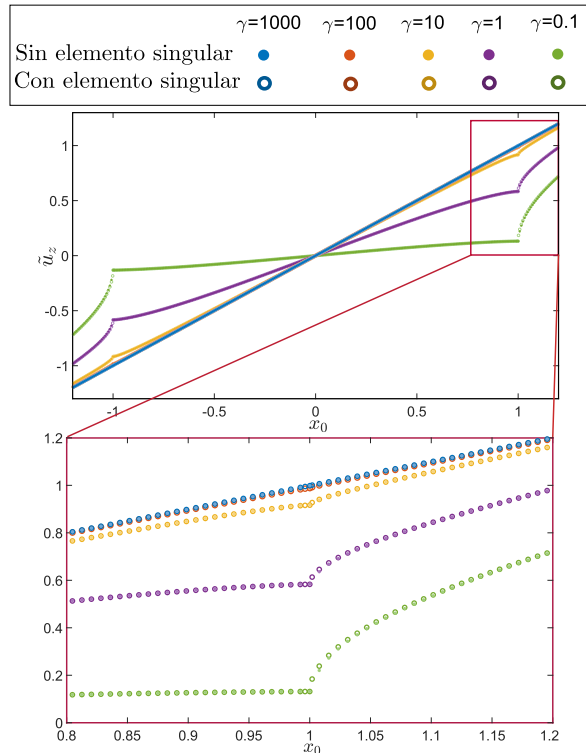
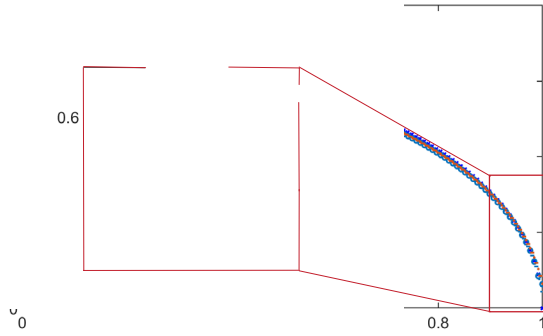
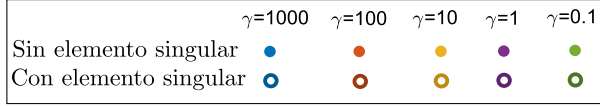
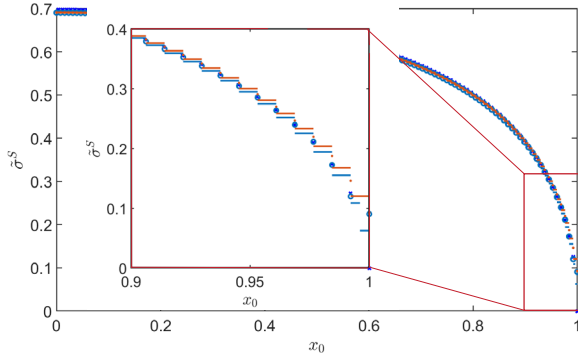


Figura 6. Comparación de $\tilde{u}_z$ a lo largo del eje x con y sin el uso de elementos singulares en los extremos de S . El área ampliada resalta la región de interés, donde se emplearon elementos singulares, mostrando diferencias significativas en el campo de desplazamiento normalizado.

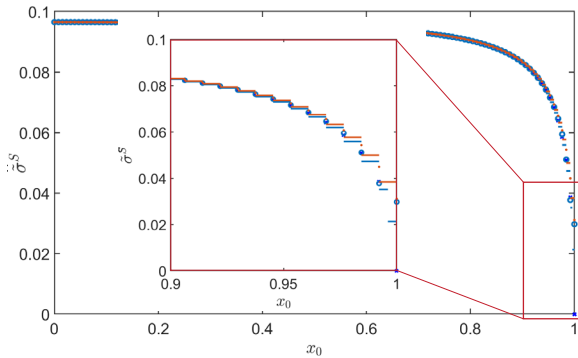
En la Figura 6, se muestran los valores de $\tilde{u}_z$ a lo largo del eje x , obtenidos mediante ambas simulaciones. Como se puede observar, los resultados lejos de los extremos son prácticamente los mismos en ambas simulaciones. Sin embargo, en las regiones cercanas a los extremos, se observan diferencias, sobre todo para valores pequeños de γ , tanto en los nodos de la superficie material como en los del dominio.



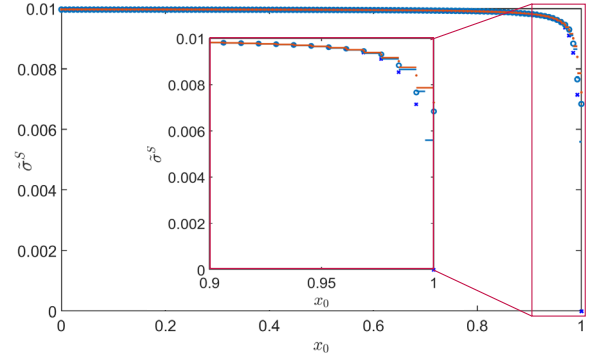
(a). $\gamma = 0.1$



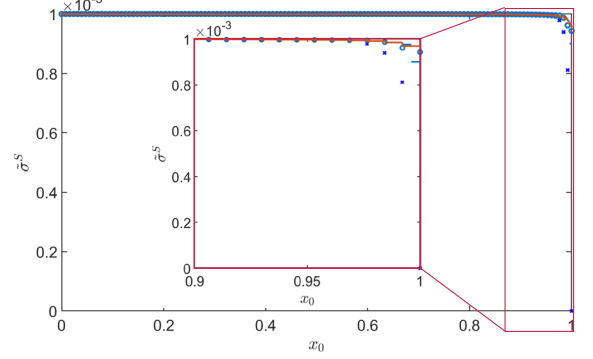
(b). $\gamma = 1$



(c). $\gamma = 10$



(d). $\gamma = 100$



(e). $\gamma = 1000$

Figura 7. Distribución de $\tilde{\sigma}^S$ obtenida con una malla de $N=256$ con elementos singulares en los extremos de S , comparada con la solución de [4] y con la solución sin elementos singulares para diferentes valores de γ

En la Figura 7, se muestran los valores de $\tilde{\sigma}^S$ a lo largo de la superficie material S , obtenidos tanto por ambas simulaciones como mediante la formulación presentada en [4]. Los valores de $\tilde{\sigma}_S$ se obtienen mediante dos métodos diferentes, el primero al que llamaremos *interpolación* obtiene los valores aplicando interpolación por *cubic spline* a los valores nodales de $\tilde{u}_z$ en S utilizando la función *fit()* de MATLAB y, posteriormente, sustituyendo la función resultante en (18). El segundo método se obtiene al derivar las funciones de forma de los elementos finitos, sustituir los desplazamientos nodales y aplicar μ_S para obtener los valores de $\tilde{\sigma}_S$ *element-wise*. Aunque los resultados fueron obtenidos para la mitad del dominio, tal y como se muestra en la Figura 4b, para claridad de los resultados, se muestra solo los resultados para un cuarto del rectángulo, debido a la simetría de $\tilde{\sigma}^S$ con respecto a $x = 0$. Para valores pequeños de γ , hay pequeñas diferencias en los resultados obtenidos mediante las simulaciones FEM y los obtenidos mediante la formulación presentada en [4] para valores cercanos a $x = 0$. En cambio, se puede observar que los resultados obtenidos en las simulaciones en las que se ha incluido el elemento singular se aproximan mejor a $\tilde{\sigma}^S = 0$ en los extremos, valor esperado teóricamente según el análisis asintótico desarrollado en [4]. Demostrando así la mejora introducida por el elemento singular híbrido desarrollado en este trabajo.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo, desarrollamos un nuevo procedimiento de elementos finitos para problemas antiplanos con superficies materiales de Gurtin-Murdoch. A diferencia de estudios previos, demostramos que nuestro algoritmo permite abordar superficies materiales abiertas y no suaves de formas generales. Para modelar el comportamiento singular de los campos elásticos en los extremos de estas superficies, introdujimos un elemento singular que mejora significativamente los resultados numéricos.

Nos centramos en casos donde la superficie material está en el borde del dominio, pero el algoritmo es generalizable a problemas de interfaz, lo que lo hace adecuado para modelar refuerzos dentro del dominio. Estos resultados podrían ser útiles en futuros estudios sobre refuerzos en forma de nanoplaquetas ultradelgadas y en la predicción del inicio de daño en las regiones singulares de los extremos de superficies abiertas.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece la financiación recibida del programa de investigación e innovación Horizon 2020 de la Unión Europea a través de la beca Marie Skłodowska-Curie, acuerdo No. 101086342 - DIAGONAL.



El trabajo del primer y tercer autor (MHG y VM) fue parcialmente financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación de España y el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (PID2021-123325OB-I00). El segundo autor (SM) agradece el apoyo de la National Science Foundation de Estados Unidos, a través del premio NSF CMMI-2112894.

Asimismo, agradecemos a la Dra. Svetlana Baranova por el código MATLAB proporcionado para las comparaciones.

REFERENCIAS

- [1] M. Murdoch y A. Gurtin, *A continuum theory of elastic material surfaces*, Arch. Ration. Mech. Anal., 57 (1975) 291-323.
- [2] M. Murdoch y A. Gurtin, *Surface stress in solids*, Int. J. Solids Struct, 14 (1978) pp. 431-440.
- [3] S. Mogilevskaya, A. Zemlyanova y V. Kushch, *Fiber- and particle-reinforced composite materials with the Gurtin-Murdoch and Steigmann-Ogden surface energy endowed interfaces*, Appl. Mech. Rev., 73 (2021) 050801.
- [4] S. Baranova, S. Mogilevskaya, V. Mantic y S. Jiménez-Alfaro, *Analysis of the antiplane problem with an embedded zero thickness layer described by the Gurtin-Murdoch model*, J. Elasticity, 140 (2020) 171-195.
- [5] A. Ventcel, *On boundary conditions for multi-dimensional diffusion processes*, Thero. Probab. Appl., 4 (1959) 164-177.
- [6] J. Albery, C. Carstensen y S. Funken, *Remarks around 50 lines of Matlab: short finite element implementation*, Numer. Algorithms, 20 (1999) 117-137.
- [7] M. Herrera-Garrido, S. Mogilevskaya y V. Mantic, *Simple finite element algorithm for solving antiplane problems with Gurtin-Murdoch material surfaces*, Finite Elements in Analysis & Design, 246 (2025) 104318.
- [8] M. Herrera-Garrido, S. Mogilevskaya y V. Mantic, *FEM analysis of antiplane problems with interacting stiff and ultrathin platelets*, de A Cross-Disciplinary Exploration of STEM: Selected works from the XI Workshop on R&D+I and the 3rd International Workshop on STEM at EPS, Springer, (2025)

SOBRE EL CONTROL DE CÁLCULOS NUMÉRICOS EN CASOS DE PROPAGACIÓN SIMULTÁNEA DE VARIAS GRIETAS EN MATERIALES CASI-FRÁGILES

J. Planas^{1*}, B. Sanz¹, J.M Sancho²,

¹Dep. de Ciencia de Materiales, E.T.S. de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos, Universidad Politécnica de Madrid, C/ Profesor Aranguren 3, 28040 Madrid, España.

²Departamento de Estructuras de Edificación, Universidad Politécnica de Madrid. E.T.S. de Arquitectura, Avda. Juan de Herrera 4, 28040 Madrid, España.

*Persona de contacto: jaime.planas@upm.es

RESUMEN

En los cálculos numéricos que estudian la propagación de grietas en materiales o estructuras casi-frágiles, se encuentran con cierta frecuencia casos en los que varias grietas crecen simultánea y establemente hasta que se produce un ablandamiento global rápido debido a que una de las grietas se hace bruscamente dominante o a que dos grietas se unen para formar otra con distinta cinemática, en cuyo caso puede producirse una inestabilidad en la que la estructura pasa de un estado de equilibrio a otro muy distinto sin que sea posible obtener estados de equilibrio intermedio con un sistema de control tradicional. El artículo presenta en primer los resultados de dos estudios recientes de ensayos numéricos de fisuración de vigas de un material casi-frágil de altas prestaciones sometidas a flexión pura que muestran una clara inestabilidad con el método de control de cálculo disponible hasta el momento. A continuación se propone un método basado en el control incremental de una función no negativa y lineal a trozos de un conjunto de proyecciones de desplazamientos relativos entre pares de puntos de la probeta (como si de transductores de desplazamientos se tratara) y se muestran las evidencias de su efectividad en el caso previamente expuesto.

PALABRAS CLAVE: Fractura casi-frágil, Fisura cohesiva, Método de los elementos finitos.

ABSTRACT

In numerical calculations targeting crack growth analysis in quasibrittle materials and structures, it is not an uncommon occurrence that various cracks grow simultaneously in a stable way until a fast global softening occurs because either one of the cracks becomes suddenly dominant or two or more cracks suddenly coalesce to form a full crack with different kinematics; in such cases an instability may occur in which the structure jumps from an equilibrium state to a very different one while no intermediate equilibrium states can be reached under the computational control at hand. The paper presents first relevant results of two recent studies on numerical testing of cracking of beams of a high-performance quasibrittle material subjected to pure bending which display a clear instability with the computational control available up to now. Then, a method is proposed based on the incremental control of a non-negative and piecewise-linear function of a set of projections of relative displacements between pairs of points of the specimen (as if we placed a set of displacement transducers attached to the specimen), and evidence of its effectivity is provided for the case previously presented.

KEYWORDS: Quasibrittle Fracture, Cohesive Crack, Finite Element Method.

1 INTRODUCCIÓN

El presente trabajo emana de un conjunto previo de trabajos de los autores que, globalmente, se caracterizan por estudiar numéricamente problemas de elementos estructurales o probetas de materiales casi-frágiles —hormigones y morteros, principalmente— en los que se propagan varias grietas simultáneamente [1–5].

El trabajo aborda el problema de cálculo que surge cuando, con el sistema de control de avance del cálculo utilizado, se producen transiciones súbitas de un estado de equilibrio en que una o varias grietas estaban creciendo simultáneamente bajo carga creciente a otro en el que la carga es menor y en el que se observa un cambio brusco en el tamaño o morfología de las grietas. Esto incluye, por ejemplo, los casos en que una de las grietas se hace

bruscamente dominante mientras las otras se cierran parcialmente, aquellos en que dos o más grietas se unen para formar una única grieta mucho más flexible y también otros en que una nueva grieta aparece bruscamente cuando el crecimiento de las preexistentes se ve ralentizado por la existencia de un obstáculo o un elemento de refuerzo.

Estos fenómenos de inestabilidad pueden observarse también experimentalmente cuando el método de control del ensayo no puede evitar el avance brusco de la rotura y pueden mejorarse usando servocontrol en una máquina de ensayos cuya respuesta sea suficientemente rápida. La elección de la magnitud que se controla es esencial en la estabilización del ensayo y lo mismo sucede con los cálculos.

En ensayos clásicos de fractura en los que se conoce la situación de la futura —y habitualmente única— grieta, es muy corriente utilizar como variable de control el CMOD o *Crack Mouth Opening Displacement* y esta técnica es la que se usaba hasta recientemente en el programa de elementos finitos que los autores desarrollaron para el estudio de la fractura casi-frágil.

Uno de los casos en los que el control a través de una única medida de desplazamientos se muestra insuficiente para efectuar el control estable del ensayo —numérico o experimental— surge cuando se pretende estudiar el efecto de tamaño sobre la fisuración múltiple en probetas de flexión en cuatro puntos con una gran luz de carga, hechas de un material material casi-frágil de altas prestaciones como el hormigón reforzado con fibras de ultra-altas prestaciones (UHPFRC por sus siglas en inglés). En estas probetas virtuales, las inestabilidades pueden producirse bien por localización brusca de la deformación en una fisura dominante o por la aparición secuencial e inestable de nuevas fisuras, y en ambos casos sería deseable disponer de un método de control que permitiera revelar los estados de equilibrio intermedios. En este artículo se presenta lo esencial del método desarrollado a estos efectos y los primeros resultados del mismo.

La estructura del artículo es la siguiente: en la Sección 2 se describen brevemente los aspectos más importante de investigaciones anteriores que justifican la implementación de un nuevo método de control, en la Sección 3 se describe lo fundamental de ese nuevo método y los resultados obtenidos; el artículo se cierra con unos comentarios finales contenidos en la sección 4.

2 ANTECEDENTES

Como ya se ha dicho, este estudio amplía el iniciado en [3] que pretende estudiar *in extenso* el efecto de tamaño en probetas sometidas a flexión pura, cuya geometría exacta se define más adelante, fabricadas con un material casi-frágil de altas prestaciones —del estilo de un hormigón reforzado con fibras y ultra altas prestaciones (UHPFRC por sus siglas en inglés).

Para la simulación numérica se adoptó la hipótesis de que la fisuración del material se puede describir con el modelo de fisura cohesiva introducido por Hillerborg [6], y se usa un tratamiento numérico basado en los elementos finitos con fisura embebida descritos en [7]. La ley tensión-separación en las caras de la fisura sigue el modelo generalizado descrito en [8], aunque, tratándose de un caso en que las grietas se propagan esencialmente en modo I, casi todos los modelos de fisura cohesiva discreta conducirían a idénticos resultados.

El material se considera inicialmente elástico lineal con un coeficiente de Poisson $\nu = 0.17$ y una curva de ablandamiento cohesivo bilineal como la esquematizada en la figura Fig. 1 caracterizada por los cuatro parámetros indicados en la figura, es decir f_t , w_1 , f_1 y w_c (donde f_t es la resistencia a tracción simple). Obviamente la curva adoptada debe considerarse una aproximación de otra más compleja como la sugerida por la línea de trazos.

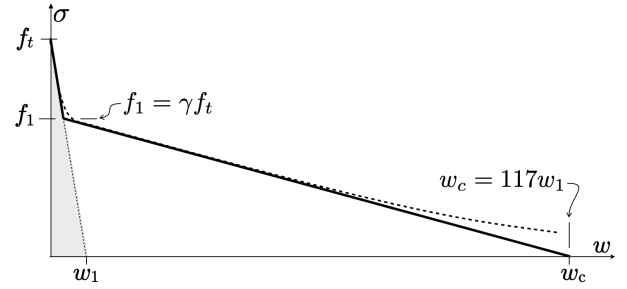


Figura 1. Curva bilineal considerada en este y anteriores trabajos (tomada de [3]).

Para tener en cuenta el efecto de cosido de las fibras, se consideró un valor de la separación crítica de grieta w_c muy superior al del hormigón ordinario, y, para reducir los grados de libertad del estudio, este se limitó a las curvas bilineales para las que $w_c = 117w_1$.

Nota Este valor no es completamente arbitrario; se obtiene al considerar el arrancamiento de un haz de fibras embebidas en un semiespacio rígido con fuerzas de rozamiento constantes y distribución uniforme de longitudes iniciales de arrancamiento; después de algunas simplificaciones se obtiene que el valor de w_c es $\approx l_f/4$ que para un conocido tipo industrial de UHPFRC es 3.5 mm; suponiendo, además un valor de $w_1 \approx 30 \mu\text{m}$ para la matriz, resulta $w_c/w_1 = 116.7$ que redondeamos a 117.

Como se estableció en [3], para probetas geoméricamente semejantes sujetas a carga proporcional, con una curva de ablandamiento dada, el efecto de tamaño está completamente caracterizado por la relación ℓ_2/D , donde

$$\ell_2 := \frac{Ew_1}{f_t}, \quad (1)$$

E es el módulo de elasticidad y D es una dimensión característica, en nuestro caso el canto de la viga.

La geometría de las probetas es la esquematizada en la figura 2, que recoge también las dos mallas utilizadas en los cálculos descritos en [3] y [5], generadas con el programa de código abierto GMSH [9] usando el algoritmo de Delaunay con posterior suavizado.

Los cálculos se han realizado utilizando elementos finitos de deformación constante con una fisura embebida según se describe en otros trabajos [7, 2, 8], implementados en el programa COFE (*Continuum Oriented Finite Elements*).

Todos los cálculos descritos en trabajos previos fueron realizados controlando el alargamiento ΔL de la fibra más traccionada del vano central de la viga de la figura 2, es decir, el desplazamiento horizontal relativo de los puntos señalados como A y B en la citada figura.

En [3] se realizaron cálculos para tres curvas de ablandamiento caracterizadas por la relación $\gamma := f_1/f_t$ y cuatro relaciones ℓ_2/D , en concreto para los valores $\gamma = 0.5, 0.6$ y 0.7 y $\ell_2/D = 1, 2, 4$ y 8 , y en [5] se ampliaron a $\gamma = 0.4$ y $\ell_2/D = 16$ con vistas a obtener inestabilidades más marcadas. De los más de 40 cálculos realizados para el estudio del efecto de tamaño, nos centramos en los que se muestran en la figura 3 por ser los más relevantes para el resto del artículo.

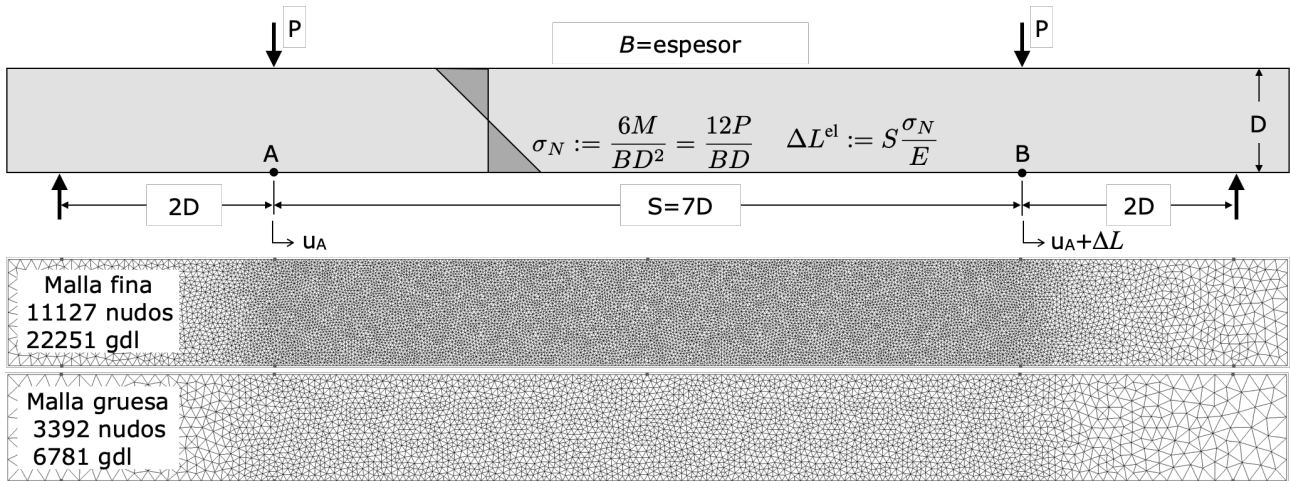


Figura 2. Geometría de las probetas y mallas utilizadas en los cálculos anteriores (adaptada de [3]).

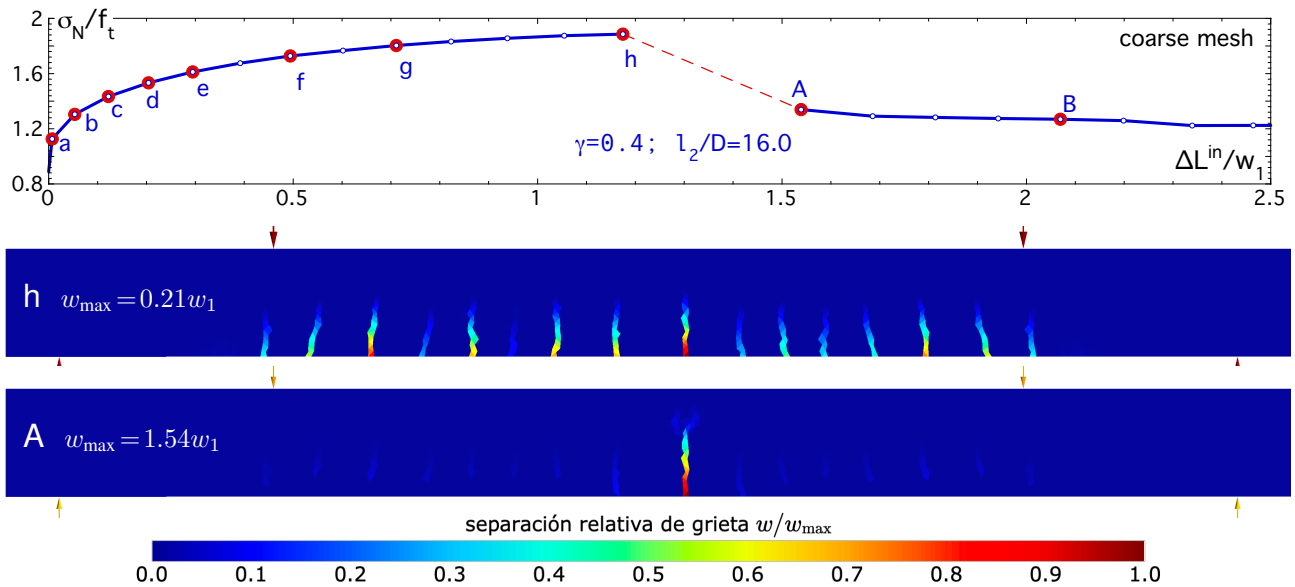


Figura 3. Salto en el patrón de fisuración al producirse la inestabilidad entre los puntos h y A, para la malla gruesa, $\gamma = 0.4$ y $\ell_2/D = 16.0$. El color rojo oscuro corresponde en los patrones de fisuración al máximo global de la separación de grieta $w_{\max}$, cuyo valor se indica en cada una de las imágenes.

La figura muestra en su parte superior un diagrama adimensional de la evolución de la tensión nominal σ_N definida en la figura 2 —una magnitud proporcional a la carga aplicada— frente al alargamiento inelástico de la base de medida $\Delta L^{\text{in}} := \Delta L - \Delta L^{\text{el}}$, donde la deformación elástica ΔL^{el} está definida también en la figura 2. El diagrama corresponde a un cálculo realizado con la malla más gruesa para el más frágil de los materiales ($\gamma = 0.4$) y una relación $\ell_2/D = 16$. Los discos rojos identificados con letras corresponden a imágenes que aparecen en [5] y se han mantenido para facilitar la comparación entre este y aquel artículo, aunque aquí sólo interesan los puntos h y A entre los que se sitúa la inestabilidad, señalada por la línea de puntos.

Las dos imágenes debajo del diagrama son los patrones de grietas antes y después de la inestabilidad, usando una escala de colores que representa la abertura de las grietas

de cada elemento finito, con el rojo oscuro que indica el valor máximo $w_{\max}$, cuyo valor se ha impreso a la izquierda de cada imagen. Como puede apreciarse, si, en la inestabilidad los saltos en σ_N y ΔL^{in} eran grandes, el salto en la abertura de la grieta dominante es enorme, ya que se multiplica por un factor de 7.7, y es imposible justificar *a priori* que el estado A es igual que el que se alcanzaría si el cálculo fuera estable. Por este motivo se ha buscado un nuevo método de control que permita mantener la estabilidad, es decir, obtener un número razonable de estados de equilibrio intermedios entre los correspondientes a los puntos h y A de la figura.

3 NUEVO SISTEMA DE CONTROL Y NUEVOS RESULTADOS

Para un experimentalista, el diagnóstico del problema es muy simple: la base de medida es demasiado grande.

Dicho problema se solventaría usando una base de medida más pequeña con tal de que la grieta dominante estuviera incluida en ella. El problema es que, en principio, la grieta dominante puede aparecer en cualquier punto de la zona central de momento flector constante ya que dicha posición depende de la malla y también del paso utilizado, aunque los valores medios (número de grietas, aberturas medias, profundidad media, carga, desplazamiento) sean muy parecidos [2, 3].

En consecuencia, se optó por la solución de “instrumentar” la malla con varias galgas extensométricas consecutivas a lo largo del vano central tal como se esquematiza en la figura 5.

Para ello se modificó en primer lugar el programa COFE para aceptar cualquier número de galgas para cualquier orientación. Cada galga se define por los dos nudos a los que se conecta y por el vector unitario $\mathbf{e}$ sobre el que se proyecta el desplazamiento relativo entre ambos. Si los nudos son, por ejemplo, los A y B de la figura 2, se tendría, para la lectura o valor medido por la galga

$$v := (\mathbf{u}_B - \mathbf{u}_A) \cdot \mathbf{e} . \quad (2)$$

La ventaja de usar v es que su expresión es lineal en los desplazamientos nodales, de manera que es también lineal en términos del vector global de grados de libertad $\mathbf{u}$ y se puede escribir como

$$v = \mathbf{m} \cdot \mathbf{u} \quad (3)$$

donde $\mathbf{m}$ sería el resultado de ensamblar las componentes del vector unitario $\mathbf{e}$ en un vector global; como $\mathbf{m}$ tiene un máximo de 4 componentes no nulas (en 2D, 6 en 3D), el producto escalar es rapidísimo si se almacena $\mathbf{m}$ como un vector poco denso.

Cuando se tienen n_g galgas, cada una de ellas se puede representar de la forma antedicha y escribir, para la galga i -ésima:

$$v_i = \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{u} . \quad (4)$$

La linealidad global implica también una linealidad incremental dentro de un paso:

$$\Delta v_i = \mathbf{m}_i \cdot \Delta \mathbf{u} , \quad \Delta \mathbf{u} := \mathbf{u} - \mathbf{u}_0 , \quad (5)$$

donde $\mathbf{u}_0$ es el vector de desplazamientos al principio del paso y $\mathbf{u}$ el vector de desplazamientos al inicio de la iteración en curso.

Una vez implementado el cálculo de los valores incrementales de las galgas, se estudió su evolución con el número de iteraciones en el paso que contenía la inestabilidad vista en la sección anterior cuando se controla con la galga G0 (figura 5). El resultado es el gráfico de la figura 4 en el que se observa que la evolución del incremento de las galgas G1–G5 siguen curvas suaves que terminan con una forma sigmoïdal en la que la G3, la central, aumenta mucho mientras las G1, G2, G4 y G5 se hacen negativas, de manera que la suma de los cinco valores es un valor constante igual al incremento de la galga G0, igual, a su vez, al valor incremental impuesto en ese paso (especificado por el usuario, de valor $\Delta v_0/w_1 = 0.025$).

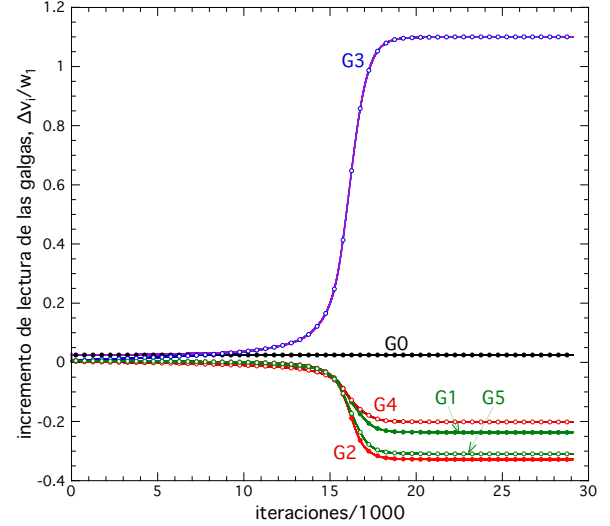


Figura 4. Evolución de la medida de las galgas con el número de iteraciones cuando el paso es inestable porque se controla con la galga G0.

En vista del comportamiento regular del proceso de convergencia (en lo que a las galgas se refiere) se propuso utilizar como variable de control incremental la suma de las partes positivas de los incrementos de las galgas 1 a 5, a la cual denominamos Δv^+ :

$$\Delta v^+ := \sum_{i=1}^5 \langle \Delta v_i \rangle^+ = \sum_{i=1}^5 \langle \mathbf{m}_i \cdot \Delta \mathbf{u} \rangle^+ . \quad (6)$$

La ecuación que debe cumplirse en el paso considerado es

$$\Delta v^+ = \Delta c \quad (7)$$

donde Δv^+ se calcula como se ha indicado a partir de los desplazamientos que tengamos en el momento considerado y Δc es el valor impuesto por el usuario para el paso considerado.

Esta ecuación debe cumplirse junto con las ecuaciones de equilibrio, para lo cual se sigue un procedimiento iterativo muy similar al que se usa en el método de la longitud de arco (*arc-length method*, véase, por ejemplo, el texto de Neto, Perić y Owen, sección 4.4 [10]).

El método se ha aplicado al caso descrito en la sección anterior y los resultados se han plasmado en la figura 6. Como puede apreciarse, la inestabilidad ha desaparecido y el salto brusco ha sido reemplazado por un arco h-i-j-k-l-m-n-o-p-A que presenta un fuerte retroceso en la variable que se representa en horizontal (que es la que se controlaba antes). Obviamente, cuando representamos la carga frente a la lectura de la galga G3, el proceso aparece como plenamente estable y sin retrocesos.

4 COMENTARIOS FINALES

De acuerdo con los resultados anteriores, y a falta de una experimentación numérica más extensa, podemos concluir que el método propuesto es efectivo, fácil de implementar y computacionalmente poco costoso, comparado con métodos alternativos de uso general.

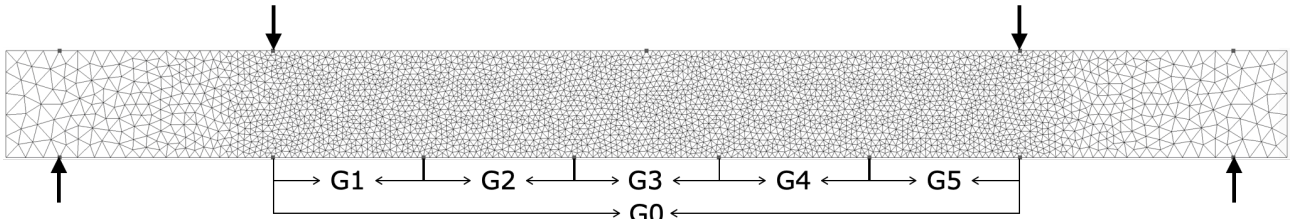


Figura 5. Malla con puntos de referencia para las nuevas medidas. Las “galgas” G0–G5 miden la proyección horizontal del movimiento relativo de sus puntos extremos y pueden usarse sólo para lectura o para control con una o más de ellas.

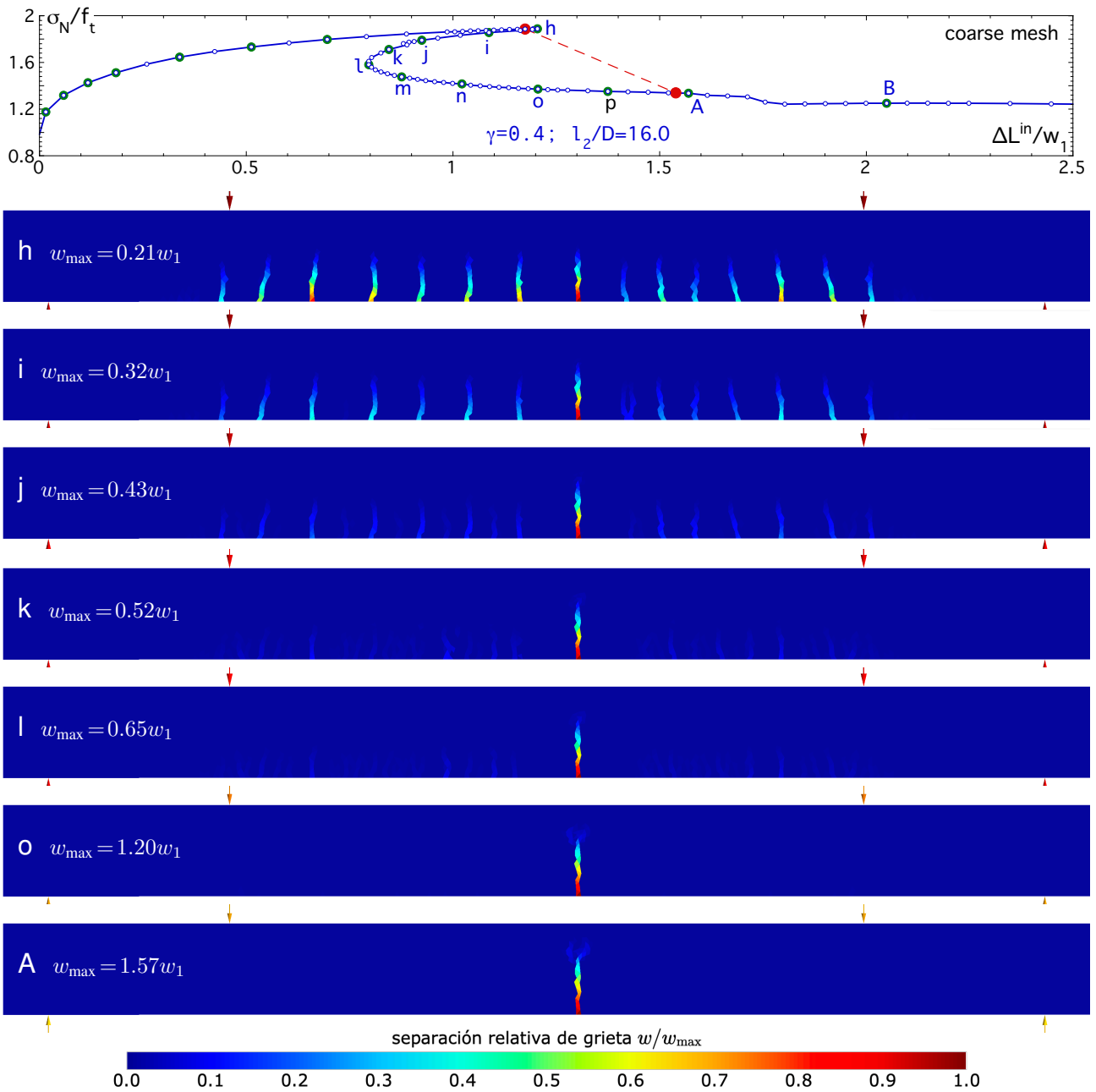


Figura 6. Curva $\sigma_N - \Delta L^{in}$ obtenida con el nuevo sistema de control y evolución del patrón de fisuración entre los puntos h y A (se han omitido los patrones en m, n y p porque en ellos no se observan cambios cualitativos apreciables).

Finalmente, un comentario para el futuro: cuando se observa con atención la evolución del patrón de grietas de la figura, se ve claramente que las fisuras situadas alrededor de la dominante se van cerrando progresivamente hasta llegar al punto l a partir del cual son ya inapreciables en comparación con la grieta dominante. Esto es debido a la adaptabilidad limitada de las fisuras, que se comportan como elásticas no lineales, pero reversibles, en tanto su abertura no supera un umbral αw_1 .

El factor de adaptación α se fija en general en un valor de 0.2, que, para un hormigón ordinario, es del orden de 6 a 10 μm . Este valor funciona muy bien para casos típicos de carga proporcional *sin* descargas en las cuales las pequeñas fisuras que se forman alrededor de las fisuras dominantes van desapareciendo a medida que las dominantes crecen y la tensión a su alrededor va disminuyendo. Este es el primer caso que hemos encontrado en que fisuras relativamente largas y en número importante sufren una descarga antes de alcanzar el umbral (nótese que en el punto h donde se inicia la descarga la abertura máxima absoluta supera sólo ligeramente el valor umbral y únicamente en la fisura dominante, por lo que todas las demás están todavía en fase reversible).

Como consecuencia, se ha iniciado una nueva investigación para determinar la influencia del factor de adaptabilidad en los resultados de las simulaciones de este tipo de ensayos.

AGRADECIMIENTOS

La publicación es parte del proyecto PID2021-125553NB-I00, financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033/FEDER, UE.

REFERENCIAS

- [1] B. Sanz, J. Planas, J. M. Sancho. An experimental and numerical study of the pattern of cracking of concrete due to steel reinforcement corrosion. *Engineering Fracture Mechanics* 114 (2013) 26–41.
- [2] J. Planas, B. Sanz, J. M. Sancho. Transition from smeared to localized cracking in macro-defect-free quasibrittle structures. *Procedia Structural Integrity* 2 (2016) 3676–3683.
- [3] J. Planas, B. Sanz, J. M. Sancho. Numerical analysis of size-effect in UHPFRC beams subjected to wide-span four-point bending. *Revista de Mecánica de la Fractura* 1 (2021) 149–154.
- [4] J. Planas, B. Sanz, L. Albajar, C. Zanuy. Síntesis de una investigación numérica sobre la fisuración longitudinal de traviesas pretensadas de ferrocarril. *Revista de Mecánica de la Fractura* 7 (2024) 71–76.
- [5] J. Planas, B. Sanz, J. M. Sancho. Numerical analysis of size-effect in UHPFRC beams in pure bending with focus on transition from single to multiple cracking. In *Proceedings of the 12th Conference on Fracture Mechanics for Concrete and Concrete Structures (FraMCoS XII)*. IAFraMCoS (2025 (to appear)).
- [6] A. Hillerborg, M. Modéer, P. E. Petersson. Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements. *Cement and Concrete Research* 6 (1976) 773–781.
- [7] J. M. Sancho, J. Planas, D. A. Cendon, E. Reyes, J. C. Galvez. An embedded crack model for finite element analysis of concrete fracture. *Engineering Fracture Mechanics* 74 (2007) 75–86.
- [8] J. Planas, B. Sanz, J. M. Sancho. Vectorial stress-separation laws for cohesive cracking: in concrete and other quasibrittle materials. *International Journal of Fracture* 223 (2020) 77–92.
- [9] C. Geuzaine, J.-F. Remacle. Gmsh: A 3-d finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 79 (2009) 1309–1331.
- [10] E. de Souza Neto, D. Perić, D. Owen. *Computational Methods for Plasticity*. Wiley (2008).

FATIGA E INTERACCIÓN CON EL MEDIO AMBIENTE

ENSAYOS DE FATIGA EN SOLDADURAS CIRCUNFERENCIALES DE UNA TUBERÍA HFI X60 EMPLEADA PARA GASODUCTOS DE TRANSPORTE

I. Montero^{1*}, M. Carboneras², J.C. Suárez²

¹ Enagás Transporte SA.U. Dirección General de Infraestructuras. Gerencia de Equipos y Materiales
Paseo de los Olmos, 19. 28005 Madrid. España

* Persona de contacto: imontero@enagas.es

² Centro de Investigación en Materiales Estructurales (CIME). ETSI Navales, Universidad Politécnica de Madrid.
Avenida de la Memoria, 4. 28040 Madrid. España

RESUMEN

El presente trabajo tiene como objetivo la evaluación del comportamiento a fatiga de una soldadura de construcción (girth weld) de un gasoducto, tanto en la propia soldadura como en zona afectada térmicamente (heat affected zone, HAZ) y en metal base, de un gasoducto existente de transporte de gas natural susceptible de ser reconvertido a transporte de hidrógeno. El estudio experimental se ha llevado a cabo con probetas de tubería de acero API 5L PSL2 grado X60, soldada sin material de aporte mediante inducción de alta frecuencia (HFI), procedentes directamente de la Red de Transporte de Gas de Enagás. Se han mecanizado probetas normalizadas tipo compacto (CT) con curvatura, extraídas de la zona de la girth weld, realizada en campo mediante soldadura con electrodo celulósico. La tipología de probeta extraída y mecanizada permite considerar el efecto de la curvatura en la medida de la tenacidad a la fractura. Los ensayos de propagación de grietas por fatiga se han realizado con equipamiento de nuevo desarrollo, que dispone de un utillaje para introducción de carga, específicamente diseñado y construido para ensayar hasta cinco probetas simultáneamente sometidas a tensión equivalente a la presión de diseño del gasoducto. En cada una de las probetas se han instalado extensómetros en la boca de la entalla para poder determinar el CMOD (*Crack Mouth Opening Displacement*) a lo largo del ensayo. El pre-agrietamiento inicial por fatiga a partir de la entalla inicial mecanizada y el análisis post-ensayo hacen posible la determinación de los mecanismos de progresión de la grieta por fatiga, para su ulterior comparación con el mismo acero fragilizado con hidrógeno. Los ensayos realizados han permitido determinar la velocidad de propagación de grieta (da/dN) en función de la variación del factor de intensidad de tensiones (ΔK), desarrollando un estudio comparativo, bajo las mismas condiciones de ensayo, del comportamiento a fatiga entre las distintas zonas: cordón de soldadura, HAZ y metal base. El estudio realizado para esta tipología de material representativa de la Red de Transporte de Gas, junto con el de otros en curso, permitirá también determinar las curvas maestras de crecimiento de grietas por fatiga y evaluar de manera específica la viabilidad de reconversión de infraestructuras existentes de gas natural a servicio hidrógeno.

PALABRAS CLAVE: Fatiga, Crecimiento de grieta, FCGR, Soldaduras circunferenciales, Gasoducto, X60, HFI

ABSTRACT

The aim of this work is to evaluate the fatigue behaviour of a gas pipeline girth weld, both in the weld itself and in the heat affected zone (HAZ) and in the base metal, of an existing natural gas pipeline that is susceptible to being converted to hydrogen transport. The experimental study has been carried out with API 5L PSL2 grade X60 steel pipe test pieces, welded without filler material by high frequency induction (HFI), directly from the Enagás' Gas Transmission Network. Standard compact type (CT) test pieces with curvature have been machined, extracted from the girth weld area, carried out in the field by welding with a cellulosic electrode. The type of test piece extracted and machined allows considering the effect of curvature on the fracture toughness measurement. Fatigue crack propagation tests have been carried out using newly developed equipment, which has a specifically designed tool for applying the load and built to test up to five test pieces simultaneously subjected to a stress equivalent to the design pressure of the gas pipeline. Extensometers were installed in each of the test pieces at the mouth of the notch, in order to determine the CMOD (*Crack Mouth Opening Displacement*) throughout the test. The initial pre-cracking due to fatigue from the initial machined notch and the post-test analysis make it possible to determine the mechanisms of progression of the fatigue crack, for later comparison with the same hydrogen embrittled steel. The tests carried out have made it possible to determine the crack propagation speed (da/dN) as a function of the variation of the stress intensity factor (ΔK), developing a comparative study, under the same test conditions, of the fatigue behaviour between the different zones: weld bead, HAZ and base metal. The study carried out for this type of material representative of the Gas Transmission Network, together with other studies in progress, will also allow determining the master curves of fatigue crack growth and specifically assessing the feasibility of converting existing natural gas infrastructure to hydrogen service.

KEYWORDS: Fatigue, Crack growth, FCGR, Girth welds, Gas pipeline, X60, HFI

1. INTRODUCCIÓN

La transición hacia una economía descarbonizada implica reducir las emisiones en todos los sectores y reemplazar los combustibles fósiles por energías limpias. La UE identifica al hidrógeno renovable como clave para la neutralidad climática y la seguridad energética. Iniciativas como la Estrategia Europea del Hidrógeno y el Plan *REPowerEU* promueven el desarrollo de infraestructuras y la producción de hidrógeno renovable.

El Gobierno de España ha trasladado el marco de política energética europea al ámbito nacional. Mediante Real Decreto-ley 8/2023, de 27 de diciembre, se contempla que Enagás, en calidad de gestor de la red de transporte de gas natural, podrá operar como gestor provisional de la red troncal de hidrógeno y, además, presentar una propuesta de desarrollo de la infraestructura troncal de hidrógeno y actuar como representante en la Red Europea de Gestores de Redes de Hidrógeno (*European Network of Network Operators for Hydrogen*). Asimismo, mediante dicho Real-Decreto-ley, podrá ejercer las funciones de desarrollo de la red troncal de hidrógeno en el ámbito de los proyectos de interés común europeo.

Es por ello que Enagás presentó a la UE a una propuesta de Red, que ha sido aprobada y dotada de fondos en la primera lista de Proyectos de Interés común (PCI). La propuesta de infraestructura de transporte, mostrada en la Figura 1, está formada por:

- Proyecto *H2MED*, para atender a las necesidades de hidrógeno europeas. Lo conforman el proyecto *CelZa* (interconexión Portugal-España) de 250 km, y el proyecto *BarMar* (gasoducto submarino desde Barcelona a Marsella) de 450 km.
- Primeros ejes de la *Infraestructura Troncal de Hidrógeno española*, de unos 2600 km, de los que potencialmente 600 km de ellos serían reconvertibles de servicio gas natural.

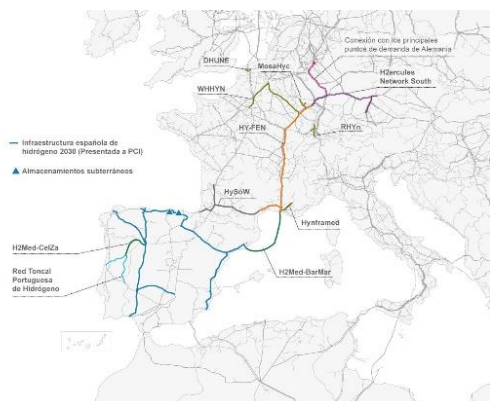


Figura 1. Proyectos incluidos en la primera lista de PCI/PMI y otros proyectos.

Además de construir nuevas infraestructuras, se requiere reconvertir otras existentes actualmente dedicadas al transporte de gas natural, para lo cual debe hacerse un

análisis detallado de las mismas que permitan garantizar la viabilidad técnica de la reconversión.

La actual configuración de la Red de Transporte de Gas Natural española puede considerarse como mallada y, por ello, no está sometida a grandes oscilaciones de presión. Pero la potencial reconversión de parte de los gasoductos por hidrógeno implicará romper con esa configuración y dejarlos expuestos a unas condiciones de operación mucho más severas, donde se producirán significativas variaciones de presión, sometiendo a los gasoductos a tensiones cíclicas, lo cual les expone aún más a fatiga y a la generación de daños en el gasoducto. Normalmente, estos daños comienzan en discontinuidades del material, como entallas o poros, y avanzan debido a las tensiones cíclicas hasta alcanzar el punto en que no se puede soportar la tensión y se genera la rotura por fatiga.

No solo la propia tubería, sino particularmente las soldaduras para unión en campo entre tubos (*girth welds*) son zonas de concentración de tensiones, todavía más propicias para experimentar un fenómeno de propagación de grietas por fatiga (FCG).

Por estos motivos, paralelamente al estudio de comportamiento de materiales de gasoductos expuestos a hidrógeno, se hace necesario evaluar su aptitud en caso de que sean sometidos a un mayor número de ciclos de presión. Los resultados de este estudio permitirán su comparación con los realizados para el mismo material en atmósfera de hidrógeno. Así, los resultados experimentales que se obtengan proporcionarán información de gran relevancia para completar la evaluación de la infraestructura, aplicando criterios de mecánica de la fractura, en línea con lo que se establecerá en la futura Adenda 1 de la norma EN 1594 (EN 1594:2024+A1:2025) [3].

Para el desarrollo de estos estudios se ha establecido un completo programa de I+D, entre la Universidad Politécnica de Madrid (Centro de Investigación en Materiales Estructurales, CIME) y Enagás. Es también objeto de estos estudios validar la aptitud del sistema desarrollado.

2. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

Para la realización de estos ensayos se ha utilizado el equipamiento desarrollado conjuntamente por CIME-Enagás para los estudios de comportamiento a fatiga en servicio hidrógeno. Dicho equipamiento fue diseñado y construido siguiendo la metodología llevada a cabo por el *National Institute of Standards and Technology* (NIST), el cual permite la realización de ensayos a fatiga en condiciones representativas de la operación real de estas infraestructuras (presión y tensión), tanto para gas natural como para hidrógeno 100%.

El sistema permite albergar hasta 5 probetas no aplanadas de dimensiones normalizadas según ASTM E647 [4], además de una célula de carga interior (con objeto de evitar el efecto del rozamiento en el vástago de introducción de carga en la medición) y los extensómetros situados en la boca de la entalla de cada probeta para medir el CMOD (*crack mouth opening displacement*). Si bien la normativa de referencia contempla la realización de 3 ensayos, la posibilidad de ensayar 5 probetas simultáneamente en las mismas condiciones (tensión, presión y porcentaje de hidrógeno), permite obtener resultados estadísticos más fiables y representativos y en un menor periodo de tiempo.

Los gasoductos de transporte están contruados en acero al carbono, de acuerdo con el estándar API 5L/ISO 3183 [1,2], en diferentes grados. Las características del material estudiado se recogen en la Tabla 1, tratándose de un acero API 5L PSL2 grado X60 (o L415), con soldadura por inducción de alta frecuencia (HFI), de uso muy extendido ya en los primeros gasoductos contruados en España.

Tabla 1. Características del material objeto de estudio.

Proceso fabricación	Acero API 5L PSL 2	NPS (in.)	Espesor (mm)	Material aporte soldadura
SAW-L	X60	20	9,53	6010 + 8010

Un elemento diferenciador de estos ensayos con respecto a lo indicado en las normas es que las probetas tipo CT no son aplanadas, sino que mantienen la curvatura de la tubería, lo que permite lograr una mayor reproducibilidad de las condiciones reales de servicio, al no inducir en ellas deformaciones ni alterar sus propiedades mecánicas. Esta tipología de probeta permite considerar el efecto de la curvatura en la medida de la tenacidad a fractura, efecto que ha sido ya objeto de diversos estudios [5,6], evidenciando la problemática de emplear probetas aplanadas. Ello se ha tenido en cuenta en el diseño del utillaje, como se muestra en la Figura 2, donde se observa la descomposición de fuerzas y momentos aplicados sobre la probeta.

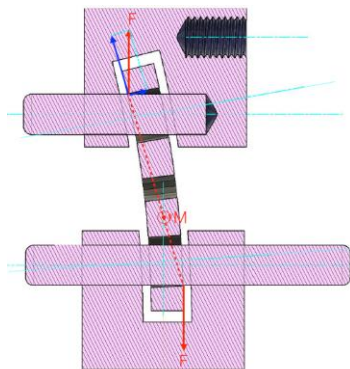


Figura 2. Cargas aplicadas sobre la probeta curva.

Otra particularidad del utillaje es que para su diseño se ha considerado que debe permitir someter a las probetas a tensiones equivalentes a la presión de servicio del

gasoducto (la Red actual se diseñó para una MAOP de, en unos casos 72 barg y, en los más recientes, 80 barg). La Figura 3 muestra el montaje de las probetas con sus extensómetros en base a un diseño que garantiza que, en caso de rotura de alguna de las probetas, la carga se puentea sin afectar a las demás, pudiendo continuar con el ensayo de fatiga.

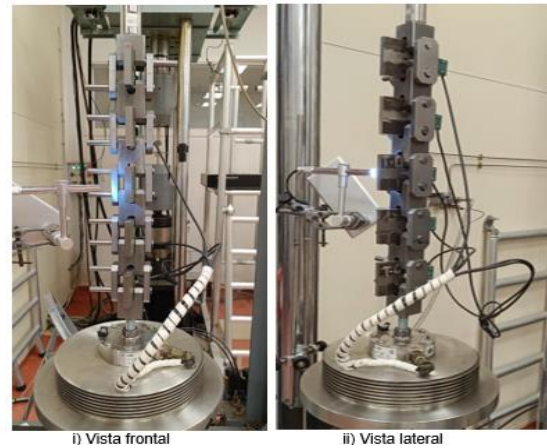


Figura 3. Utillaje en la máquina de ensayo, con los extensómetros colocados en las probetas.

El conjunto se integra en una máquina de ensayos mecánicos que permite realizar los ensayos de fatiga a bajas frecuencias. En este caso, los ensayos son desarrollados en aire, pero el equipo tiene la posibilidad de efectuarlos en atmósfera de hidrógeno a presión.

Las probetas antes de ser sometidas al ensayo de fatiga son pre-agrietadas, como se observa en la Figura 4.



Figura 4. Probeta CT sin y con pre-grieta.

Debido a la necesidad de controlar la longitud de la grieta tanto en la fase de pre-agrietamiento como durante el ensayo de fatiga, se emplea un microscopio digital.

El equipo se complementa con diversos elementos de control y operación (panel de reguladores, válvulas de alivio de sobrepresión, instrumentación, etc.), así como de seguridad (detectores de gas, campana de extracción), para garantizar que la realización de los ensayos es precisa y segura.

Los datos experimentales obtenidos son tratados mediante un software desarrollado por el CIME para el proyecto de investigación. El tratamiento de dichos resultados permite determinar la velocidad de propagación de grieta (da/dN) en función de la variación del factor de intensidad de tensiones (ΔK).

3. RESULTADOS

3.1. Metalografía

El estudio metalográfico del metal base (Figura 5) permite observar una microestructura ferrítico-perlítica, donde la ferrita (α) es la fase de color más claro y la perlita ($\alpha + \text{Fe}_3\text{C}$) es el constituyente de color más oscuro.

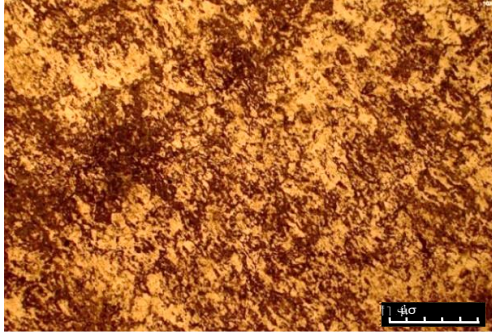


Figura 5. Micrografía del metal base.

Además, el análisis metalográfico del material muestra tres zonas bien diferenciadas, debido a las temperaturas alcanzadas en el proceso de soldadura. En la Figura 6, de izquierda a derecha, se observa el cordón de soldadura, la zona afectada térmicamente y el material base.

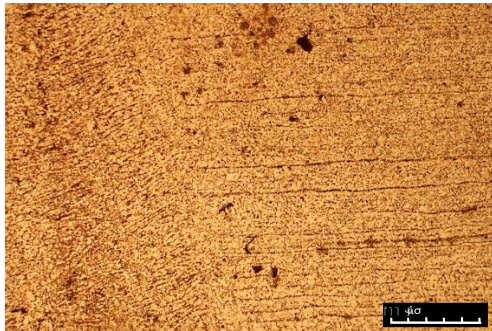


Figura 6. Micrografía de las tres zonas en torno a la soldadura del acero.

La zona del material base muestra una microestructura uniforme y alineada debido a la laminación del acero. La perlita ($\alpha + \text{Fe}_3\text{C}$) aparece en forma de bandas oscuras, distribuidas de manera más uniforme y paralela por el proceso de laminación. La zona afectada por el calor es una región sometida a temperaturas elevadas que provocan la recrystalización y refinación del grano, por lo que los granos son más pequeños y uniformes que los observados en el material base debido al ciclo térmico de calentamiento y enfriamiento rápido. La microestructura del cordón de soldadura muestra características típicas de un metal fundido y solidificado, indicando un calentamiento intenso y localizado seguido de un enfriamiento rápido. No se observan agujas de martensita, lo que sugiere que el procedimiento de soldadura ha sido correcto y no hay zonas frágiles. La microestructura está formada por perlita fina y algunas agujas de bainita, lo cual permitiría mejorar la resistencia a la fatiga debido a la dureza de estas fases.

3.2. Pre-agrietamiento de las probetas

Dado que en la fase de pre-agrietamiento la probeta ha experimentado también el efecto de la fatiga, los ciclos a los que ha sido sometida deben ser considerados, pues son acumulativos. En la Tabla 2 se presenta el número de ciclos de pre-agrietamiento correspondiente a cada una de las cinco probetas de la unión soldada y de la zona afectada térmicamente que han sido ensayadas.

Tabla 2. Número de ciclos de pre-agrietamiento en unión soldada (S1-S5) y zona afectada por el calor (T1-T5).

S1	S2	S3	S4	S5
25914	25958	24194	21109	29204
T1	T2	T3	T4	T5
16684	26480	16311	24780	15836

Se observa que el número de ciclos de pre-agrietamiento en la zona afectada por el calor es menor que en la unión soldada, pues ésta, aun habiendo sido también afectada térmicamente, ha sido reforzada con material de aporte, soportando por ello un mayor número de ciclos, mientras que aquella tiende a desarrollar microfisuras y puntos de tensión interna que reducen su capacidad de soportar ciclos de carga.

Una vez pre-agrietadas las probetas, se realizaron los ensayos de fatiga mediante la aplicación de ciclos según se muestra en la Figura 7. Desde el inicio del ensayo hasta el fallo final de la probeta se registra la carga aplicada y el CMOD a varios niveles de tensión media.

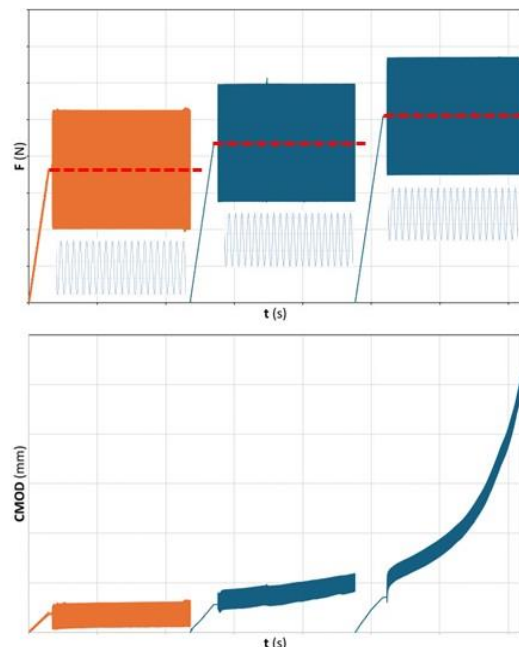


Figura 7. Registros de fuerza y CMOD en función del tiempo durante el ensayo de fatiga.

3.3. Pendiente en la gráfica CMOD-tiempo

Se realizaron los ensayos de fatiga de las cinco probetas pre-agrietadas de material base (probetas Bx), con su

correspondiente tratamiento de datos con objeto de obtener para cada una de ellas los valores de da/dN a lo largo del tiempo de ensayo (en minutos). Para ello, se determina la flexibilidad de la probeta a medida que progresa la grieta por fatiga, lo que permite conocer su longitud en base a una calibración previa. Dichos valores se presentan en la Tabla 3, donde se muestran los valores de la pendiente obtenida en cada uno de los tramos para las cinco probetas.

Tabla 3. Promedio de pendiente de la recta de descarga en probetas de metal base, en mm/min.

	Tr. 1	Tr. 2	Tr. 3	Tr. 4
B1	2,00E-06	5,00E-05	9,00E-05	1,00E-04
B2	1,00E-06	9,00E-05	2,00E-04	3,00E-04
B3	3,00E-05	2,00E-04	1,80E-03	-
B4	5,00E-06	2,00E-04	6,00E-04	1,30E-03
B5	-2,00E-06	2,00E-04	9,00E-04	1,00E-04

De igual forma, el ensayo de las probetas correspondientes a la zona afectada por el calor (probetas Tx) y a la zona de soldadura (probetas Sx), con su posterior tratamiento de datos, permite obtener los resultados mostrados en la Tabla 4 y 5, respectivamente.

Tabla 4. Promedio de pendiente de la recta de descarga en probetas de la zona afectada por el calor, en mm/min.

	Tr. 1	Tr. 2	Tr. 3	Tr. 4
T1	-3,00E-06	9,00E-06	3,00E-05	2,00E-04
T2	-2,00E-07	3,00E-06	9,00E-06	3,00E-05
T3	-5,00E-08	1,00E-07	1,00E-05	3,00E-05
T4	-9,00E-07	4,00E-06	1,00E-05	8,00E-05
T5	8,00E-07	5,00E-06	1,00E-05	6,00E-05

Tabla 5. Promedio de pendiente de la recta de descarga en probetas de unión soldada, en mm/min.

	Tr. 1	Tr. 2	Tr. 3	Tr. 4	Tr. 5
S1	-2,0E-06	3,0E-06	8,0E-06	4,0E-05	1,0E-03
S2	-6,0E-06	3,0E-06	1,0E-05	8,0E-05	1,7E-03
S3	-7,0E-06	2,0E-06	5,0E-06	1,0E-05	1,0E-04
S4	-4,0E-06	2,0E-06	3,0E-06	1,0E-05	-2,0E-05
S5	-2,0E-07	7,0E-06	1,0E-05	3,0E-04	1,6E-03

En las tres zonas de estudio se observan pendientes con valores negativos en el primer tramo, un comportamiento inesperado, pues representa un cierre de grieta en lugar de una apertura. Este fenómeno podría estar relacionado con algún efecto inicial de asentamiento o relajación del material en el cordón de soldadura. Es posible que las tensiones residuales iniciales se estén equilibrando, lo que podría temporalmente reducir la abertura de la grieta.

3.4. Representación gráfica Fuerza-CMOD

Una vez obtenidas las pendientes, y determinada la variación del CMOD, se procede a representar las gráficas Fuerza-CMOD para su posterior análisis, el cual se lleva a cabo en diversas etapas correspondientes a

distintos valores de tensión media aplicada en el ensayo de fatiga, en particular, 50, 60, 70 y 80% de la carga aplicada en el pre-agrietamiento. La Figura 8 muestra los resultados obtenidos para el material base.

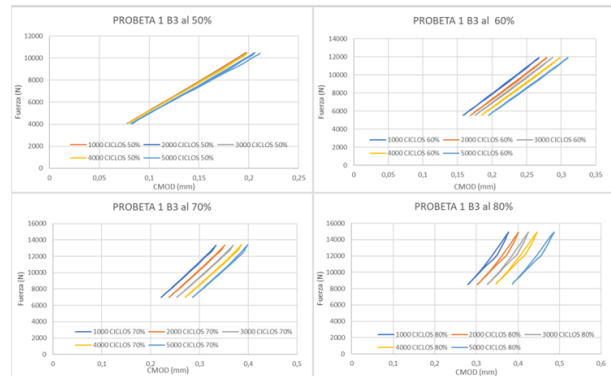


Figura 8. Gráficas Fuerza-CMOD (material base).

En la primera fase, correspondiente al 50% de la carga de pre-agrietamiento, el material sometido a fatiga muestra un comportamiento principalmente elástico, caracterizado por gráficas lineales de carga y descarga en los ciclos de fatiga. El área mínima encerrada entre dichas curvas de carga y descarga implica una disipación de energía insignificante durante los ciclos de fatiga, revelando una deformación plástica mínima, prácticamente inexistente, en esta etapa. Al aumentar la carga al 60%, se detecta el inicio de la deformación plástica con una ligera desviación de la linealidad en las curvas, observando la formación de pequeñas áreas histeréticas entre las curvas de carga y descarga, lo que indica una mayor disipación de energía comparada con la fase anterior. En la siguiente etapa, al 70% de la carga, la probeta muestra un aumento significativo en la deformación plástica. Los bucles se vuelven más pronunciados, reflejando una mayor capacidad de deformación plástica y una disipación de energía más considerable. Finalmente, al alcanzar el 80% de carga, la probeta exhibe una deformación plástica acumulada significativa, observándose bucles histeréticos amplios y bien definidos.

Análogamente, se obtuvieron las gráficas fuerza-CMOD correspondientes a la zona afectada por el calor y la unión soldada.

4. DISCUSIÓN

A partir de los resultados se elaboran las gráficas que representan las pendientes de CMOD frente a número de ciclos para las cinco probetas ensayadas de cada una de las tres zonas estudiadas (Figura 9).

Las tres zonas muestran diferencias importantes en consistencia y fiabilidad. La zona afectada por el calor es generalmente estable, aunque presenta excepciones locales, como en la probeta 1. Esto indica que la zona afectada por el calor es confiable, pero puede tener variaciones locales. El material base, en contraste,

muestra alta variabilidad y picos en las pendientes, lo que sugiere una mayor susceptibilidad a la propagación rápida de grietas y una menor predictibilidad bajo carga cíclica. Las uniones soldadas son consistentemente fiables, con una excepción notable en la probeta 5. Esto demuestra que, con altos estándares de calidad, las uniones soldadas pueden ser muy fiables.

En cuanto a las pendientes, la zona afectada por el calor tiene pendientes bajas y estables, indicando una propagación de grietas más controlada. El material base muestra pendientes más altas y fluctuantes, reflejando una mayor variabilidad y susceptibilidad a la fatiga. La soldadura tiene pendientes mayormente bajas y estables.

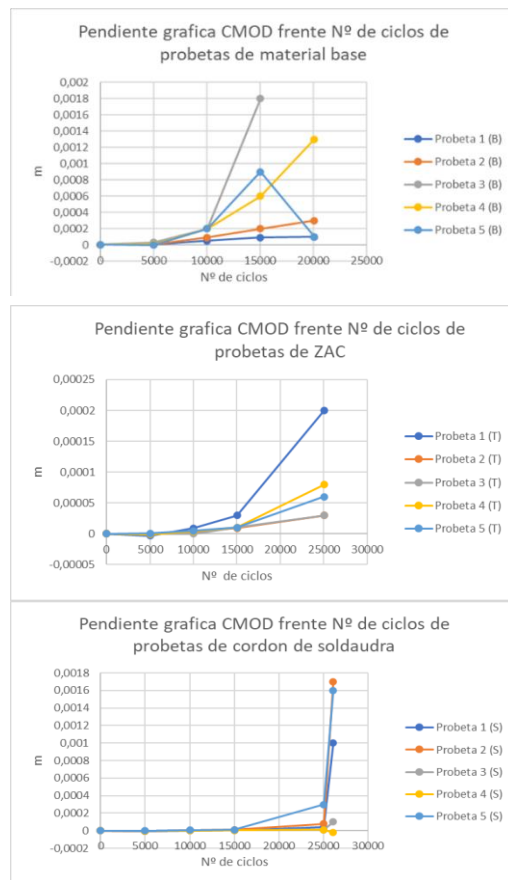


Figura 9. CMOD frente a número de ciclos.

Las variabilidades observadas pueden ser causadas por tratamientos térmicos inconsistentes y tensiones residuales en la zona afectada por el calor, heterogeneidades en la microestructura del material base y defectos de soldadura en las uniones soldadas.

Al comparar las gráficas de las tres zonas se observa que el aumento de la apertura de la grieta siempre ocurre hacia el final del ensayo debido a un mayor número de ciclos acumulados. Esto sugiere que la fatiga afecta a todas las zonas de manera similar, siguiendo las tres fases de los procesos de fatiga.

En conclusión, la zona afectada por el calor y la unión soldada son más estables que el material base, que muestra mayor susceptibilidad a la propagación de grietas. Las excepciones significativas subrayan la importancia de un control de calidad riguroso y una comprensión profunda de los materiales para asegurar la fiabilidad y durabilidad de los componentes.

5. CONCLUSIONES

De los ensayos realizados se pueden extraer las siguientes conclusiones:

- La microestructura del material (tubería y *girth weld*) es fundamental en el comportamiento a fatiga. Un tamaño de grano fino, como el que presenta la unión soldada, presenta una mayor resistencia a fatiga que el material base.
- Las discontinuidades microestructurales o superficiales son puntos de concentración de tensiones, más proclives a la iniciación y propagación de grietas. Se confirma que, con independencia de la zona del material (soldadura, HAZ o material base), estas discontinuidades suponen una menor resistencia del material a fatiga.
- La resistencia a fatiga en los gasoductos con acero API 5L PSL2 grado X60 (L415) no se ve afectada en el cordón de soldadura; de hecho, el comportamiento a fatiga en dicha región se ve mejorado.
- Los resultados obtenidos revelan consistencia y reproducibilidad, lo que permiten validar la aptitud del sistema desarrollado en el programa de I+D conjunto UPM-Enagás.
- Los resultados obtenidos de velocidad de crecimiento de grietas permitirán completar la evaluación de la aptitud de la infraestructura existente para transporte de hidrógeno, aplicando criterios de mecánica de la fractura, según se definirá en la futura norma EN 1594:2024+A1:2025.

REFERENCIAS

- [1] ISO 3183, Petroleum and natural gas industries - Steel pipe for pipeline transportation systems. International Organization for Standardization.
- [2] API Specification 5L, 46th Edition (2018). American Petroleum Institute.
- [3] CEN/TC 234 WG3 - Gas Transportation.
- [4] ASTM E647, Standard Test Method for Measurement of Fatigue Crack Growth Rates. ASTM International.
- [5] J.T. Evans, G. Kotsikos, R.F. Robey. A method for fracture toughness testing cylinder material. Engineering Fracture Mechanics Vol. 50, No. 2, pp. 295-310, 1995.
- [6] Lubomír Gajdoš, Martin Šperl, Petr Črha. The effect of curvature of a pipe wall on the fracture toughness and protection of high pressure pipelines. Materials Today: Proceedings 3 (2016) 973-978.

MODELIZACIÓN DE ENGRANAJES POR ELEMENTOS FINITOS PARA LA EVALUACIÓN DE VIDA A FATIGA CONSIDERANDO LA INFLUENCIA DEL TEMPLE POR INDUCCIÓN

M. García^{1*}, X. Olamendi¹, I. Mugarza¹, M. Escalero¹, A. Goñi², U. Segurajauregi²

¹ Fiabilidad Mecánica, ² Dinámica de Máquinas y Procesos de Fabricación – Ikerlan, Basque Research and Technology Alliance, Paseo J.M. Arizmendiarreta, 2, Arrasate-Mondragon 20500, España

* Persona de contacto: maite.garcia@ikerlan.es

RESUMEN

Algunas normas de cálculo de engranajes, por ejemplo la ISO 6336-4, todavía no aplican a engranes endurecidos por temple por inducción, un tratamiento térmico cada vez más popular por su bajo consumo eléctrico y tiempo de proceso. Vista esa limitación, los autores han desarrollado una metodología analítico-numérica para la predicción de vida a fatiga, que considera mediante un enfoque local el estado tensional proveniente del 1) contacto entre engranes y 2) el temple. En particular, este trabajo presenta cómo realizar una modelización óptima por elementos finitos de una pareja de engranes, para extraer con precisión y bajo coste computacional el valor de los parámetros que gobiernan el fallo por fatiga. Para ilustrar los desarrollos se aborda el ejemplo práctico de un engranaje recto usado en laboratorio para caracterización.

PALABRAS CLAVE: Engranes, modelización, elementos finitos, vida a fatiga, temple por inducción.

ABSTRACT

Some calculation standards for gears, such as the ISO 6336-4, are still not applicable to gears hardened by induction quenching, a heat treatment which is becoming popular thanks to its low energy consumption and process time. Given that limitation, the authors have developed an analytical-numerical methodology for the prediction of fatigue life, which considers through a local approach the stress state coming from 1) the contact between gears and 2) the induction process. In particular, this work presents how to optimally model by finite elements a gear pair, to extract with precision and low computational cost the values of the parameters governing the fatigue failure. The developments achieved are illustrated through a practical example consisting of a spur test gear set used in the laboratory for characterization.

KEYWORDS: Gears, modelling, finite elements, fatigue life, induction hardening.

1. INTRODUCCIÓN

En engranajes sometidos a solicitaciones demandantes es común que ocurran fallos mecánicos, a pesar de aplicar materiales, tratamientos térmicos, y procesos de fabricación y montaje de alta calidad. Entre los modos de fallo más catastróficos, porque pueden producir el desprendimiento de un fragmento grande del diente, están 1) la fractura del flanco de diente (TFF en inglés) y 2) la rotura del pie por flexión.

El TFF es un fallo que ocurre debajo del flanco activo, ligeramente debajo o justamente en la interfaz entre la capa superficial endurecida y el núcleo blando, y aproximadamente a la mitad de altura del diente. Por lo general, la acción de la fatiga mecánica inicia una grieta en una inclusión no metálica, la cual crece hacia la superficie más cercana y hacia el pie del lado contrario, desprendiendo la parte superior del diente.

La rotura del pie por flexión, tal y como el propio nombre indica, ocurre en el pie del diente bajo la acción de la tensión fluctuante producida por la fuerza de contacto

variable en magnitud y posición. Por lo general, la fatiga mecánica inicia una grieta superficial que crece hacia dentro en el material, atravesando la sección completa y desprendiendo el diente. En casos donde trabajan ambos flancos del diente, el fenómeno de iniciación y propagación de grieta puede producirse en ambos pies, dando lugar a una coalescencia de grietas que también desprende el diente entero.

La parte 4 de la norma ISO 6336 [1], aún catalogada como especificación técnica y aplicable exclusivamente a engranajes cementados, propone un procedimiento para el cálculo del TFF según métodos de distinta complejidad y precisión. Como parámetro para cuantificar el daño por TFF se usa la exposición local del material, A_{FF} , que compara localmente la tensión de cortadura aplicada y la tensión de cortadura admisible del material. Como se observa en la Ecuación (1), la tensión aplicada incluye el efecto de la carga ($\tau_{eff,L}$), las tensiones residuales ($\tau_{eff,RS}$), y la interacción entre ambas ($\Delta\tau_{eff,L,RS}$). Para facilitar la evaluación de TFF en la fase de diseño, la norma propone valores orientativos tanto de las tensiones residuales como de la tensión admisible en función de la dureza en

profundidad. Esos valores orientativos son válidos sólo para engranajes cementados.

$$A_{FF} = \frac{\tau_{eff}}{\tau_{per}} + c_1 = \frac{\tau_{eff,L} - \Delta\tau_{eff,L,RS} - \tau_{eff,RS}}{\tau_{per}} + c_1 \quad (1)$$

Por su lado, la parte 3 de la norma ISO 6336 propone un procedimiento para el cálculo de la rotura del pie por flexión, y presenta varias alternativas como en el caso del TFF. La capacidad de engrane ante este modo de fallo se determina mediante el cociente entre la tensión permisible y la tensión real en la dirección del perfil de diente. De forma conveniente, se presentan ecuaciones para estimar la tensión permisible partiendo de la tensión límite nominal (valores disponibles en ISO 6336-5), introduciendo correcciones como las de rugosidad y dureza superficial. Asimismo, se obtiene la tensión real aplicada mediante la fuerza transmitida (F_t), el ancho (b) y módulo normal de engrane (m_n) y múltiples factores tales como de aplicación (K_A), dinámico (K_v), y de forma (Y_F). En la tensión real no se incluyen explícitamente las tensiones residuales provenientes del tratamiento térmico.

$$S_F = \frac{\sigma_{FG}}{\sigma_F} = \frac{\sigma_{Flim} Y_{ST} Y_{NT} Y_{\delta rel T} Y_{R rel T} Y_X}{\frac{F_t}{b m_n} Y_F Y_S Y_\beta Y_B Y_{DT} K_A K_v K_{F\beta} K_{F\alpha}} \quad (2)$$

Por tanto, se puede concluir que la norma ISO 6336 proporciona procedimientos bien definidos y muy versátiles para evaluar los modos de fallo más relevantes de engranajes. No obstante, existen algunas cuestiones mejorables en la consideración la influencia de las tensiones residuales provenientes del tratamiento térmico, sobre todo para el caso del temple por inducción. Esta realidad ha motivado a los autores a desarrollar una metodología analítico-numérica propia de integridad estructural de engranajes, para hacer predicciones de capacidad, daño acumulado o vida remanente.

En particular, el objetivo de este trabajo es aprender a realizar una modelización de elementos finitos óptima de una pareja de engranes, para extraer eficientemente una superficie de respuesta de tensiones que se empleará en el cálculo de integridad estructural.

2. METODOLOGÍA DE INTEGRIDAD ESTRUCTURAL DE ENGRANAJES

La Figura 1 muestra esquemáticamente la metodología analítico-numérica desarrollada, junto con sus entradas y salidas. Dicha metodología contiene dos partes principales.

La parte del preprocesado se ejecuta por medio del método de elementos finitos. Por un lado, se obtiene el mapa de tensiones residuales producido por el temple por inducción (módulo M1). Para ello, se parte de características geométricas, propiedades de material y condiciones de tratamiento (corriente, tensión y velocidad de pasada) y se emplea el procedimiento propuesto en [2]. Por otro lado, se obtiene una superficie de respuesta de tensiones a través de una campaña de simulaciones con varias posiciones de contacto y niveles de carga (módulo M2). Para ello se necesitan también propiedades de material y geometría.

La parte del procesado, ejecutado en el módulo DT, utiliza series temporales de las condiciones de operación. Consiste en:

1. El mapeado a una malla común de las tensiones de tratamiento térmico y de carga.
2. Interpolación de las tensiones de carga, según el perfil de cargas y posiciones de operación.
3. La suma tensorial de ambas tensiones.
4. El cálculo del parámetro gobernante (dependiente del modo de fallo).
5. El conteo de ciclos.
6. El cálculo de daño por fatiga.

En este trabajo se optimiza el modelo paramétrico y la simulación de una pareja de engranes para su uso en el módulo M2 de la metodología.

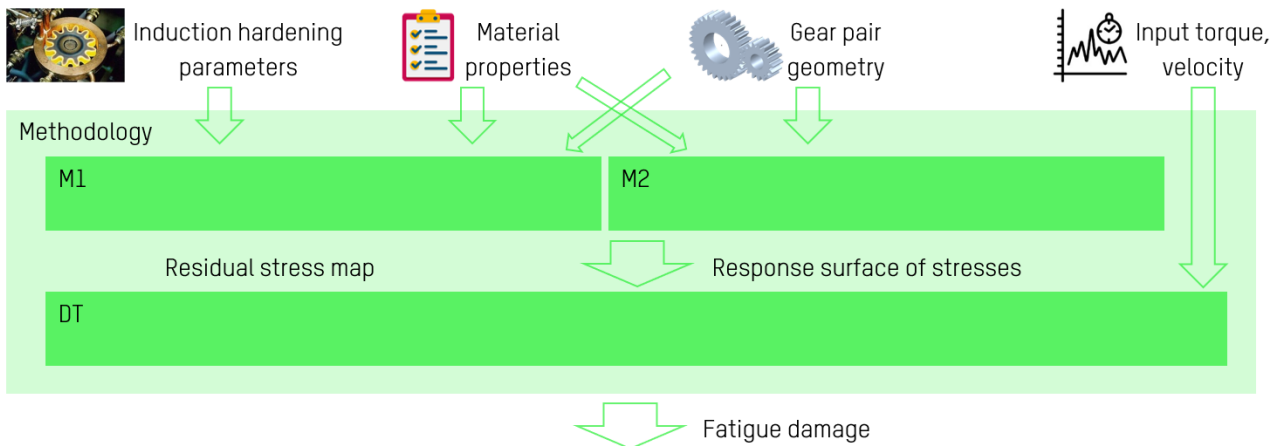


Figura 1: Metodología analítico-numérica de integridad estructural de engranajes.

3. CASO DE ESTUDIO Y SU MODELADO Y SIMULACIÓN POR ELEMENTOS FINITOS

Se estudia una pareja de engranes de dientes rectos empleada en laboratorio para la caracterización de propiedades mecánicas. Los valores aproximados de las características macro-geométricas principales son: un módulo comprendido entre 6 y 12 mm, ambos números de dientes entre 23 y 26, y ambas correcciones entre 0,26 y 0,27 (los valores exactos son confidenciales). El material de los engranes es 42CrMo4 endurecido superficialmente mediante temple por inducción, con una dureza superficial en torno a 700 HV y una capa variable entre 2 y 4 mm.

En cuanto al modelo, se generan particiones geométricas que resultan de realizar cortes en profundidad (a 2 y 4 mm) y cortes radiales (en los puntos característicos de contacto, conocidos como A, B, C, D y E). En las particiones cercanas al contacto y en el pie, se emplea una malla refinada. Por otro lado, se definen contactos en las tres parejas de dientes que llegan a contactar durante la simulación (Figura 2). Se realizan simulaciones con diferentes coeficientes de fricción, dimensiones (2D vs. 3D), espesores, y niveles de par: 200000 Nmm ($p_{\max,C} = 1957,1$ MPa), 400000 Nmm ($p_{\max,C} = 2776,4$ MPa), 800000 Nmm ($p_{\max,C} = 3942,6$ MPa).

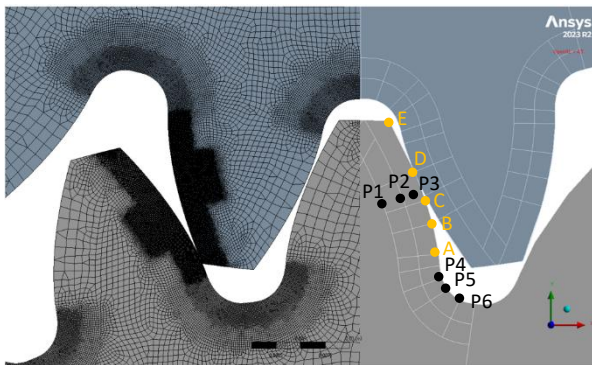


Figura 2: Malla y particiones geométricas.

4. RESULTADOS

4.1 Linealidad de tensiones

La Figura 3 muestra los valores de tensión cortante en los puntos debajo de C (P1-P3, ligeramente desplazados), para diferentes valores de par ($\mu = 0$, 2D).

En los tres puntos, el valor absoluto de la tensión cortante crece con el par, siguiendo una tendencia no-lineal. Los valores son menores cuanto mayor es la profundidad del punto considerado, alcanzando valores negativos en el punto P1.

Por lo demás, la linealidad de la evolución aumenta con la profundidad. Por ejemplo, un aumento del par aplicado por un factor de 4 supone un incremento de x4.69 y x2.96

de tensión en los puntos P1 y P2, mientras que en el punto P3 ese incremento es sólo de x1.79.

Por tanto, se deduce que la evaluación de TFF requiere una superficie de respuesta de tensiones construida a partir de una campaña de simulaciones con varios niveles de carga.

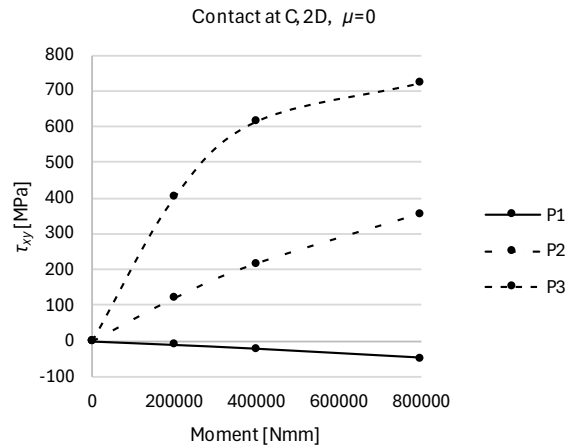


Figura 3: Evolución de tensiones cortantes con diferentes pares.

La Figura 4 muestra los valores de tensión normal en los puntos del pie, siguiendo las condiciones de la Figura 3.

En los tres puntos, la tensión crece prácticamente de forma lineal con el par aplicado. En concreto, para los tres puntos estudiados las tensiones crecen aproximadamente por un factor de 1,99 y 3,96 para pares que duplican y cuadruplican en valor inicial. En este caso, los valores máximos se encuentran en el punto intermedio P5.

Por tanto, se deduce que la evaluación de la rotura en el pie se puede hacer partiendo de una superficie de respuesta de un único nivel de carga, ya que las tensiones a otros niveles se pueden estimar mediante proporcionalidad.

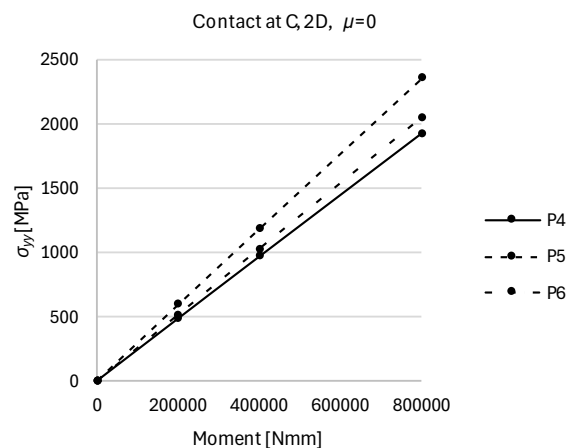


Figura 4: Evolución de tensiones normales con diferentes pares.

4.2 Espesor de engrane, dimensión de modelo

La Figura 5 muestra los valores de tensión cortante en los puntos debajo de C, para diferentes espesores calculados con modelos tridimensionales y el escenario bidimensional. En todos los casos se asumen contactos sin fricción ($\mu = 0$) y un mismo par normalizado (magnitud de par/espesor).

En los tres puntos la tensión cortante en el plano xy no varía significativamente con el espesor, por lo que la calidad de la estimación 2D es parecida para los diferentes espesores. Dicha estimación es ligeramente no-conservadora (menor al valor 3D) en los puntos P1 y P2, y conservadora en el punto P3. En el caso del punto P2, el más propenso a TFF, los errores son mayores en los espesores intermedios de 15 mm y 25 mm, 16.4% y 11.6% respectivamente. Además, en ese punto P2 los errores son menores en los espesores mínimo y máximo, 6,3% y 2,2% respectivamente.

Por tanto, al generar una superficie de respuesta de tensiones cortantes, se recomienda realizar el modelo tridimensional para cualquier espesor en el rango estudiado. Esto se debe a que si se decide trabajar con la simplificación 2D se pueden cometer errores mayores al 10% en la estimación de tensiones.

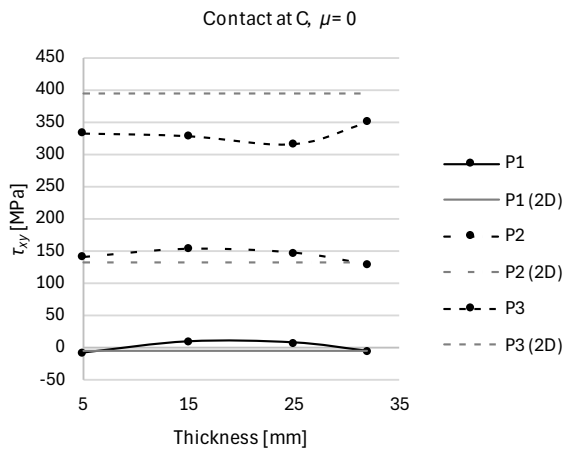


Figura 5: Evolución de tensiones cortantes con diferentes espesores.

La Figura 6 muestra los valores de tensión normal en los puntos del pie de diente, bajo las mismas condiciones consideradas en la Figura 5.

En los tres puntos la tensión normal no muestra una tendencia sostenida con el aumento del espesor, ya que primero crece y luego decrece. Otro aspecto que comparten los tres puntos es que la estimación bidimensional es ligeramente no-conservadora independientemente del espesor. De forma cuantitativa, los errores están siempre por debajo del 10 %, y por lo general son mayores para los espesores intermedios. Por ejemplo, en el punto sometido a las tensiones mayores (P5), los errores son de 6,3% y 5,1% para espesores de

15 mm y 25 mm, mientras que son de 3.0% y 4.2% en espesores de 5 mm y 32 mm, respectivamente.

Por tanto, al generar una superficie de respuesta de tensiones normales, se podría seguir el enfoque bidimensional siempre y cuando se puedan admitir errores entre el 5% y 10%. Si se desean errores menores al 5%, el modelado debería considerar el espesor particular del engrane.

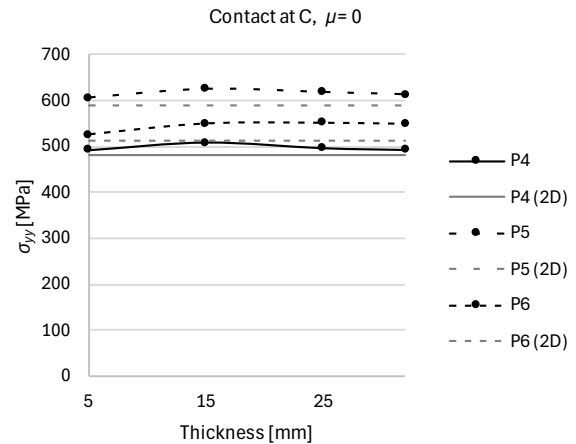


Figura 6: Evolución de tensiones normales con diferentes espesores.

La Figura 7 muestra, para todos los puntos y espesores considerados, la componente axial de la tensión, la cual puede participar en parámetros multiaxiales usados para la predicción de TFF [3].

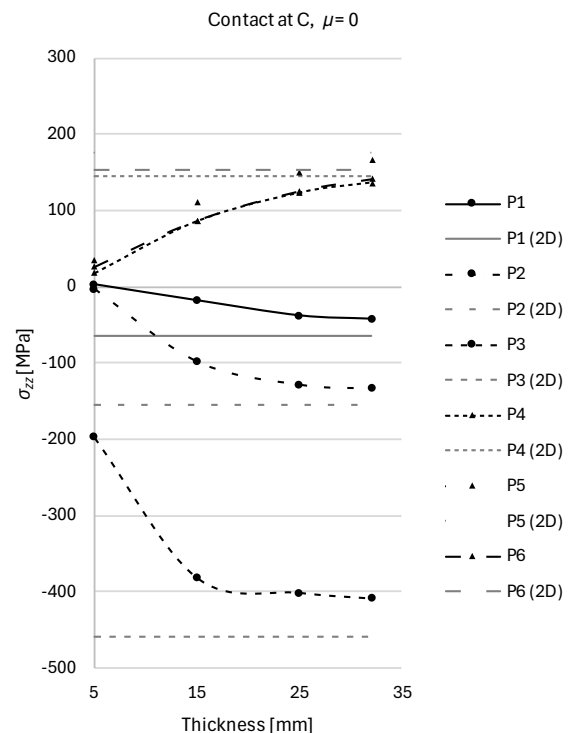


Figura 7: Evolución de tensiones axiales con diferentes espesores.

En los puntos debajo de C, está tensión normal fuera de plano aumenta en valor absoluto a medida que aumenta el espesor, mientras que las tensiones de mayor magnitud se ven cerca de la superficie. Inicialmente, para espesores bajos, el cambio es significativo, mientras que dicho cambio es prácticamente despreciable a partir del espesor de 25 mm. Esta observación sugiere que la convergencia hacia la estimación 2D, en caso de confirmarse, es muy lenta a partir de los 25 mm.

En los puntos del pie, se observa un claro aumento de la tensión axial con el aumento del espesor, y los valores convergen hacia la estimación 2D. En este caso, se identifica una variación clara incluso a partir de los 25 mm, por lo que se puede prever alcanzar los valores de 2D para espesores mayores a 32 mm.

4.3 Influencia de la fricción

La Figura 8 muestra los valores de tensión cortante de los puntos subsuperficiales durante el paso de contacto. Se muestran los dos escenarios de fricción considerados ($\mu = 0$ y $\mu = 0,1$), bajo un par de 200000 Nmm.

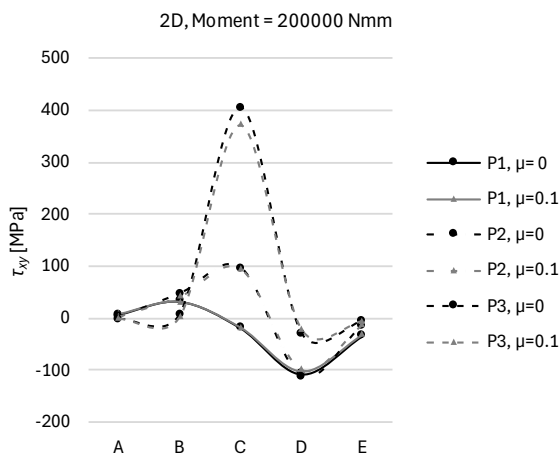


Figura 8: Evolución de tensiones cortantes con diferentes fricciones.

Se observa que los rangos de tensión son mayores cuanto menor es la profundidad del punto considerado, mientras que el efecto generado por la fricción también sigue la misma tendencia. De hecho, en el punto P1 la diferencia es de 4,6% ($\mu = 0$ vs. $\mu = 0,1$), y en el punto P3 de 9,1%. Sorprendentemente, en todos los puntos la existencia de una fuerza friccional produce una reducción del rango de tensiones.

Por tanto, para generar una superficie de respuesta de tensión cortante conviene considerar un valor del coeficiente de fricción realista, aunque el caso sin fricción es un escenario conservador. Haciendo una lectura diferente, y suponiendo que ambos coeficientes pertenecen a dos condiciones de lubricación diferentes, se deduce que la fricción dificulta la aparición de TFF.

La Figura 9 muestra los valores de tensión normal en los puntos del pie para las condiciones consideradas en la Figura 8.

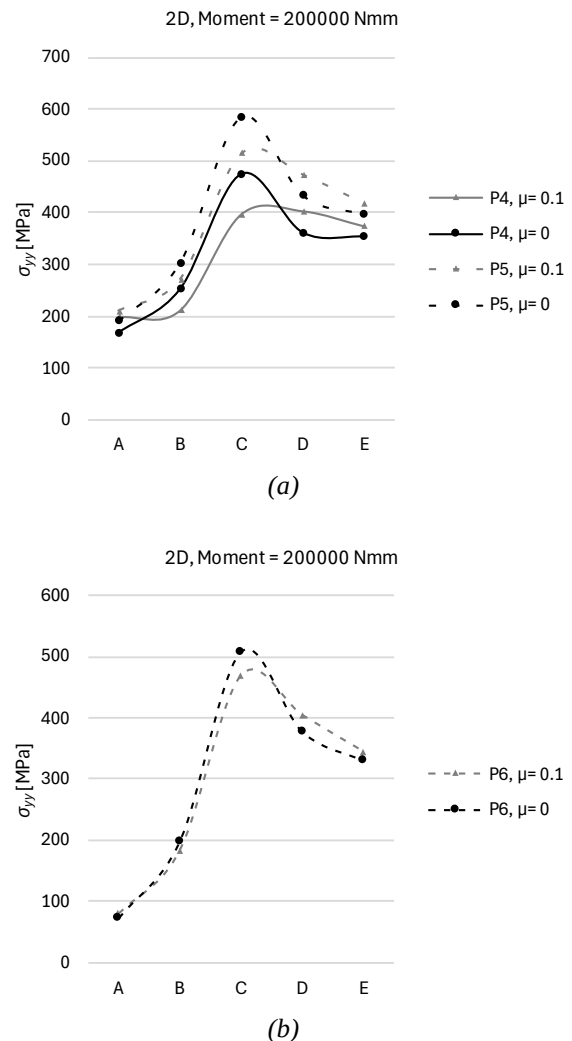


Figura 9: Evolución de tensiones normales con diferentes fricciones, en P4 y P5 (a) y P6 (b).

Se observa que las tensiones máximas se dan en el punto P5, aunque los rangos son mayores en el punto P6, por lo que este segundo punto es más susceptible a la fatiga por flexión. Esta comparativa vuelve a destacar la gran influencia de la fricción, produciendo una reducción importante en los rangos de tensión. En particular, en el punto con menores tensiones (P4) la diferencia es del 33,3% ($\mu = 0$ vs. $\mu = 0,1$), mientras que en el punto P6 dicha diferencia es de 10,7%.

Por tanto, al determinar las tensiones normales para realizar una evaluación de fatiga por flexión, se debe contemplar el coeficiente de fricción particular si se quieren evitar grandes sobre-conservadurismos en las predicciones.

4.4 Interacción de tensiones residuales y de carga

La Figura 10 muestra la distribución en profundidad de las tensiones cortantes debajo de C, cuando se aplica un par de 200000 Nmm ($\mu = 0$, 2D).

La tensión proveniente de la carga parte de un valor nulo en la superficie, después sube rápidamente hasta alcanzar el máximo ligeramente por debajo de la superficie, y finalmente muestra una bajada gradual. La tensión residual de cortadura, estimada con tensiones normales según [1], es mínima en la superficie, sube sostenidamente hasta una profundidad aproximada de 2 mm, y luego alcanza un *plateau* en el lado tractivo.

En la capa templada, es decir, en los primeros 2 mm, la tensión residual es compresiva y similar en valor absoluto a la tensión de la carga, por lo que contrarresta efectivamente la acción de fatiga producida por la tensión de carga. A partir de esa profundidad, la tensión residual pasa a ser tractiva y su efecto se suma al de la tensión de carga.

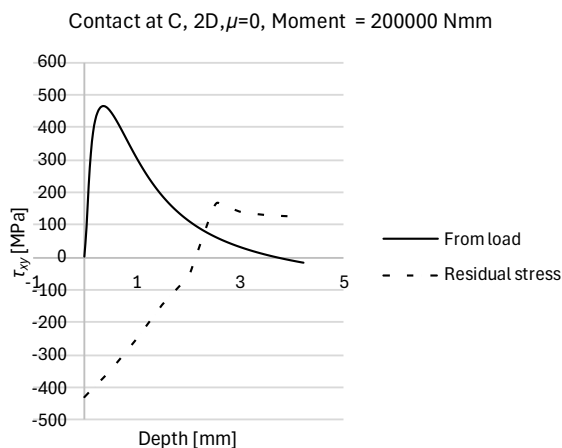


Figura 10: Tensiones residuales y de carga debajo de C.

4. CONCLUSIONES

En este trabajo se optimiza la modelización por elementos finitos de una pareja de engranes, para extraer de forma precisa y poco costosa una superficie de respuesta de las tensiones que gobiernan el fallo mecánico. Concretamente, se consideran los modos de fallo de fractura del flanco (TFF) y rotura en pie por flexión. Se concluye que:

- Para la evaluación del TFF es necesario extraer las tensiones subsuperficiales para varios niveles de par, mientras que la evaluación de la rotura en el pie puede partir de la respuesta ante una carga unitaria y estimar las tensiones asumiendo linealidad.
- Para una evaluación precisa del TFF y la rotura del pie es indispensable modelar el engrane con su espesor, aunque los errores cometidos con la simplificación bidimensional estarían por

debajo del 10% en tensiones para la rotura del pie.

- La consideración realista de la fricción es recomendable en la evaluación de ambos modos de fallo (TFF y rotura de pie), si bien el caso sin fricción supone el escenario más adverso.
- En la capa templada la influencia favorable de la tensión residual es del mismo orden de magnitud que la influencia desfavorable de la tensión de carga. Debajo de la capa templada, en el núcleo, la tensión residual tiene una influencia desfavorable que se suma a la de la tensión de carga.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo se ha realizado con el apoyo de dos proyectos diferentes: 1) MEEVCE II: “Metodología evolutiva para el diseño de componentes del rotor/drivetrain eólicos resilientes”, Convenio de subvención No. KK-2024/00047) Programa Estratégico del Gobierno Vasco. 2) PID2023-149926OB-I00, financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por FEDER, UE.

REFERENCIAS

- [1] International Journal of Standardization, Calculation of load capacity of spur and helical gears (2019).
- [2] M. Areitioaurtena, U. Segurajauregi, M. Fisk, M.J. Cabello, E. Ukar, *Numerical and experimental investigation of residual stresses during the induction hardening of 42CrMo4 steel*, European Journal of Mechanics – A/Solids 96 (2022), 104766.
- [3] S.A. Böhme, A. Vinogradov, J. Papuga, F. Berto, A novel predictive model for multiaxial fatigue in carburized bevel gears, *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures* 44 (2021), 2033-2053.

VELOCIDAD DE CRECIMIENTO DE GRIETAS POR FATIGA EN PRESENCIA DE HIDRÓGENO ELECTROQUÍMICO: INFLUENCIA DE VARIABLES DE ENSAYO Y DE ANÁLISIS

M.M. Llera^{1*}, G. Alvarez¹, V. Arniella², S. Otero¹, F. J. Belzunce¹, C. Rodríguez¹

¹ SIMUMECAMAT Research Group, Universidad de Oviedo, Edificio Departamental Oeste, 7.1.10. Campus Universitario, 33203 Gijón, Principado de Asturias, España

² Structural Integrity Group, Universidad de Burgos, Escuela Politécnica Superior, Avd. Cantabria s/n 09006 Burgos, Spain

* Persona de contacto: lleramarcos@uniovi.es

RESUMEN

En este trabajo se analiza la velocidad de propagación de grietas por fatiga en aceros estructurales y sus uniones soldadas tanto en ensayos en ambiente de laboratorio como en ambiente electroquímico de hidrógeno. Utilizando distintos tipos de acero se evaluó la influencia de distintas variables de ensayo, como el tipo de ambiente electroquímico (ácido y básico) la densidad de corriente utilizada (0.2, 0.5 y 1 mA/cm²) o la frecuencia de carga (entre 0.1 y 0.001 Hz.). También se analizó la influencia del método de análisis de datos en la definición de la ley de Paris característica de cada acero y condición. Los resultados evidenciaron que tanto el uso de un electrolito más ácido como de una densidad de corriente más alta, provocan una mayor velocidad de propagación, lo que puede explicarse en virtud de la mayor concentración de hidrógeno introducido. No obstante, y a igualdad del resto de los parámetros, la velocidad de crecimiento de grietas por fatiga crece conforme disminuye la frecuencia de ensayo, hasta que se alcanza una frecuencia límite cuyo valor depende del valor de ΔK aplicado. Para ΔK bajos la velocidad de crecimiento también es más baja y una determinada frecuencia puede ser lo suficientemente lenta para permitir la llegada del hidrógeno a la zona de proceso. Sin embargo, conforme crece ΔK el crecimiento se va acelerando, lo que hace necesario disminuir la frecuencia, para que la velocidad de crecimiento no disminuya. Por último, se hace hincapié en la importancia del análisis de datos en la definición de la ley de Paris.

PALABRAS CLAVE: Velocidad de crecimiento de grieta, Fatiga, Fragilización por hidrógeno, Carga electroquímica.

ABSTRACT

This work analyses the fatigue crack propagation rate in structural steels and their welded joints under laboratory conditions and in an electrochemical hydrogen environment. Using different types of steel, the influence of various test variables was evaluated, such as the type of electrochemical environment (acidic or basic), the applied current density (0.2, 0.5, and 1 mA/cm²), and the loading frequency (ranging from 0.1 to 0.001 Hz). The impact of the data analysis method on defining the characteristic Paris law for each steel and condition was also examined. The results showed that both the use of a more acidic electrolyte and a higher current density lead to an increased crack propagation rate, which can be attributed to the higher concentration of introduced hydrogen. Nevertheless, under equal test parameters, the fatigue crack growth rate increases as the test frequency decreases until a critical frequency is reached, the value of which depends on the applied ΔK . At low ΔK values, the crack growth rate is also lower, and a given frequency may be slow enough to allow hydrogen to reach the process zone. However, as ΔK increases, crack growth accelerates, necessitating a reduction in frequency to prevent a decrease in the growth rate. Finally, the importance of data analysis in defining the Paris law is emphasised.

KEYWORDS: Crack growth rate, Fatigue, Hydrogen embrittlement, Electrochemical charging.

1. INTRODUCCIÓN

La propagación de grietas por fatiga en aceros estructurales y sus uniones soldadas es un fenómeno de gran interés en la ingeniería estructural, ya que influye directamente en la vida útil y seguridad de componentes sometidos a cargas cíclicas. La presencia de hidrógeno en estos materiales puede generar efectos adversos, como la fragilización y por ende el aumento en la velocidad de propagación de grietas, lo que compromete su integridad estructural. Este fenómeno, conocido como fragilización

por hidrógeno, ha sido ampliamente estudiado en diferentes condiciones ambientales y de carga, debido a su impacto en sectores industriales como el transporte, la construcción y la generación de energía [1].

Diversos factores influyen en la propagación de grietas por fatiga en presencia de hidrógeno, entre ellos, la composición del acero, las condiciones ambientales y los parámetros del ensayo. En particular, el medio electroquímico en el que se desarrollan los ensayos puede alterar significativamente el comportamiento del

material, favoreciendo o inhibiendo la difusión de hidrógeno hacia la microestructura del acero. Diversos parámetros son los influyentes, afectando a la velocidad de propagación de grietas, determinando la cantidad de hidrógeno disponible en la zona de proceso (frente de grieta).

Con el propósito de comprender mejor estos efectos, en el presente estudio se sometieron a ensayos de fatiga en ambiente electroquímico distintas familias de acero. Se evaluó la influencia de dos medios electroquímicos (ácidos y básicos), así como de diferentes densidades de corriente (0.2, 0.5 y 1 mA/cm²) y frecuencias de carga (en el rango de 0.1 a 0.001 Hz). Asimismo, se examinó el impacto del método de análisis de datos en la caracterización de la ley de Paris, la cual describe la relación entre la variación del factor de intensidad de grietas de esfuerzos (ΔK) y la velocidad de crecimiento de grietas.

2. MATERIALES

En este trabajo se emplearon tres tipos de aceros representativos de distintas aplicaciones estructurales que podrían ser utilizados en depósitos de contención de hidrógeno a presión y que se caracterizan por tener distintas resistencias y microestructuras. Se trata de dos aceros estructurales y un acero CrMo. La figura 1 muestra las microestructuras características de los tres aceros, mientras que en la Tabla 1 se recogen las propiedades mecánicas a tracción y la tenacidad a la fractura de todos ellos.

Por una parte, el acero estructural S355, es un acero al carbono-manganeso de uso general, con una excelente soldabilidad y tenacidad, que muestra una microestructura ferrito-perlítica (Figura 1.a). Otro acero estructural utilizado fue el S420, con un contenido en carbono muy bajo (0.034%C) pero microaleado con Niobio y titanio, muestra una microestructura completamente ferrítica de grano fino (Figura 1.b) confiriéndole no solo un mayor límite elástico sino también una mayor tenacidad. Por último, el acero CrMo700 es un acero de alta resistencia con una microestructura de martensita revenida (Figura 1.c), obtenida tras un proceso de temple y revenido. Este tipo de acero es comúnmente utilizado en aplicaciones estructurales críticas y recipientes a presión, donde se requiere una elevada resistencia mecánica y buena tenacidad.

Tabla 1. Propiedades mecánicas a tracción de los materiales en estudio.

Material	σ_{ys} (MPa)	σ_{ut} (MPa)	A (%)	Z (%)	J_{IC} kJ/m ²
S355	367	550	32	70	590
S420	495	580	27	85	710
CrMo700	622	710	23	63	420

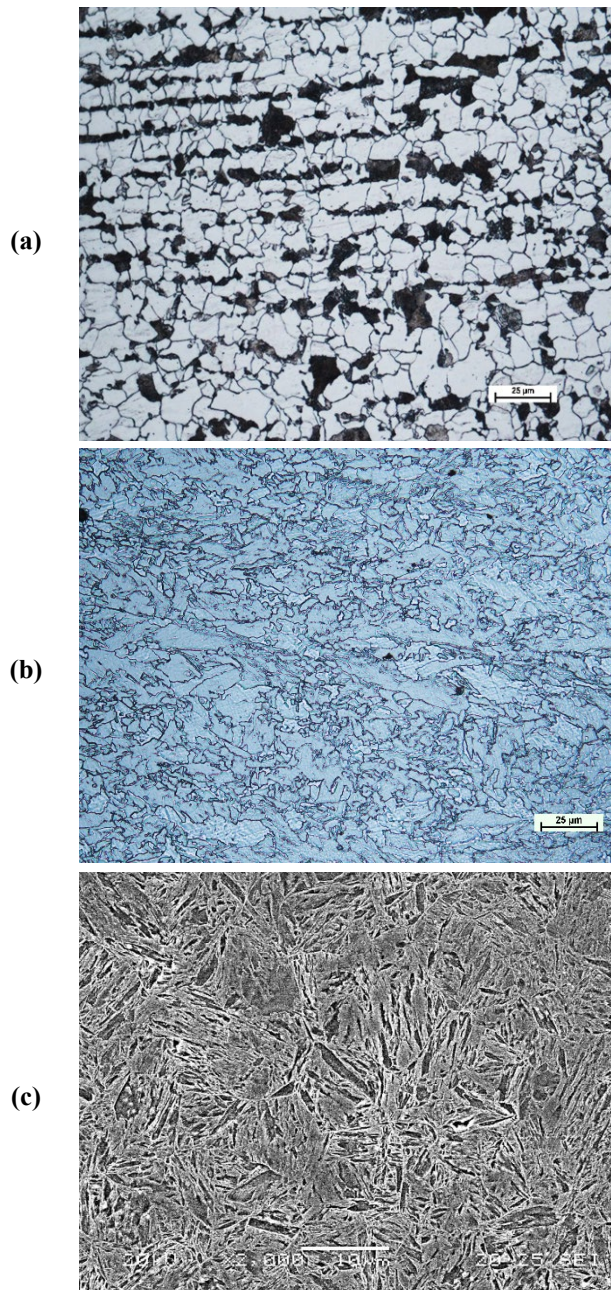


Figura 1. Microestructuras de los aceros: (a) S355, (b) S420, (c) CrMo700.

3. METODOS

Como se verá más adelante, el ambiente de hidrógeno para los ensayos realizados in-situ se generó por vía electroquímica, utilizando dos electrolitos y distintas densidades de corriente. Con el fin de cuantificar el contenido medio de hidrógeno en los materiales para cada condición de carga electroquímica, se realizaron cargas de hidrógeno en dichas condiciones para cada material en probetas con dimensiones 50 x 50 x 2 mm, sin aplicación de carga mecánica y utilizando tiempos de carga suficientes para conseguir una concentración de hidrógeno homogénea en las muestras [1]. Finalizada la carga de hidrógeno, se determinó su concentración utilizando un analizador LECO DH603.

Para la caracterización de la velocidad de propagación de grieta por fatiga en los distintos materiales, se mecanizaron probetas tipo SE(B), siguiendo las especificaciones de la norma ISO12108 [2], con un espesor, B , igual al de las chapas de partida y un ancho $W=2B$. A partir de una entalla inicial con longitud 2.5 mm, se llevó a cabo un proceso de pre-fisuración por fatiga hasta alcanzar una relación $a/W = 0.16$.

Todos los ensayos fueron realizados en una máquina MTS de 250 kN de capacidad de carga y utilizando un extensómetro tipo COD para determinar el tamaño de grieta en el curso del ensayo. La relación de cargas utilizada fue en todos los casos $R = 0.1$. Una vez finalizado el ensayo, se procedió a la rotura de la probeta utilizando otro método de carga y se procedió a medir con precisión las longitudes inicial y final de la grieta generada por fatiga. También se realizó un completo análisis fractográfico de cada una de las probetas.

Los ensayos en ambiente normal de laboratorio (aire) se realizaron en un dispositivo convencional de flexión en tres puntos y con una frecuencia de carga de 10 Hz. En el caso de los realizados en presencia de hidrógeno, se utilizó un dispositivo de flexión en tres puntos invertido, permitiendo sumergir parcialmente la probeta en el electrolito sin afectar al extensómetro COD, que quedó fuera del medio de carga electroquímica [2]. La generación de hidrógeno en superficie se llevó a cabo in-situ mediante un sistema de carga electroquímica, aplicando una corriente catódica entre un electrodo de platino y la probeta de ensayo.

Se emplearon dos tipos de electrolito con distinta agresividad. Un electrolito salino, consistente en una solución de NaCl al 3.5%, representativa de un medio moderadamente agresivo, y un electrolito ácido, consistente en una solución de 1 M $H_2SO_4 + 0.25$ g/L As_2O_3 , seleccionada por su elevada capacidad para generar hidrógeno atómico, representando un ambiente altamente agresivo.

Asimismo, y al objeto de generar distintas concentraciones de hidrógeno, con cada tipo de electrolito se utilizaron distintas densidades de corriente. En el caso del electrolito salino, se emplearon densidades de corriente de 0.2, 0.5 y 2 mA/cm², mientras que para el electrolito ácido se aplicaron densidades de 0.5 y 1 mA/cm².

Por su parte, y dado el efecto que el tiempo de exposición puede ejercer en el fenómeno de fragilización, en los ensayos en ambiente de hidrógeno, se emplearon frecuencias que variaron entre 0.001 Hz y 1 Hz, cubriendo así un amplio rango de valores.

Concluidos los ensayos se procedió al análisis de datos y al ajuste de la curva da/dN vs ΔK . Analizados diferentes métodos de ajuste como el Seven Point Incremental Polynomial Method o el método de Smith, estos tipos de análisis tienen gran influencia en los valores estimados por ajustes incrementales para da/dN . Por esta razón, en este trabajo se optó por un procesado basado en

intervalos fijos de longitud de grieta, seleccionando puntos equiespaciados a lo largo de la curva. En cada intervalo, se calculó una velocidad media asociada a un valor medio del rango de ΔK , lo que permitió obtener curvas más limpias, preservando las tendencias generales y con puntos equiespaciados ajustables a la Ley de Paris.

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1. Velocidad de crecimiento de grietas en ambiente de laboratorio

La Figura 2 muestra, a modo de comparación, las curvas da/dN vs ΔK representativas de los tres aceros analizados. El comportamiento de los dos aceros estructurales, S355 y S420, es bastante similar, si bien el acero ferrítico, S420, muestra valores de crecimiento ligeramente superiores al ferrito-perlítico S355. Por su parte, el acero CrMo700 de microestructura martensítica, y una mayor resistencia que los anteriores, muestra velocidades de propagación notablemente más bajas. Esta mayor resistencia a la propagación es coherente con la mayor resistencia mecánica global del material, asociada a su microestructura más fina y homogénea.

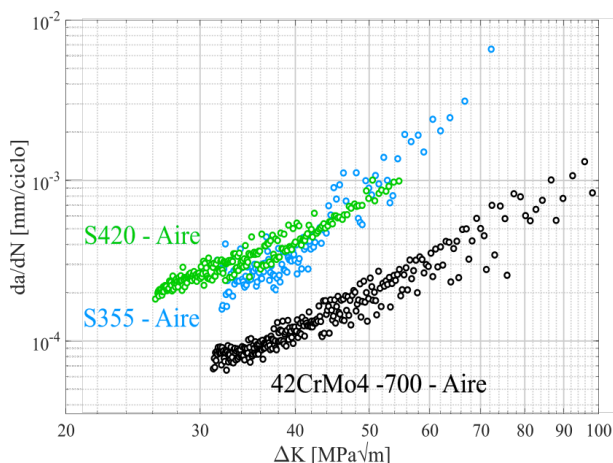


Figura 2. Curvas crecimiento de grieta por fatiga. Aire 10 Hz, $R=0.1$. Aceros CrMo700, S420 y S355.

En conjunto, esta comparativa pone de manifiesto cómo la microestructura y el límite elástico influyen de manera directa en la resistencia a la propagación de grietas por fatiga en condiciones ambientales normales, estableciendo una jerarquía de comportamiento que servirá como referencia para interpretar el efecto del hidrógeno en estos mismos materiales.

4.2. Comportamiento en hidrógeno

Como ya se comentó anteriormente, los ensayos en presencia de hidrógeno se realizaron utilizando diferentes parámetros electroquímicos (electrolito y densidad de corriente). Dichas condiciones se resumen en la Tabla 2 junto con los coeficientes de difusión y la concentración de hidrógeno introducida en la muestra para cada condición. Como puede observarse, para un mismo electrolito, el uso de una mayor densidad de corriente provoca una mayor concentración de hidrógeno

en el material, mientras que para una misma densidad de corriente (0.5 mA/cm^2), la cantidad de hidrógeno introducida con el electrolito ácido es un 50% mayor que con el salino. Obviamente, también influye el tipo de acero, por lo que, utilizando las mismas condiciones (electrolito salino y 2 mA/cm^2), la cantidad de hidrógeno introducida en el acero martensítico prácticamente duplica a la de los aceros estructurales.

Tabla 2. Concentración de H para cada combinación de material, electrolito y densidad de corriente aplicada.

Material	Cd [m^2/s]	Medio	j [mA/cm^2]	C _H [ppm]
CrMo-700	2E-10	Salino	0.2	0.62
		Salino	0.5	0.97
		Salino	2	1.90
		Ácido	0.5	1.23
		Ácido	1	1.64
S355	1.3 E-09	Salino	2	1.04
S420	4.1E-10	Salino	2	1.02

El efecto que tienen estos parámetros en las curvas de velocidad de crecimiento de grietas por fatiga del acero CrMo700 se recogen en la Figura 3, en la que se muestra, junto con la curva obtenida al aire, los resultados de probetas ensayadas a la misma frecuencia de ensayo (0.01 Hz) pero utilizando distintos parámetros electroquímicos.

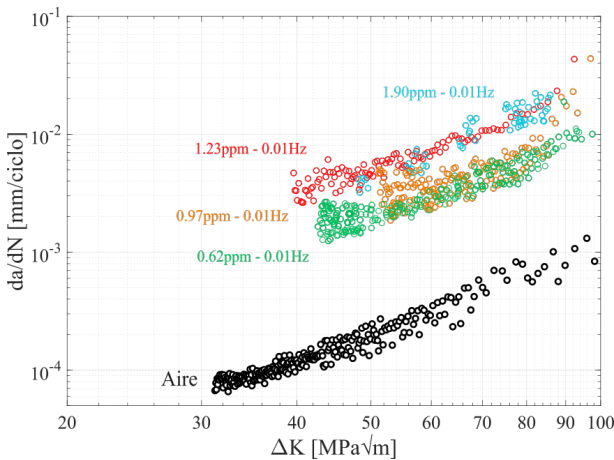


Figura 3. Curvas crecimiento de grieta por fatiga en ambiente electroquímico de hidrógeno. Acero CrMo700.

Como puede observarse, en presencia de hidrógeno, incluso en las condiciones más favorables ($C_H=0.62 \text{ ppm}$), la velocidad de crecimiento de grietas es prácticamente un orden de magnitud superior que la mostrada al aire. Además, la velocidad de propagación crece con el contenido en hidrógeno, pero esta tendencia parece detenerse cuando se llega a una concentración límite, de alrededor de 1 ppm, ya que la muestra ensayada en ambiente ácido y 0.5 mA/cm^2 con una concentración de hidrógeno $C_H=1.23 \text{ ppm}$, muestra el mismo comportamiento que su homóloga ensayada en ambiente salino a 2 mA/cm^2 , con una concentración de hidrógeno mucho mayor (1.90 ppm). Este comportamiento podría basarse en que el flujo de hidrógeno que se produce

cuando se utiliza el medio ácido y una intensidad de corriente de 0.5 mA/cm^2 , fuese el suficiente para que, con el coeficiente de difusión del material y en las condiciones de ensayo aplicadas, la cantidad de hidrógeno que difunde hacia la zona de proceso sea la suficiente para producir la máxima fragilización, por lo que el uso de una mayor concentración de hidrógeno no tenga consecuencias en el comportamiento del material.

Pero obviamente, el efecto de una determinada concentración de hidrógeno no tiene que ser el mismo en todos los materiales, tal y como se refleja en la Figura 4, donde se comparan las curvas de crecimiento de los tres materiales, ensayados en medio salino y utilizando la misma densidad de corriente y frecuencia de ensayo (2 mA/cm^2 y 0.01 Hz). Como puede observarse, el efecto global del hidrógeno es, en todos ellos similar, con un desplazamiento de la curva da/dN vs ΔK de forma prácticamente paralela, alcanzándose velocidades de propagación un orden de magnitud más elevadas que al aire para valores de ΔK bajos (inferiores a $40 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$). No obstante, la pendiente de las curvas, sobre todo las correspondientes a los aceros estructurales, parece suavizarse conforme se alcanzan valores de ΔK más elevados. Esto podría deberse a que, alcanzados ciertos valores de velocidad de crecimiento, el tiempo del que dispone el hidrógeno para difundir hacia la zona de proceso no sea el suficiente como para alcanzar la concentración de hidrógeno requerida.

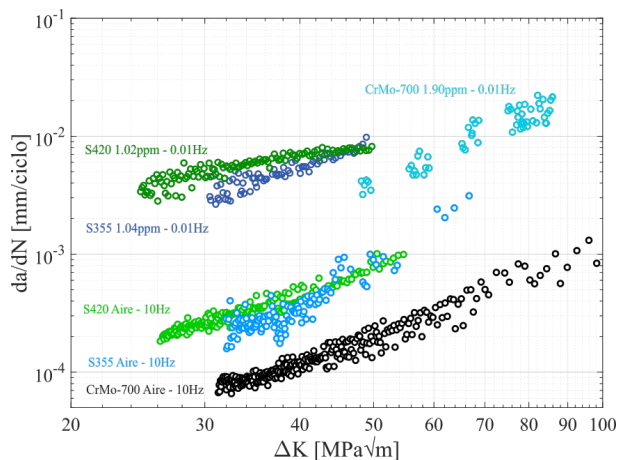


Figura 4. Curvas crecimiento de grieta por fatiga al aire y en ambiente salino ($i=0.02 \text{ mA/cm}^2$ y $f=0.01 \text{ Hz}$).

En este sentido, veamos ahora el efecto de la frecuencia de ensayo cuando se mantiene la densidad de corriente utilizada. Así, la Figura 5.a) recoge el efecto de la frecuencia de ensayo (1 Hz, 0.1 Hz y 0.01 Hz) en el acero CrMo700 ensayado en medio salino a una densidad de 0.2 mA/cm^2 . Como puede observarse, cuando se utiliza una frecuencia de 1 Hz, la velocidad de propagación para ΔK bajos es mayor que la del aire, pero esa diferencia va disminuyendo conforme la grieta crece, hasta que ambas curvas confluyen a valores de ΔK de unos $50 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. Si se utiliza una frecuencia 10 veces más lenta ($f=0.1 \text{ Hz}$), la curva da/dN se desplaza hacia valores más elevados y muestra una mayor pendiente, pero de nuevo se advierte una tendencia a confluir con la obtenida al aire para

valores de ΔK elevados. De hecho, no es hasta que se aplica una frecuencia de 0.01 Hz cuando la curva obtenida en ambiente de hidrógeno alcanza los mayores valores de crecimiento y se mantiene paralela a la obtenida al aire, resultado que parece indicar que, al menos para valores de ΔK elevados, es necesario bajar hasta esta frecuencia para obtener un comportamiento representativo de un escenario real. Esta misma respuesta se observó en el mismo acero bajo una concentración mayor de hidrógeno (1.23ppm, Figura 5.b). No obstante, en este caso, la mayor concentración de hidrógeno inicial hace que las velocidades de crecimiento para valores de ΔK bajos sean prácticamente coincidentes sea cual sea la frecuencia utilizada, mientras que la pendiente de las curvas se va incrementando conforme decrece la frecuencia de ensayo y no es hasta que se alcanza una frecuencia de 0.01 Hz que la curva obtenida en hidrógeno discurre paralela a la del aire.

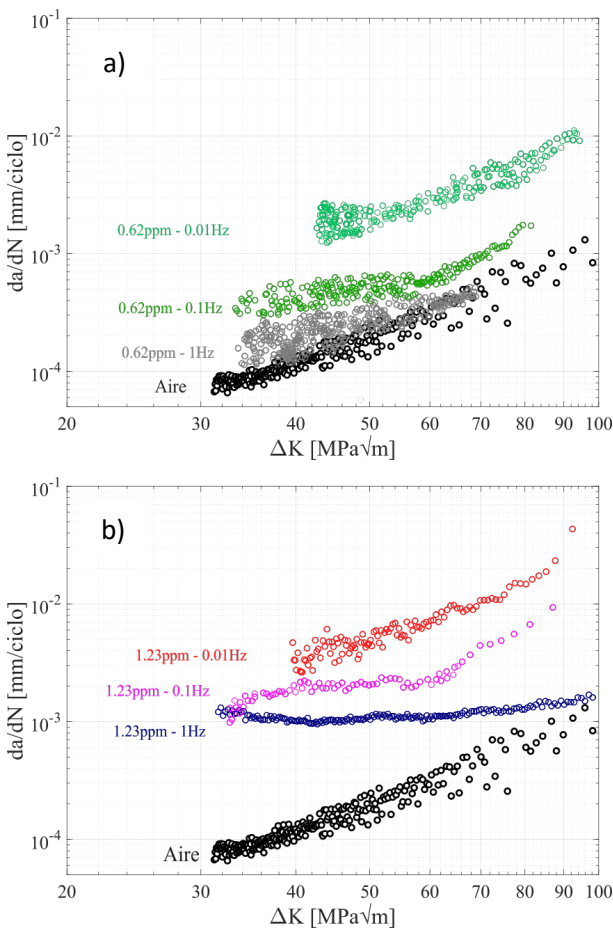


Figura 5. Curvas da/dN vs ΔK del CrMo700, al aire y en ambiente electroquímico de hidrógeno, a) salino y b) ácido

Observado este comportamiento, y a la vista de que las curvas correspondientes a los dos aceros estructurales también parecía suavizarse para valores de ΔK elevados incluso utilizando una frecuencia de 0.01 Hz, se decidió reducir la frecuencia un orden de magnitud más para analizar su impacto. Como muestra la Figura 6, tanto el acero S355 (Fig. 6.a)), como el S420 (Fig. 6.b)) experimentaron un incremento en las velocidades de propagación de grieta al utilizar la nueva frecuencia, de

modo que, a medida que la frecuencia disminuye en la región de valores altos de ΔK , las pendientes de las curvas en ambiente de hidrógeno se asemejan a las obtenidas al aire.

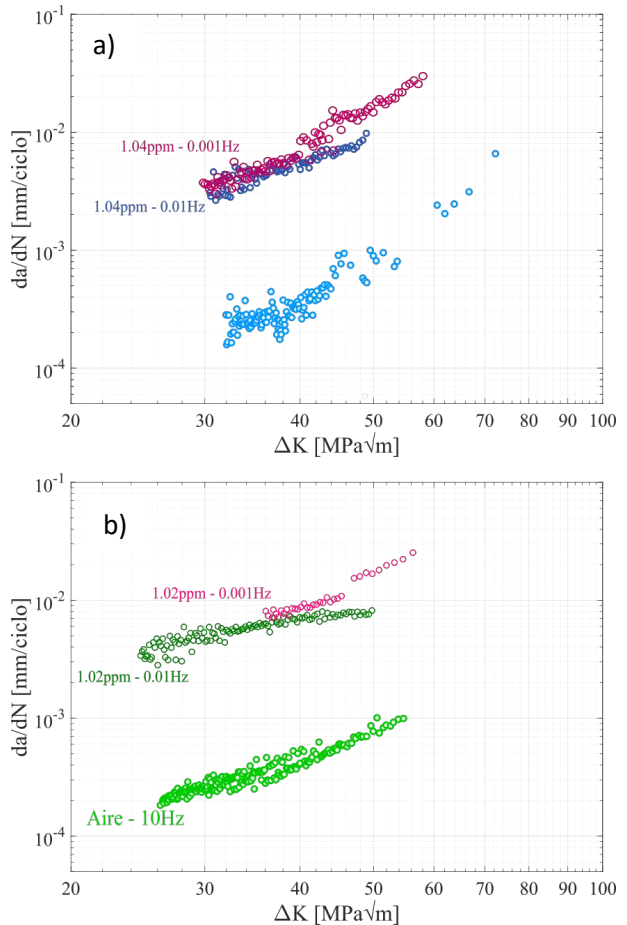


Figura 6. Curvas da/dN vs ΔK al aire y en ambiente electroquímico de hidrógeno: (a) S355 y (b) S420.

Estos comportamientos evidencian el efecto conjunto de la concentración, la frecuencia y del tiempo disponible entre ciclo y ciclo (velocidad de crecimiento) en las curvas da/dN vs ΔK obtenidas mediante ensayos electroquímicos. Además, este efecto dependerá del coeficiente de difusión del material analizado.

No obstante, lo que sí parece advertirse es que alcanzada una concentración de hidrógeno límite (1.23 ppm para el CrMo700 y 1.02-1.03 ppm para los aceros estructurales) y valores de ΔK bajos, la velocidad de propagación es la misma sea cual sea la frecuencia aplicada, de modo que, de cara a establecer una metodología de ensayo óptima, podríamos utilizar frecuencias más elevadas para valores de ΔK bajos, y conforme la velocidad de propagación fuese aumentando los valores de frecuencia utilizados deberían ir disminuyendo hasta la frecuencia límite (0.01 Hz para el CrMo700 y 0.001 Hz para los aceros estructurales).

Obviamente la concentración a utilizar sería la correspondiente a la situación real a analizar, y se conseguiría ajustando correctamente los parámetros electroquímicos. En cuanto a la frecuencia a utilizar, ésta

podría ajustarse en función de ΔK , teniendo en cuenta que el hidrógeno se concentrará en la zona de mayor tensión hidrostática y ésta se encuentra a una distancia del frente de grieta aproximadamente igual a dos veces del CTOD (δ) y por tanto:

$$x_{\sigma \max} = 2 \frac{K^2}{mE\sigma_y} \quad (1)$$

Donde m es igual a 1 en condiciones de tensión plana y 2 en deformación plana. Considerando condiciones de tensión plana (el espesor de las probetas es de 10 mm), podríamos calcular la distancia del frente de grieta a la que se encontrará dicha zona para 3 valores de $K_{\max}$. En la Tabla 3 se recogen esos valores para el caso del acero CrMo700. Por su parte, el tiempo necesario para recorrer esa distancia puede calcularse, de forma aproximada utilizando la ecuación (2), donde D es el coeficiente de difusión del acero. Los resultados obtenidos también se recogen en la Tabla 3.

$$x = 4 \cdot \sqrt{Dt} \quad (2)$$

Tabla 3. Distancias y tiempos de difusión para el CrMo700

K (MPa√m)	30	45	60
X _{cmax}	14.5μm	35.5μm	58 μm
t (s)	1.05	36.5	116
f (Hz)	0.95	0.12	0.06

Como puede verse, si la concentración es la suficiente (1.2 ppms, figura 5) para valores de ΔK inferiores a 30 MPa√m bastaría una frecuencia de 1 Hz para asegurar que el flujo de hidrógeno alcanza la zona de proceso. Sin embargo para ΔK intermedios (45 MPa√m) la frecuencia a utilizar debería ser de aproximadamente 0.1 Hz y por debajo de 0.06Hz para ΔK superiores a 60 MPa√m, lo que coincide exactamente con lo recogido en la figura 5)..

5. TRATAMIENTO DE DATOS

Con el objetivo de minimizar la dispersión de resultados de los ensayos experimentales, se ha aplicado el filtrado de datos descrito en el apartado de metodología. Tras dicho filtrado, las curvas se ajustaron a la Ley de Paris ($da/dN=C \cdot \Delta K^m$) resultando los parámetros C y m que se recogen en la Tabla 4.

Tabla 4. Parámetros Ley de Paris para cada ensayo.

Condiciones	C [mm/ciclo]	m
42CrMo4 - 700		
Aire	1.00E-08	2.46
1 Hz – 0.62 ppm	1.00E-06	1.41
0.1 Hz – 0.62 ppm	2.00E-07	2.01
0.01 Hz – 0.62 ppm	8.00E-07	2.02
0.01 Hz – 0.97 ppm	6.00E-07	2.09
0.01 Hz – 1.9 ppm	2.00E-08	3.04
1 Hz – 1.23 ppm	1.00E-04	0.55
0.1 Hz – 1.23 ppm	4.00E-05	1.05
0.01Hz – 1.23 ppm	3.00E-07	2.46
0.1 Hz – 1.64 ppm	6.00E-06	1.46

S 355		
Aire	3.00E-09	3.50
0.01Hz – 1 ppm	5.00E-07	2.60
0.001Hz – 1 ppm	4.00E-07	2.69
S 420		
Aire	4.00E-08	2.51
0.01Hz – 1 ppm	4.00E-05	1.45
0.001Hz – 1 ppm	1.00E-06	2.44

6. CONCLUSIONES

Las condiciones más agresivas en los ensayos con hidrógeno electroquímico se aseguran con altas concentraciones y bajas frecuencias. Estas condiciones favorecen una mayor velocidad de propagación de grietas favoreciendo la cinética de adsorción.

La microestructura de cada material influye en la propagación de grieta, modulando su sensibilidad a la frecuencia a través del coeficiente de difusión, que determina la eficiencia del transporte de hidrógeno hacia la zona de proceso. Esta tendencia se estabiliza al alcanzar una concentración límite asociada a la saturación.

Para una determinada concentración de hidrógeno la frecuencia de carga juega un papel determinante en el crecimiento de las grietas, debiendo ajustarla si es necesario, en función de la velocidad de crecimiento.

Por su parte, si la concentración de hidrógeno es suficiente, la frecuencia de ensayo no afecta a la velocidad de crecimiento de grietas para valores bajos de ΔK .

AGRADECIMIENTOS

Al Ministerio de Economía y Competitividad por la financiación recibida en el marco del proyecto PID2021-124768OB-C22. A los Servicios Científico-Técnicos de la Universidad de Oviedo por el uso del MEB.

REFERENCIAS

- [1] R. Delaporte-Mathurin et al., “Parametric study of hydrogenic inventory in the ITER divertor based on machine learning,” Sci. Rep., doi: 10.1038/s41598-020-74844-w
- [2] ISO108 Metallic materials – Fatigue Crack Growth Method
- [3] V. Arniella et al., “Comparative study of embrittlement of quenched and tempered steels in hydrogen environments,” Int. J. Hydrogen Energy, doi: 10.1016/j.ijhydene.2022.03.203.

CARACTERIZACIÓN DE CURVAS S-N EN LAMINADOS DE CFRP CON DISTINTAS CALIDADES DE TALADRADO UTILIZANDO TERMOGRAFÍA INFRARROJA

J.V. Calvo^{1*}, N. Feito¹, M.H. Miguelez², E. Giner¹

¹ Instituto Universitario de Ingeniería Mecánica y Biomecánica-I2MB – Departamento de Ingeniería Mecánica y de Materiales, Universitat Politècnica de València, Valencia 46022, España

² Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad Carlos III de Madrid, Leganés 28911, España

* Persona de contacto: jocalor@upv.es

RESUMEN

En este trabajo, se presenta una metodología para caracterizar el comportamiento a fatiga de probetas de polímero reforzado con fibra de carbono (CFRP) que presentan un agujero taladrado. En el estudio se distinguen dos calidades diferentes del agujero en función del daño generado durante el proceso de mecanizado. En un primer paso se realizaron ensayos de fatiga a tres niveles de carga distintos para obtener las curvas S-N tradicionales. Al mismo tiempo, se empleó una cámara termográfica infrarroja (IRT) para monitorizar la evolución de la temperatura durante la carga cíclica. El segundo paso consiste en aplicar una metodología de predicción de vida a fatiga de la probeta basada en los cambios de temperatura observados durante la carga cíclica. Durante el procedimiento, se analiza la pendiente inicial de la etapa I de la curva de evolución de temperatura, y la temperatura estable en la etapa II. Utilizando esta información de la respuesta térmica, finalmente se estiman las curvas S-N, mostrando un error respecto a las curvas originales menor al 2%. Los resultados demuestran que la combinación de predicciones basadas en IRT con técnicas de modelado avanzadas proporciona un enfoque fiable y eficiente para evaluar la vida a fatiga de laminados de CFRP taladrados, al mismo tiempo que ofrecen un ahorro de tiempo significativo en comparación con los procedimientos convencionales de ensayo.

PALABRAS CLAVE: Fatiga, CFRP, termografía infrarroja, taladrado.

ABSTRACT

This work presents a methodology for characterizing the fatigue behavior of carbon fiber-reinforced polymer (CFRP) specimens with a drilled hole. The study differentiates between two hole qualities based on the damage generated during the machining process. In the first step, fatigue tests were conducted at three different load levels to obtain traditional S-N curves. Simultaneously, an infrared thermographic camera (IRT) was used to monitor temperature evolution during cyclic loading. The second step involves applying a fatigue life prediction methodology based on the temperature changes observed during cyclic loading. This procedure analyzes the initial slope of Stage I in the temperature evolution curve and the steady-state temperature in Stage II. Using this thermal response data, S-N curves were estimated, showing an error of less than 2% compared to the original curves. The results demonstrate that combining IRT-based predictions with advanced modeling techniques provides a reliable and efficient approach for evaluating the fatigue life of drilled CFRP laminates, while also offering significant time savings compared to conventional testing procedures.

KEYWORDS: Fatigue, CFRP, infrared thermography, drilling.

1. INTRODUCCIÓN

Los laminados poliméricos reforzados con fibras de carbono (CFRP, por sus siglas en inglés) son materiales ampliamente utilizados en aplicaciones estructurales de alta exigencia, como la industria aeroespacial y la automotriz, debido, entre otras ventajas, a su excelente relación entre resistencia y peso [1]. Sin embargo, la necesidad de realizar uniones mecánicas en estos materiales implica el mecanizado de agujeros mediante taladrados que permitan el ensamblaje de los componentes. Este proceso introduce concentradores de

tensiones que pueden comprometer el comportamiento a fatiga del componente generando un fallo prematuro de la estructura [2]. En este contexto, comprender y predecir la vida útil de componentes CFRP taladrados bajo cargas cíclicas es crucial para garantizar la seguridad y durabilidad de las estructuras [3].

Tradicionalmente, las curvas S-N se han utilizado como una herramienta estándar para evaluar el comportamiento a fatiga de los materiales. Sin embargo, este enfoque requiere la realización de un gran número de ensayos que resultan costosos y consumen mucho tiempo [4]. Sin

embargo, en los últimos años la termografía infrarroja ha emergido como una técnica complementaria a los procedimientos tradicionales para evaluar el daño acumulado durante los ensayos dinámicos [5]. Diversos estudios han demostrado que los modelos termográficos permiten estimar parámetros clave de fatiga con mayor rapidez [6], pero su aplicación en materiales CFRP taladrados aún presenta desafíos significativos. En particular, es necesario validar la precisión de estos modelos en condiciones de servicio representativas.

La termografía infrarroja se ha consolidado como una técnica eficaz para la evaluación del daño por fatiga en materiales metálicos y compuestos. En el caso de los metales, estudios pioneros como el de Luong [7] demostraron que la disipación de energía térmica es una manifestación sensible del daño, sentando las bases para el desarrollo de metodologías basadas en la evolución de la temperatura en el material bajo cargas cíclicas. Posteriormente, Crupi [8] consiguió establecer una relación exponencial entre la temperatura alcanzada en fase estacionaria y la carga aplicada, mientras que Fargione *et al.* [9] propusieron un procedimiento para estimar la curva de fatiga completa mediante parámetros térmicos, reduciendo significativamente el tiempo de ensayos para la caracterización del comportamiento en fatiga de los materiales. Otros autores, como Risitano *et al.* [10], han señalado la importancia de considerar parámetros energéticos en la evaluación del daño acumulado, destacando que modelos clásicos como el de Palmgren-Miner pueden subestimar el deterioro real. En esta misma línea, Meneghetti [11] y Meneghetti y Ricotta [12] han empleado la energía calorífica disipada y la pérdida de calor específica como indicadores del daño por fatiga en aceros, validando la aplicabilidad de estos enfoques en distintos tipos de materiales y geometrías. Adicionalmente, Jang y Khonsari [13] introdujeron el concepto de entropía de fatiga de fractura para analizar la fatiga de ciclo bajo y ciclo alto, mientras que Zhang *et al.* [14] demostraron que la vida a fatiga en ciclo alto puede estimarse con precisión midiendo la pendiente inicial del calentamiento térmico en los primeros ciclos del ensayo.

En materiales compuestos, la aplicación de la termografía para evaluar la fatiga ha seguido un desarrollo similar. En el estudio de Montesano *et al.* [15], se utilizó una técnica similar a la de Fargione [9] para determinar el umbral de fatiga y la curva *S-N* en laminados CFRP tejidos, demostrando su precisión en la identificación de límites de resistencia. Naderi *et al.* [16] caracterizaron la disipación de energía y la degradación en laminados vidrio/epoxi, observando que la evolución térmica es un buen indicador de la progresión del daño en estos materiales. Liakat y Khonsari [17] confirmaron la existencia de una correlación lineal entre la tasa de incremento de temperatura y la energía disipada por histéresis, reforzando la validez del enfoque termográfico en materiales compuestos. Finalmente, Huang *et al.* [18] propusieron un modelo general para la predicción de la vida en fatiga de CFRP, combinando la degradación de

la rigidez y el análisis térmico, lo que permitió obtener curvas *S-N* completas en un tiempo significativamente reducido. Estos estudios han consolidado el uso de la termografía como una herramienta fundamental en la caracterización de la fatiga en materiales compuestos, proporcionando métodos rápidos y eficientes para la predicción de su vida útil.

El presente trabajo tiene como objetivo principal comparar las curvas *S-N* obtenidas mediante ensayos tradicionales con aquellas derivadas a partir de datos termográficos en laminados CFRP con agujeros abiertos utilizando las metodologías de Crupi [8] y Huang [18]. Para ello, se han realizado ensayos cíclicos en probetas taladradas mientras se monitoriza su temperatura superficial mediante una cámara infrarroja. Posteriormente, se aplicaron las dos metodologías tratar los datos térmicos para obtener las curvas *S-N* y compararlas con el procedimiento tradicional. Este enfoque busca no solo validar la viabilidad de la termografía infrarroja como herramienta predictiva, sino también optimizar el tiempo y los recursos necesarios para caracterizar este tipo de materiales.

2. MATERIALES

El material seleccionado para este estudio es un laminado cuasi-isótropo simétrico compuesto por 54 láminas con orientaciones de 0°, 90°, 45° y -45°, y un espesor global de 9.7 mm. Esta configuración corresponde a un laminado de gran espesor empleado en la industria aeronáutica, con un volumen de fibra del 66%. Las probetas, con dimensiones de 150 mm de longitud y 25 mm de ancho, se obtuvieron a partir de placas mediante corte por chorro de agua. Posteriormente, se taladraron en su centro con una broca de 9.53 mm de diámetro. La Figura 1 muestra un esquema de la geometría de las probetas CFRP utilizadas en los ensayos.

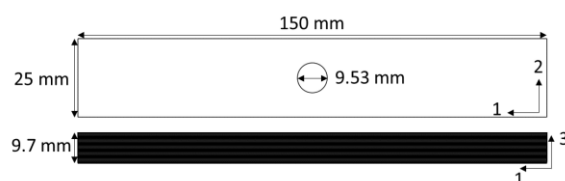


Figura 1. Dimensiones de las probetas ensayadas.

Las probetas se dividieron en dos grupos según las condiciones de corte empleadas durante el taladrado. El primer grupo (denominado A) fue mecanizado a 1337 rpm con una velocidad de avance de 0.05 mm/rev, generando una delaminación controlada, como se observa en la Figura 2(a). En contraste, el segundo grupo (denominado B) fue perforado a 1590 rpm con un avance de 0.1 mm/rev, lo que provocó un mayor daño en la salida del agujero, tal como se aprecia en la Figura 2(b). Además de la delaminación en la salida, en estas muestras también se observan grietas que se propagan desde el orificio en la dirección de la lámina de 45°, producto del arranque de algunas fibras.

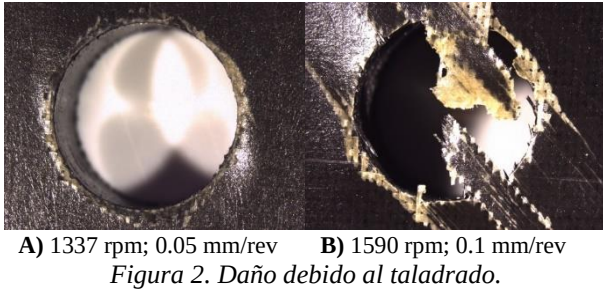


Figura 2. Daño debido al taladrado.

El daño en la salida de los agujeros mecanizados se cuantificó mediante el factor de delaminación (F_d), definido como el cociente entre el área dañada en la superficie y el área nominal del orificio. Para su determinación, se empleó una lupa óptica con la que se midió el área afectada. El valor de F_d promedio obtenido para el grupo A fue de 1.26, que corresponde a las probetas taladradas con condiciones de corte menos agresivas, y de 2.64 para el grupo B, que fueron mecanizadas a mayor velocidad. Se observa que el factor de delaminación en las probetas del lote B es aproximadamente el doble que en las del lote A, lo que indica un mayor daño debido a las condiciones de corte más exigentes.

3. METODOLOGÍA

La metodología empleada sigue las directrices de la norma ASTM D7615-19 [19] para ensayos de fatiga a tracción en polímeros reforzados con orificios. Antes de los ensayos de fatiga, se realizaron pruebas de tracción estática para determinar la carga de rotura del laminado perforado en el grupo A (taladrado nominal de referencia con menor factor de delaminación), estableciendo un valor aproximado de 71 kN. A partir de este resultado, se definieron los niveles de carga para los ensayos de fatiga. Se aplicaron tres niveles de carga a cada grupo de probetas: 43 kN, 50 kN y 60 kN, todos con una relación de carga $R = 0$. Estos valores representan el 60%, 70% y 85% de la carga de rotura estática. Los ensayos se realizaron a una frecuencia de 5 Hz utilizando una máquina de ensayos hidráulica INSTRON 8801, equipada con una célula de carga de 100 kN. La configuración experimental se muestra en la Figura 3.

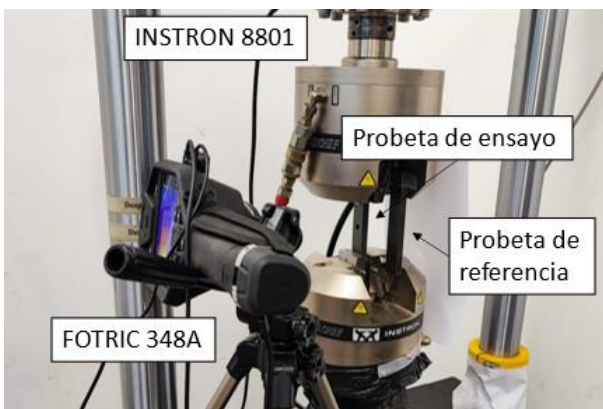


Figura 3. Montaje de ensayos de fatiga.

En esta misma figura se muestra una cámara térmica infrarroja FOTRIC 348A, empleada para monitorear la evolución de la temperatura en la superficie de las probetas durante los ensayos de fatiga. Esta cámara cuenta con una resolución de 640×480 píxeles y una sensibilidad térmica de 30 mK. Dada la geometría de las probetas, el punto de mayor temperatura se localiza en el interior del orificio, por lo que la cámara se posicionó con una ligera inclinación respecto al plano superior de la muestra para optimizar la captura de esta zona.

En la Figura 3 se observa también una probeta de referencia del mismo material, situada junto a la muestra en ensayo. Esta probeta se fijó únicamente por su extremo inferior, dejando el extremo superior libre, lo que impide que esté sometida al ciclo de carga. El propósito de esta configuración es registrar la evolución de la temperatura ambiente en la probeta de referencia para compensar posteriormente esta variación en el análisis de datos. De este modo, se pudo determinar con precisión el incremento de temperatura atribuible exclusivamente al ensayo mecánico.

Durante un ensayo de fatiga, la evolución típica de la temperatura en la superficie de la probeta sigue tres fases bien diferenciadas. En la primera fase, se observa un aumento rápido de la temperatura debido a la disipación inicial de energía en forma de calor, producto de la acomodación interna del material y la fricción entre fibras y matriz. A continuación, en la segunda fase, la temperatura alcanza un estado estacionario y se mantiene relativamente estable durante la mayor parte de la vida del componente, con ligeras variaciones debidas a la acumulación progresiva de daño. Finalmente, en la tercera fase, poco antes de la rotura, la temperatura vuelve a incrementarse rápidamente como resultado de la aceleración de degradación del material y la propagación final del daño.

Varios autores han estudiado la relación entre la temperatura en la fase estacionaria del ensayo de fatiga y la carga aplicada. Por ejemplo, Crupi *et al.* [8] propone una función exponencial para la evolución del incremento de temperatura ΔT en las fases 1 y 2 (Ecuación 1) con respecto a los ciclos N .

$$\Delta T(N) = \Delta T_{\text{estable}} \left(1 - e^{-\frac{N}{\tau}} \right) \quad (1)$$

En esta ecuación $\Delta T_{\text{estable}}$ es el incremento de temperatura alcanzada en fase 2 y τ es una constante, de forma que si $N = \tau$ obtenemos $\Delta T = 0.63 \Delta T_{\text{estable}}$. Además, el incremento de temperatura estable también lo relaciona con las cargas aplicadas $\Delta \sigma$ mediante otra función exponencial (Ecuación 2) donde A y x son constantes calibradas experimentalmente.

$$\Delta T_{\text{estable}} = A \Delta \sigma^x \quad (2)$$

Por otro lado, autores como Huang *et al.* [18] han desarrollado modelos que relacionan esta temperatura con el número de ciclos a la rotura N_f , basándose en la degradación progresiva de las propiedades del material durante el ensayo de fatiga. El modelo se define en la Ecuación 3 donde q y p son constantes ajustadas de forma experimental, y k_f es la rigidez normalizada en N_f . Este valor se supone constante, por lo que se puede agrupar todo el término $\frac{1-k_f}{p}$ como una constante que calibrar de los datos experimentales.

$$\Delta T_{\text{estable}} N_f^{1/q} = \frac{1 - k_f}{p} = \text{constante} \quad (3)$$

Estos enfoques permiten estimar la vida en fatiga de los materiales compuestos a partir de la evolución térmica, proporcionando una herramienta alternativa para la caracterización del comportamiento en servicio.

4. RESULTADOS

4.1. Obtención de las curvas S-N tradicionales

Para cada nivel de carga establecido, se ensayaron dos probetas del lote A y dos del lote B, siendo un total de seis muestras por lote. Según la norma ASTM [19], el número de probetas ensayadas en cada grupo es suficiente para estimar la curva S-N que describe el comportamiento a fatiga del laminado. En la Figura 4 se presentan las curvas obtenidas para las probetas con mayor y menor daño debido al proceso de taladrado. La banda horizontal superior en gris oscuro representa el límite de rotura del material bajo carga de tracción cuasi-estática, mientras que las líneas discontinuas indican la dispersión característica del fallo por fatiga.

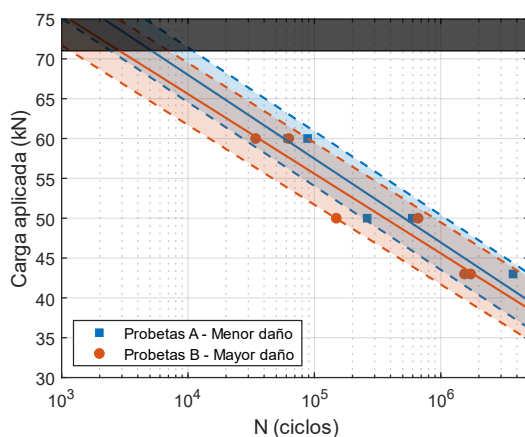


Figura 4. Curvas S-N.

Al comparar ambos grupos, se observa que las probetas con mayor daño (grupo B) alcanzan un número de ciclos ligeramente inferior al de las probetas con menor daño (grupo A), con una reducción media del 3.2% para un mismo nivel de carga. Esta diferencia se encuentra dentro del rango habitual de dispersión en la estimación de

curvas S-N para materiales compuestos similares. Esto se explica por el espesor considerable del laminado (9.7 mm). Mientras que el mayor daño inducido por el taladrado se localiza en las láminas externas, las láminas internas, que representan el 95% del material, no presentan apenas daño en ambos grupos, obteniendo un comportamiento globalmente similar en ambos casos.

4.2. Ajuste experimental de las curvas S-N mediante termografía

Como ya se ha comentado, la evolución de la temperatura máxima de las probetas durante los ensayos de fatiga se monitoriza mediante una cámara térmica. Para la estimación de la temperatura estable en la fase estacionaria del ensayo (fase II), se aplica el modelo de la Ecuación 1 en los primeros 7.000 ciclos, una vez alcanzada la estabilidad térmica. Este comportamiento puede observarse en las Figuras 5(a) y 5(b). Con el valor obtenido es posible ajustar las dos constantes A y x de la Ecuación 2 para relacionar el incremento de temperatura en función de la carga aplicada. Esta curva se muestra en la Figura 6. En este caso sí se puede observar una tendencia algo más elevada de la temperatura en las probetas más dañadas bajo cargas elevadas.

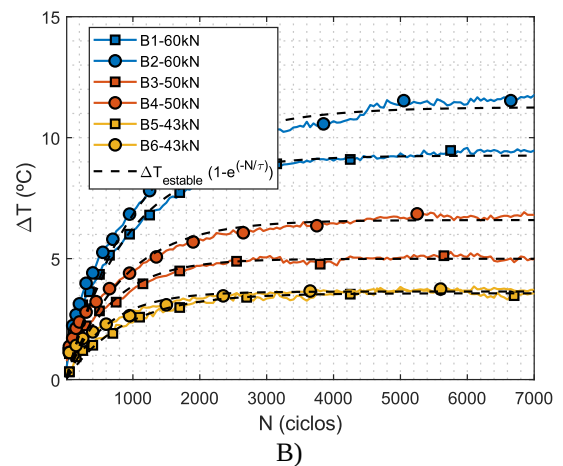
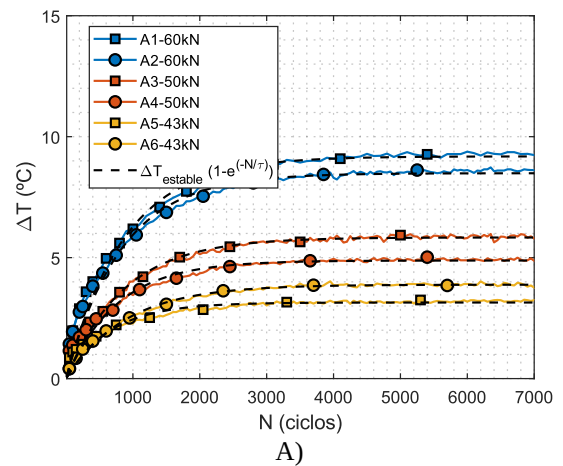


Figura 5. Curvas ΔT-N.

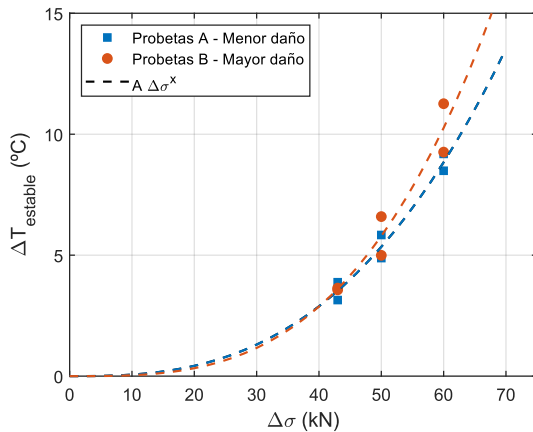


Figura 6. Curvas $\Delta T_{estable}-\Delta \sigma$.

El último paso consiste en establecer una relación entre la temperatura estable alcanzada en la fase 2 y el número de ciclos a rotura, para lo cual se aplica la Ecuación 3. Los resultados se presentan en la Figura 7, donde se observa cómo la temperatura puede utilizarse como un parámetro predictor de la vida en fatiga del material. Además, las curvas obtenidas para las dos calidades son casi idénticas, lo que refuerza que tanto la temperatura estable como a la vida en fatiga están relacionadas. En consecuencia, las probetas con mayor daño presentan temperaturas más elevadas y una menor durabilidad, mientras que aquellas con menor daño mantienen temperaturas más bajas y resisten un mayor número de ciclos antes de la rotura. Este efecto hace que la misma curva valga para ambos casos, ya que la diferencia entre las probetas más dañadas y las menos dañadas será captado por las curvas de la Figura 6.

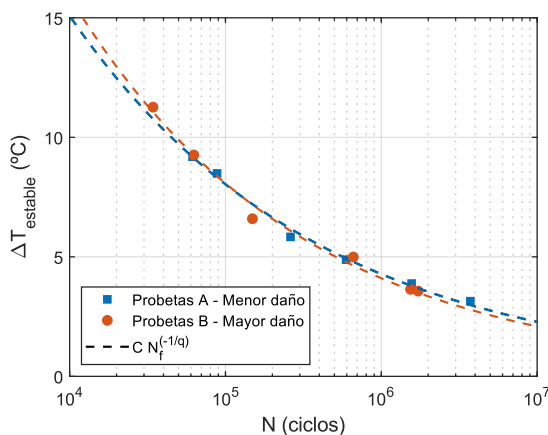


Figura 7. Curvas $\Delta T_{estable}-N$.

4.3. Comparativa de las curvas S-N

Una vez ajustadas las curvas mediante el análisis termográfico, se procede a compararlas con las obtenidas por el método tradicional. En la Figura 8 se observa que ambas metodologías muestran unos resultados muy aproximado, con un error promedio del 2% en las

probetas del grupo A y del 1.6% en las probetas del grupo B. Estos valores se encuentran dentro de la desviación esperable en este tipo de estudios, lo que valida el enfoque termográfico como una alternativa eficaz para la caracterización de la fatiga del material. Se observa una mayor dispersión en la zona de bajos ciclos, aunque esta corresponde a una región próxima al fallo estático, por lo que su impacto en la evaluación global es menos significativo.

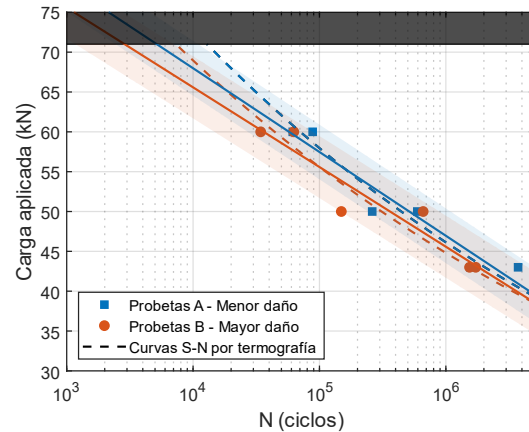


Figura 8. Comparativa de curvas S-N.

5. CONCLUSIONES

En este estudio se ha caracterizado el comportamiento a fatiga de laminados de CFRP con agujeros con diferentes niveles de daño inducido por el proceso de taladrado. A partir de los ensayos experimentales, se han obtenido curvas S-N mediante un procedimiento tradicional y se ha comparado con las curvas obtenidas mediante un enfoque basado en termografía infrarroja. Las principales conclusiones se presentan a continuación:

Se ha observado que las condiciones de corte de taladrado influyen en el nivel de daño de las láminas externas en torno al agujero generado. Las probetas con mayor daño (grupo B) presentan una reducción en la vida en fatiga respecto a las probetas con menor daño (grupo A), aunque esta diferencia es relativamente pequeña (~2.8%), debido a que el daño inducido se concentra en las láminas externas del laminado permaneciendo la gran parte de las láminas intactas.

Se han validado dos modelos predictivos basados en el incremento de temperatura del material con el número de ciclos. En ambos casos, se ha comprobado que los modelos con capaces de predecir las tendencias establecidas de forma precisa.

A partir de la combinación de estos modelos, se han obtenido las curvas S-N para probetas CFRP taladradas de gran espesor. Las curvas obtenidas mediante el modelo final basado en datos termográficos, presentan una excelente correlación con las curvas S-N obtenidas por el método convencional, con errores del 2% en las probetas A y del 1.6% en las probetas B, siendo estas desviaciones aceptables.

Para mejorar la precisión del método, se plantea la realización de ensayos adicionales con un mayor número de probetas para ampliar la base de datos experimental. Además, se propone evaluar otros modelos termográficos para la estimación del límite de fatiga y estudiar nuevas condiciones de taladrado con el objetivo de analizar una gama más amplia de calidades de mecanizado.

Este estudio demuestra que la termografía infrarroja es una herramienta eficaz y fiable para la caracterización de la fatiga en laminados de CFRP.

AGRADECIMIENTOS

Esta publicación es parte del proyecto de I+D+i PID2023-151610OB-C22, financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033/ y “FEDER Una manera de hacer Europa”. Ayuda PRE2018-086277 financiada por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y por “FSE Invierte en tu futuro”.

REFERENCIAS

- [1] C. Borges, A. Chicharo, A. Araújo, J. Silva, R.M. Santos. *Designing of carbon fiber-reinforced polymer (CFRP) composites for a second-life in the aeronautic industry: strategies towards a more sustainable future*, *Frontiers in Materials*, 10 (2023) 119270
- [2] S. Sudarsono, K. Ogi. *Fatigue Behavior of Open-Holed CFRP Laminates with Initially Cut Fibers*, *Open Journal of Composite Materials*, 7 (2017) 49-62
- [3] P. Alam, D. Mamalis, C. Robert, C. Floreani, C.M. Ó Brádaigh. *The fatigue of carbon fibre reinforced plastics - A review*, *Composites Part B: Engineering*, 166 (2019) 555–579
- [4] A.P. Vassilopoulos, T. Keller. *Fatigue of Fiber-reinforced Composites*, Springer London, (2011)
- [5] A.P. Chrysafi, N. Athanasopoulos, N.J. Siakavellas. *Damage detection on composite materials with active thermography and digital image processing*, *International Journal of Thermal Sciences*, 116 (2017) 242-253
- [6] M. Zaeimi, R. De Finis, D. Palumbo, U. Galietti. *Fatigue limit estimation of metals based on the thermographic methods: A comprehensive review*, *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 47(3) (2024) 611-646
- [7] M.P. Luong. *Fatigue limit evaluation of metals using an infrared thermographic technique*, *Mechanics of Materials*, 28 (1998) 155-163
- [8] V. Crupi. *An Unifying Approach to assess the structural strength*, *International Journal of Fatigue*, 30(7) (2008) 1150–1159
- [9] G. Fargione, A. Geraci, G. La Rosa, A. Risitano. *Rapid determination of the fatigue curve by the thermographic method*, *International Journal of Fatigue*, 24(1) (2022) 11-19
- [10] A. Risitano, G. Risitano. *Cumulative damage evaluation in multiple cycle fatigue tests taking into account energy parameters*, *International Journal of Fatigue*, 48 (2013) 214–222
- [11] G. Meneghetti. *Analysis of the fatigue strength of a stainless steel based on the energy dissipation*, *International Journal of Fatigue*, 29(1) (2007) 81–94
- [12] G. Meneghetti, M. Ricotta. *The use of the specific heat loss to analyse the low- and high-cycle fatigue behaviour of plain and notched specimens made of a stainless steel*, *Engineering Fracture Mechanics*, 81 (2012) 2–16
- [13] J.Y. Jang, M.M. Khonsari. *On the evaluation of fracture fatigue entropy*, *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 96 (2018) 351–361
- [14] L. Zhang, X.S. Liu, S.H. Wu, Z.Q. Ma, H.Y. Fang. *Rapid determination of fatigue life based on temperature evolution*, *International Journal of Fatigue*, 54 (2013) 1–6
- [15] J. Montesano, Z. Fawaz, H. Bougherara. *Use of infrared thermography to investigate the fatigue behavior of a carbon fiber reinforced polymer composite*, *Composite Structures*, 97 (2013) 76-83
- [16] M. Naderi, A. Kahirdeh, M.M. Khonsari. *Dissipated thermal energy and damage evolution of Glass/Epoxy using infrared thermography and acoustic emission*, *Composites Part B: Engineering*, 43(3) (2012) 1613–1620
- [17] M. Liakat, M.M. Khonsari. *Analysis and life prediction of a composite laminate under cyclic loading*, *Composites Part B: Engineering*, 84 (2016) 98–108
- [18] J. Huang, M.L. Pastor, C. Garnier, X.J. Gong. *A new model for fatigue life prediction based on infrared thermography and degradation process for CFRP composite laminates*, *International Journal of Fatigue*, 120 (2019) 87–95
- [19] ASTM D7615/D7615M-19. *Standard Practice for Open-Hole Fatigue Response of Polymer Matrix Composite Laminates*, *Am. Stand. Test. Methods*, 1 (2011) 1–8

COMPORTAMIENTO A FATIGA DE UNIONES ATORNILLADAS PRETENSADAS GALVANIZADAS EN CALIENTE: INFLUENCIA DE LA GEOMETRÍA Y LAS CONDICIONES DE PRETENSADO

D. Díaz-Salamanca ^{1*}, Antonín Kanaval ², M. Muñoz-Calvente ¹, F. Pelayo ¹, Jan Kanaval ²

¹ Universidad de Oviedo, Dpto. de Construcción e Ingeniería de Fabricación, Gijón 33203, Spain

² Faculty of Mechanical Engineering, Czech Technical University in Prague, Prague 16000, Czechia

* Persona de contacto: diazsdiego@uniovi.es

RESUMEN

En los últimos años, el uso de uniones atornilladas pretensadas sobre elementos galvanizados en caliente ha aumentado considerablemente en numerosas aplicaciones industriales, particularmente en la industria de generación solar y en sistemas de almacenamiento industrial. Este crecimiento se atribuye, entre otros factores, a su excelente resistencia a la corrosión y a la facilidad de montaje en servicio. Sin embargo, a pesar del interés creciente de la industria por este tipo de uniones, su comportamiento a fatiga aún no está contemplado en los estándares de diseño de referencia, lo que dificulta su correcto dimensionamiento. En este trabajo, se presenta una amplia campaña experimental realizada sobre estos detalles estructurales, evaluando distintas configuraciones geométricas, como agujeros ranurados y taladros, así como diferentes niveles de apriete. Los resultados obtenidos se comparan con la escasa literatura disponible y con las curvas S-N de las categorías de detalle más cercanas recogidas en la última versión de las normativas actuales. Este análisis crítico permite evaluar la aplicabilidad de dichas curvas y proporciona una base sólida para futuros desarrollos normativos.

PALABRAS CLAVE: Uniones atornilladas, Predicción vida a fatiga, Curvas S-N, Normativas de diseño.

ABSTRACT

In recent years, the use of hot-dip galvanised preloaded bolted joints has increased considerably in many industrial applications, particularly in the solar generation industry and in industrial storage systems. This growth is attributed, among other factors, to their excellent corrosion resistance and ease of assembly in service. However, despite the growing interest of the industry in this type of joints, their fatigue behaviour is still not contemplated in the reference design standards, which makes their correct dimensioning difficult. In this work, an extensive experimental campaign on these structural details is presented, evaluating different geometrical configurations, such as slotted holes and drilled holes, as well as different levels of tightening. The results obtained are compared with the scarce literature available and with the S-N curves of the closest detail categories included in the latest version of the current standards. This critical analysis allows the applicability of these curves to be assessed and provides a solid basis for future standard developments.

KEYWORDS: Bolted joints, Fatigue life prediction, S-N curves, Design standards.

1. INTRODUCCIÓN

En los últimos años, la necesidad de avanzar hacia una transición energética basada en fuentes de energía renovable, con el objetivo de reducir la huella de carbono, ha impulsado un despliegue masivo de tecnologías como la energía eólica y solar.

Este crecimiento ha llevado a la instalación de diferentes tipos de estructuras que deben soportar distintos escenarios de carga a lo largo de su vida útil sin comprometer su integridad estructural, lo que hace esencial la aplicación del enfoque de fatiga de vida segura ("safe-life approach") durante la fase de diseño de estas uniones críticas y detalles estructurales.

Además, la necesidad de desarrollar estructuras con un coste optimizado para la competitividad en un sector

altamente dinámico, ha llevado a la implementación de diseños cuyo comportamiento frente a fatiga aún no está contemplado en las normativas de diseño actuales, como la versión revisada del Eurocódigo 3 sobre fatiga [1].

Entre los detalles estructurales no regulados por las normas vigentes, destacan en el sector solar las uniones atornilladas pretensadas con colisos. Dichas uniones, son ampliamente utilizadas en la industria debido a sus ventajas prácticas significativas, como la posibilidad de un montaje más flexible en obra. Sin embargo, como se ha señalado en estudios previos [2-4], su comportamiento a fatiga sigue siendo en gran parte desconocido, especialmente en aquellas configuraciones que emplean chapas de acero conformadas en frío y galvanizadas en caliente, ampliamente utilizadas en la industria solar debido a sus buenas propiedades de resistencia a la corrosión.

Para abordar la actual laguna en el dimensionamiento de este tipo de uniones, el presente trabajo tiene como objetivo llevar a cabo una investigación experimental y numérica sobre estos detalles estructurales, incluyendo la realización tanto de ensayos experimentales estáticos para la determinación del coeficiente de deslizamiento de las uniones, como de fatiga para conocer su comportamiento dinámico. Además, se evalúan diversas configuraciones geométricas bajo diferentes niveles de pretensado con el objetivo de determinar su carga crítica a deslizamiento. Los ensayos de fatiga propuestos, son realizados utilizando cargas por debajo de dicho valor crítico, con el objetivo de determinar si la fatiga debe ser considerada en el análisis de estas uniones resistentes a deslizamiento. Los resultados experimentales obtenidos, se comparan con la curva S-N más cercana del Eurocódigo 3, dada la ausencia de curvas específicas para este tipo de uniones.

Además, se desarrollan modelos de elementos finitos para analizar el estado tensional inducido por el pretensado aplicado, sentando las bases para establecer criterios de deslizamiento y comportamiento a fatiga, considerando también la futura inclusión de los efectos de fatiga por fricción (fretting).

2. MATERIALES Y MÉTODOS

Esta sección presenta primero las propiedades químicas y mecánicas del material, seguida de la definición de las configuraciones geométricas ensayadas, así como la campaña experimental establecida, que incluye tanto ensayos estáticos como de fatiga.

1.1. Material y configuraciones geométricas

En el presente trabajo, se ha utilizado un acero estructural S350GD, cuyas propiedades químicas y mecánicas se presentan en las Tablas 1 y 2, respectivamente, de acuerdo con la norma EN-10346 [5]. Este acero se suministra con un recubrimiento compuesto por una aleación de zinc (93,5%), aluminio (3,5%) y magnesio (3%), comercialmente conocida como ZM310, aplicada mediante un proceso de galvanizado en caliente.

Tabla 1. Composición química del acero S350GD utilizado

Composición química (max.wt. %)				
C	Mn	P	S	Si
0,20	1,70	0,1	0,045	0,60

Tabla 2. Propiedades mecánicas del acero S350GD

Propiedades mecánicas (min.)		
σ_y [MPa]	σ_u [MPa]	ε_R (%)
350	420	16

Para estudiar la influencia de la geometría de los taladros, se analizaron tres configuraciones geométricas de placas diferentes, cuyas dimensiones globales están recogidas

en la Figura 1. A partir de estas, y en función de cómo sean combinadas, se pueden obtener tres configuraciones geométricas diferentes, se acuerdo con la Figura 2. Estas tres configuraciones se denominan:

- CCC: Tres placas con taladro circular (Figura 2(a)).
- HVH: Tres placas, con los colisos de las placas exteriores orientados horizontalmente y el coliso de la placa central orientado verticalmente. (Figura 2(b)).
- VHV: Tres placas, con los colisos de las placas exteriores orientados verticalmente y el coliso central orientado horizontalmente (Figura 2(c)).

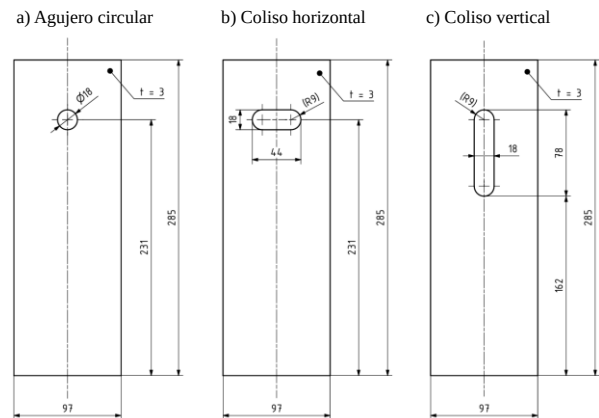


Figura 1. Diferentes geometrías utilizadas con sus respectivas dimensiones principales.

Como se puede observar en la Figura 2, cada configuración está compuesta por:

- Cuatro arandelas planas de 3 mm de grosor, con un diámetro interno de 17 mm y un diámetro externo de 50 mm (ISO 7093-16-140HV).
- Un tornillo de cabeza hexagonal M16 x 1,5 (ISO 4017-M16x50-10.9-A2L).
- Una tuerca hexagonal M16 x 1,5 (ISO 4032-M16-10.9-A2L).
- Tres placas fabricadas en S350GD+ZM310 de 3 mm de espesor (ver Figura 1).

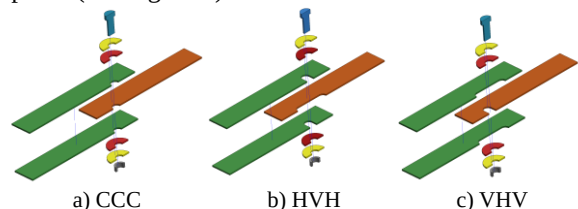


Figura 2. Configuraciones geométricas utilizadas.

2.2. Montaje experimental y estrategia de ensayos

En relación con el programa experimental, se realizaron dos campañas experimentales distintas: una dedicada al análisis cuasiestático de la unión y la otra a la evaluación de su comportamiento a fatiga.

Con respecto a los ensayos estáticos, estos se realizaron para las tres configuraciones geométricas anteriormente definidas. Dentro de cada uno de estos escenarios, se ensayaron tres niveles de pretensión diferentes, correspondientes al 30 %, 60 %, y 100 % de la precarga recomendada por el EC3 para uniones resistentes al deslizamiento, lo que equivale a 35 kN, 66 kN, y 110 kN respectivamente. El objetivo principal de esta campaña experimental inicial fue determinar las cargas críticas de deslizamiento para diferentes configuraciones geométricas y niveles de pretensado, así como calcular el coeficiente de deslizamiento para cada caso utilizando la siguiente expresión:

$$\mu = \frac{F_{Slip}}{F_{Preload}} \quad (1)$$

donde F_{Slip} representa la carga remota aplicada por la máquina de ensayo en la cual ocurre el deslizamiento, y $F_{Preload}$ es el pretensado aplicado a la unión. Con el objetivo de conocer de forma continua la precarga en el tornillo y sus variaciones durante los ensayos realizados, esta fue monitorizada mediante una galga extensométrica ubicada en el vástago del tornillo. El montaje experimental utilizado, puede verse de forma más detallada en la Figura 3.

En segundo lugar, se proponía realizar la caracterización a fatiga de las diferentes uniones, aplicando cargas máximas remotas que oscilantes entre el 80% y el 95% de las cargas de deslizamiento obtenidas en la campaña cuasiestática, utilizando un ratio de cargas de 0,1 ($R = 0,1$). El objetivo principal de esta segunda campaña fue evaluar el posible fallo por fatiga en este tipo de unión y, en particular, determinar la presencia de problemas de fatiga por rozamiento (fretting), como se ha reportado para uniones similares en la literatura científica consultada por los autores.

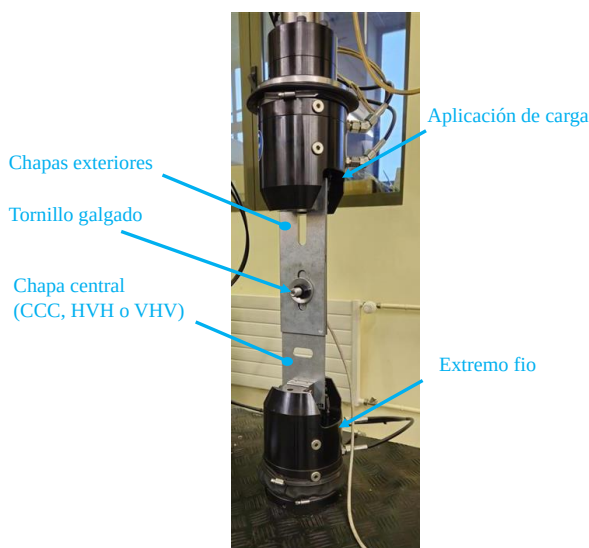


Figura 3. Montaje experimental utilizado.

En todos los casos, los ensayos fueron realizados utilizando una máquina de ensayos servohidráulica Walter+Bai, con capacidad de carga de 60 kN. Los ensayos cuasiestáticos fueron realizados en control de desplazamiento, con una velocidad de carga de 0,2 mm/min, mientras que los de fatiga se realizaron en control de carga con una frecuencia de ensayo de 15 Hz.

3. MODELO NUMÉRICO

Con el fin de captar las regiones críticas de las uniones estudiadas, se desarrolló un modelo numérico para cada una de las uniones de acuerdo al esquema mostrado en la Figura 4, donde se muestran sus condiciones de contorno principales. Como puede observarse en esta, debido a la simetría a lo largo del eje X de la unión, solo se modeló la mitad de la misma. Los escenarios de carga se dividieron en dos pasos para garantizar la correcta aplicación tanto del pretensado en el tornillo como de la carga axial remota sobre la probeta.

En el primer paso de carga, los extremos de las placas son sometidos a una condición de contorno que restringe todos los grados de libertad, y el pretensado se aplica a las superficies internas predefinidas del vástago del tornillo. En el siguiente paso de carga, se fija la longitud del tornillo, lo que permite que este mantenga la precarga anteriormente aplicada. Paralelamente, las condiciones de contorno en el extremo de la probeta en el que se va a aplicar la carga cambian al liberar la restricción de desplazamiento en la dirección de aplicación de la carga, lo que permite la posterior aplicación del desplazamiento deseado en dicho extremo de la misma, en este caso de 1,5 mm.

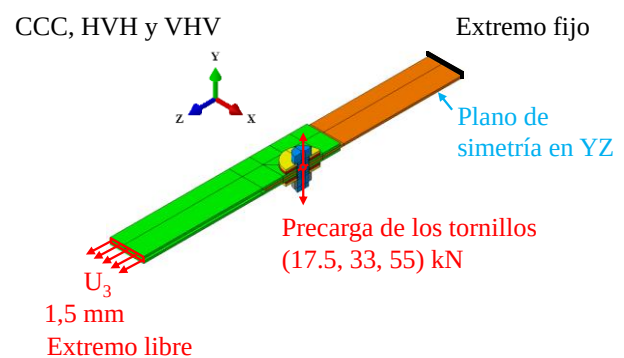


Figura 4. Condiciones de contorno del modelo FEM desarrollado.

Los componentes de fijación (tornillo, tuerca y arandelas) se modelan como un material elástico lineal con un módulo de Young de 210000 MPa y un módulo de Poisson de $\nu = 0,3$, mientras que las placas se modelan como un material elástico-plástico, con el comportamiento elástico definido por los mismos parámetros que los componentes de fijación ($E = 210000$ MPa, $\nu = 0,3$), mientras que la parte plástica del modelo se deriva de resultados previos de la literatura para el material estudiado [6].

En cuanto a la malla, se utilizaron elementos sólidos de tipo C3D8 con integración reducida para todos los componentes, y se aplicando una estrategia de mallado de tipo estructurado. Basado en los resultados de un estudio preliminar de convergencia, se eligieron los siguientes parámetros de malla: un tamaño global de elemento de 5 mm con 6 elementos a lo largo del espesor de la placa y un tamaño de elemento local de 0,4 mm en el borde del agujero con una transición de 0,4 mm a 5 mm entre el borde del agujero y el límite de la interfaz de contacto definida, ubicada a 20 mm del borde del agujero.

Las formulaciones de contacto se aplicaron solo entre las placas y entre las placas y las arandelas mediante la formulación de contacto “penalti”, mientras que los desplazamientos entre los otros pares de contacto del modelo fueron restringidos.

Las características previamente descritas se ilustran en la Figura 5 para cada una de las configuraciones utilizadas.

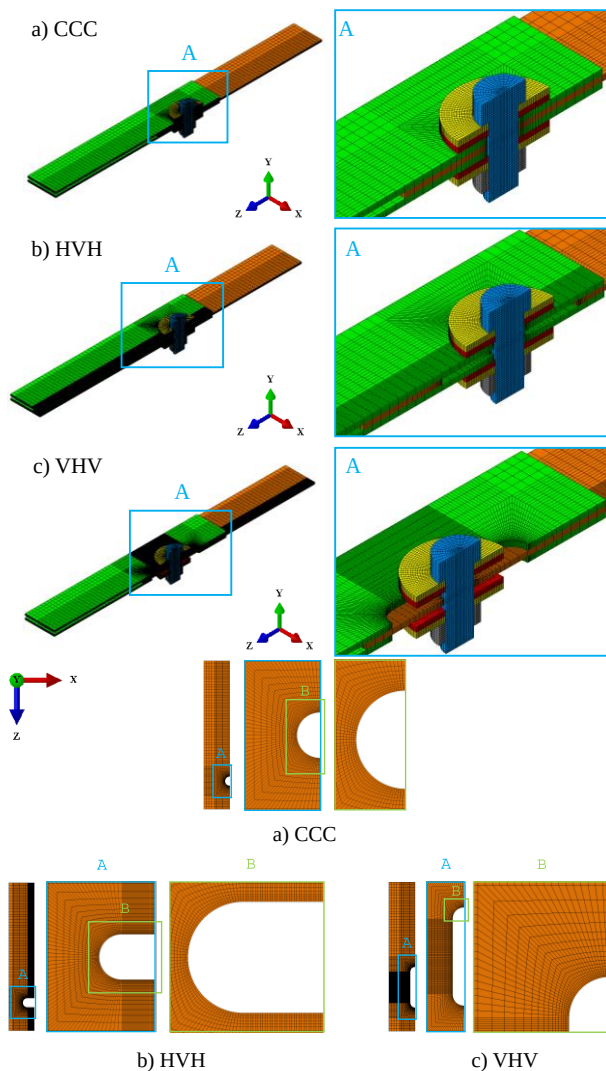


Figura 5. Modelo FEM utilizado –malla global y local.

4. RESULTADOS

En el siguiente apartado, se introducen los resultados obtenidos tanto de la caracterización experimental como del modelo numérico desarrollado.

4.1. Ensayos cuasiestáticos

En relación con los resultados de la campaña experimental cuasiestática (ver Figura 6), se observa que, para bajos niveles de pretensado (35 kN), la geometría de la unión no tiene una influencia significativa, obteniéndose cargas de deslizamiento y coeficientes de deslizamiento similares para todas las configuraciones.

Para el nivel de precarga intermedio (66 kN), la configuración HVH se comporta similar a la unión con agujeros circulares (CCC), obteniéndose valores de carga de deslizamiento similares para ambas configuraciones. Sin embargo, cabe destacar que los valores obtenidos para el caso de colisos VHV son ligeramente superiores a los obtenidos para el resto de configuraciones, siendo capaces de soportar aproximadamente un 30 % más de carga hasta la pérdida de la linealidad.

Finalmente, para niveles de pretensado más elevados (110 kN), se observan las diferencias más significativas. La configuración con agujeros circulares muestra una carga de deslizamiento acorde con lo esperado, ya que el coeficiente de deslizamiento obtenido es similar al de los otros dos niveles de carga. Tomando esta curva como referencia, se observa que la configuración VHV comienza a deslizarse con una carga un 15 % menor de la esperada en comparación con los agujeros circulares. Sin embargo, después del deslizamiento, la unión VHV es capaz de soportar una carga mayor que la unión con agujeros circulares. Esto puede deberse a la significativa deformación plástica en las zonas de unión de las ranuras, lo que genera un enclavamiento entre los componentes tras el deslizamiento. Por otro lado, las uniones HVH muestran un comportamiento considerablemente peor en comparación con las uniones VHV o aquellas con agujeros calibrados, alcanzando una carga de deslizamiento 36 % inferior a la de estas últimas, tomadas como referencia. Finalmente, los coeficientes de deslizamiento se han calculado utilizando la Ecuación 2 para todos los escenarios ensayados, menos para aquellos donde no se ha podido ver una caída abrupta de la carga (ver Tabla 3). Aunque el coeficiente de deslizamiento no debería depender de la geometría evaluada, se ha observado cierta dependencia para la configuración HVH con 110 kN de apriete.

Excluyendo aquellos resultados que presentan resultados anómalos, la Tabla 3 recoge los coeficientes de deslizamiento obtenidos, que están en todos los casos por debajo de los propuestos por la normativa de referencia para este material, que es 0,2.

Tabla 2. Resultados de los ensayos de deslizamiento: Fuerzas de deslizamiento [kN] obtenidas para cada configuración y nivel de pretensado evaluado

Conf.	35kN	66kN	110 kN
CCC	10,19	16,86	29,91
HVH	10,03	17,54	17,10
VHV	9,40	-	-
Media	9,87	17,20	23,50

Table 3. Resultados de los ensayos de deslizamiento: Coeficientes de deslizamiento obtenidos para cada configuración y nivel de pretensado evaluado

Conf.	35 kN	66 kN	110 kN	Media
CCC	0.1451	0.1284	0.1415	0.1383
HVH	0.1481	0.1377	0.0792	0.1217
VHV	0.1404	-	-	0.1404
Media	0.1445	0.1331	0.1104	0.1335

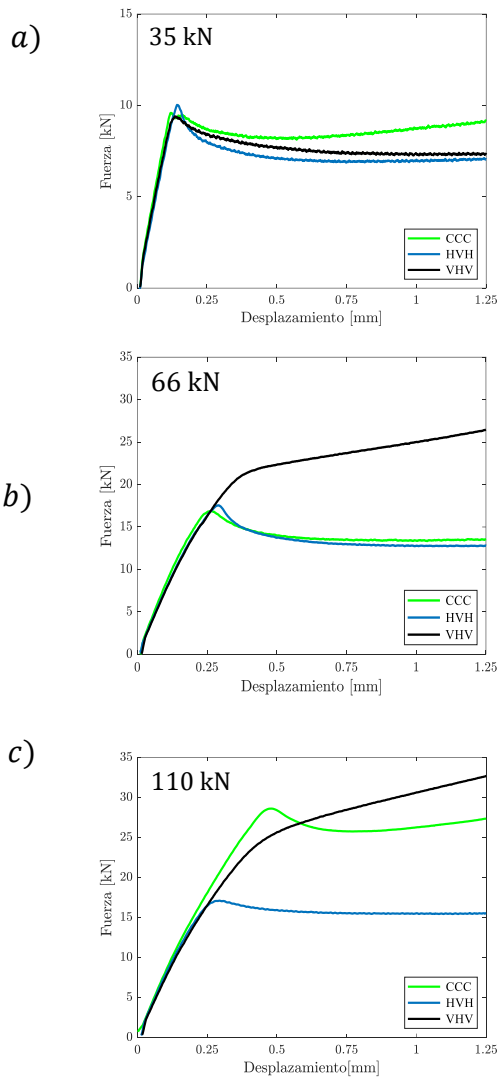


Figura 7. Resultados de los ensayos de deslizamiento.

4.2. Ensayos de fatiga

Una vez completados los ensayos de deslizamiento bajo carga cuasiestática y determinadas las cargas máximas que estas uniones pueden soportar antes de deslizar, se llevó a cabo la campaña de fatiga aplicando el 95 % de la carga de deslizamiento obtenida en la fase anterior.

Para los escenarios de pretensado medio y alto (66 y 110 kN, respectivamente), se obtuvieron Run-Outs a 2 millones de ciclos para todas las pruebas (Tabla 4), lo que lleva a la conclusión de que estos tipos de uniones fallarán por deslizamiento antes que por fatiga. Sin embargo, se debe tener precaución con las cargas entre el 95 % y el 100 % de la carga de deslizamiento, ya que este rango no fue cubierto en el presente estudio.

Una comparación entre las curvas de fatiga propuestas en la versión revisada del Eurocódigo de fatiga (FAT 112 y $m = 5$) y los resultados obtenidos de la campaña aquí realizada, muestra que los ensayos actuales se encuentran por debajo del umbral de fatiga para la categoría de detalle impuesta por el Eurocódigo. Sin embargo, los altos niveles de estrés local resultantes del pretensado en estas configuraciones (ver siguiente apartado), junto con la posibilidad de fatiga por fretting (no considerada en el Eurocódigo), hacían imposible garantizar que la aplicación de esta norma seguía siendo conservadora, lo cual ahora puede garantizarse gracias a los resultados obtenidos en el presente estudio.

Table 4. Resultados de los ensayos de fatiga.

	66 kN	110 kN
Conf.	95%	95%
CCC	RunOut	RunOut
HVH	RunOut	RunOut
VHV	RunOut	RunOut

4.3. Modelo de elementos finitos

Los modelos de elementos finitos han permitido determinar los niveles de tensión alcanzados en las placas bajo las arandelas (ver Figura 9), observando también las deformaciones plásticas que crean un encaje entre los componentes, lo que puede conducir al refuerzo de la unión y prevenir el deslizamiento.

Por otro lado, estos modelos han permitido determinar los máximos esfuerzos locales alcanzados, los cuales podrían ser comparados en el futuro con las curvas de fatiga del material para realizar un análisis de fatiga más avanzado, en caso de que los resultados experimentales lleven a fallos que requieran una evaluación o estudio adicional.

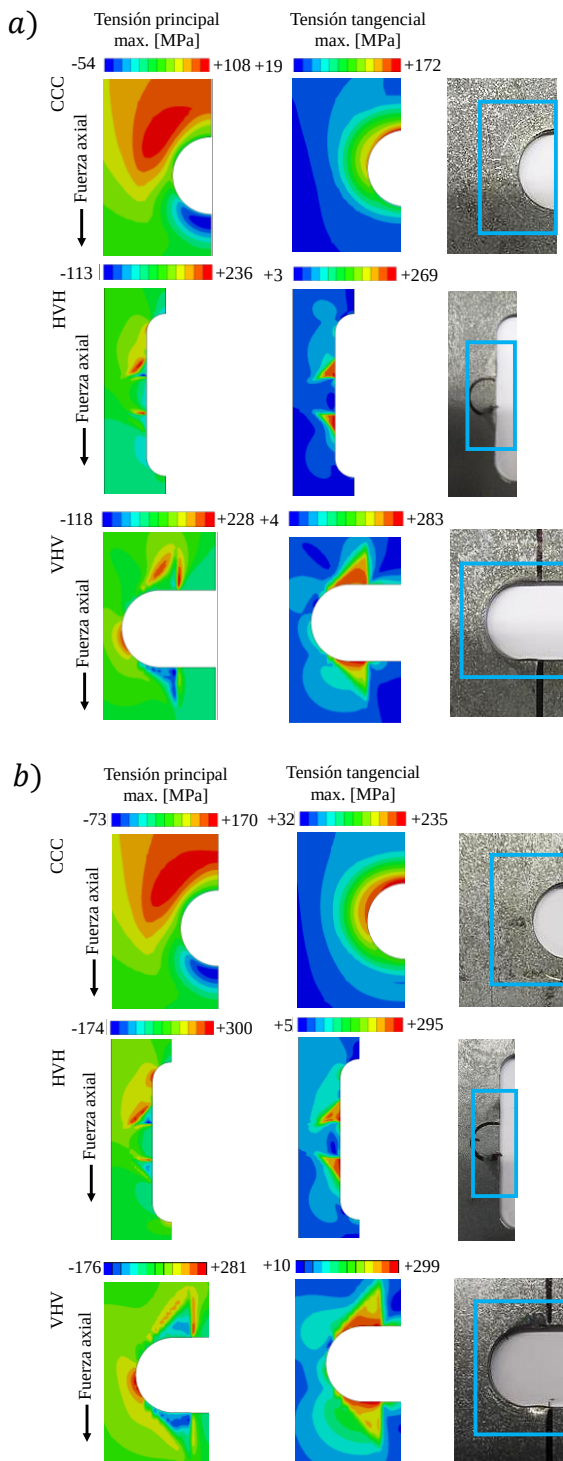


Figura 8. Estado tensional obtenido para todas las configuraciones y su correspondencia con la zona crítica experimental bajo una precarga en el tornillo de: (a) 66 kN y (b) 110 kN.

5. CONCLUSIONES

Del trabajo anteriormente descrito, se pueden destacar las siguientes conclusiones:

- La geometría de la unión tiene un impacto mínimo en las cargas de deslizamiento y los coeficientes de deslizamiento en niveles bajos e intermedios de

pretensado, pero surgen diferencias significativas entre las configuraciones a niveles elevados de pretensado.

- Los ensayos de fatiga indican que las uniones tienen más probabilidades de fallar debido al deslizamiento en lugar de la fatiga, especialmente bajo condiciones de pretensado medio y alto, cuando se encuentran cerca del límite de carga de deslizamiento.
- El análisis de elementos finitos confirma concentraciones significativas de esfuerzos y deformaciones plásticas bajo las arandelas, favoreciendo el enclavamiento de la unión y el aumento de su rigidez.
- Aunque podría parecer que el Eurocódigo podría no ser conservador para estas uniones debido a los esfuerzos inducidos por el pretensado y los posibles efectos de la fatiga por fretting, los resultados experimentales han demostrado que la fatiga no es un problema siempre que las cargas se mantengan por debajo de los límites de carga de deslizamiento.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean expresar su gratitud por el apoyo financiero brindado a través del siguiente proyecto CPP2023-010435, financiado por MCIU/AEI/10.13039/501100011033 /FEDER, EU; por el apoyo financiero brindado a través del siguiente proyecto SV-24-GIJÓN-1-07, financiado por el Instituto Universitario de Tecnología Industrial de Asturias (IUTA).

REFERENCIAS

- Eurocódigo 3: Proyecto de estructuras de acero. Parte 1-9: Fatiga. UNE-EN 1993-1-9:2013. Asociación Española de Normalización.
- R. Hojjati-Talmei, M. A. Wahab, T. Yue, L. D'alvise. *On fretting fatigue behaviour of single bolted lap joint*. In International Journal of Fracture Fatigue and Wear, 2 (2014)
- C. Jiménez-Peña, R. Talemi, B. Rossi, D. Debruyne. *Investigations on the fretting fatigue failure mechanism of bolted joints in high strength steel subjected to different levels of pre-tension*. Tribology International, 108 (2017) 128–140
- C. Souto, V. Gomes, L. da Silva, M. Figueiredo, J. Correia, G. Lesiuk, A. Fernandes, A. de Jesus. *Global-local fatigue approaches for snug-tight and preloaded hot-dip galvanized steel bolted joints*. International Journal of Fatigue, 153 (2021)
- Productos planos de acero recubiertos en continuo por inmersión en caliente. Condiciones técnicas de suministro. UNE-EN 10346:2015. Asociación Española de Normalización.
- V. Gomes, M. Rodrigues, J. Correia, M. Figueiredo, A. de Jesus, A. Fernandes. *Monotonic and fracture behaviours of bolted connections with distinct bolt preloads and surface treatments*. Frattura Ed Integrita Strutturale, 13 (2019) 304–317

UNA APROXIMACIÓN PROBABILÍSTICA AL COMPORTAMIENTO A FATIGA DE LA POLIAMIDA 12 PROCESADA MEDIANTE SINTERIZACIÓN SELECTIVA POR LASER

D. Díaz-Salamanca ^{1*}, A. Salazar López ^{2,3}, A. Cano Aragón ², S. Blasón ⁴, J. Rodríguez ^{2,3},
M. Muñoz-Calvente ¹, A. Fernández Canteli ¹

¹ Dpto. de Construcción e Ing.de Fabricación, Universidad de Oviedo, Campus de Viesques, 33203 Gijón, España

²DIMME, Grupo de Durabilidad e Integridad Mecánica de Materiales Estructurales, Universidad Rey Juan Carlos, C/ Tulipán, s/n 28933 Móstoles, Madrid, España

³Instituto de Investigación de Tecnologías para la Sostenibilidad (ITPS), Universidad Rey Juan Carlos

⁴Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Unter den Eichen 87, 12205 Berlin, Germany

* Persona de contacto: diazsdiego@uniovi.es

RESUMEN

En este trabajo se procede a la reevaluación y análisis de los resultados experimentales de fatiga en poliamida 12 (PA-12) procesada mediante la técnica de fabricación aditiva de sinterización selectiva por láser (SLS), para dos orientaciones, 0° y 90°, de una campaña anterior, mediante la aplicación del software ProFatigue basado en el modelo $S - N$ compatible de Weibull propuesto por Castillo y Canteli. La idoneidad de la estrategia de ensayos se confirma mediante: (a) una evaluación previa de los datos disponibles para ambas orientaciones incluyendo la detección de la necesidad de realizar ensayos adicionales y (b) una evaluación *a posteriori* mediante la extracción aleatoria de una fracción de ensayos del conjunto original de resultados, que confirma una consistencia razonable de los parámetros estimados del modelo. La definición del campo $S - N$ probabilístico a través de la variable normalizada $V = \log(\sigma_M/\sigma_0) \cdot \log(N/N_0)$, como una única función de distribución de Weibull, demuestra la potencialidad del modelo implementado en ProFatigue y a su vez garantiza un control en la calidad de la evaluación mediante la detección del sesgo por distribución de percentiles de los datos. Se añade una reevaluación del campo $S - N$ con el nuevo modelo $GRV = \psi \cdot \sigma$, para tener en cuenta la influencia de la no linealidad de la curva $\sigma - \varepsilon$ del material en la zona LCF. Finalmente, se mencionan los criterios para la aplicación del efecto de escala en la caracterización del material con el fin de garantizar la posterior transferibilidad de resultados al diseño de componentes.

PALABRAS CLAVE: Poliamida 12, Evaluación probabilística de fatiga, ProFatigue software, Estrategia de ensayos, Efecto de escala

ABSTRACT

In this work, the experimental fatigue results on polyamide 12 (PA-12), processed by the selective laser sintering (SLS) additive manufacturing technique (SLS), for two orientations, 0° and 90°, from a previous campaign, are re-evaluated and analyzed by applying the ProFatigue software based on the Weibull compatible $S - N$ model proposed by Castillo and Canteli. The suitability of the testing strategy is confirmed by: (a) a prior evaluation of the available data for both configurations including the detection of the need for additional tests and (b) an *a posteriori* evaluation by randomly extracting a fraction from the original set of results, which confirms a reasonable consistency of the estimated model parameters. The definition of the probabilistic $S - N$ field through the normalized variable $V = \log(\sigma_M/\sigma_0) \log(N/N_0)$, as a single Weibull distribution function, demonstrates the potential of the model implemented in ProFatigue and at the same time guarantees control of the evaluation quality by detecting the bias due to percentile distribution of the data. A re-evaluation of the $S - N$ field is added with the new model $GRV = \psi \cdot \sigma$, to take into account the influence of the non-linearity of the $\sigma - \varepsilon$ curve of the material in the LCF zone. Finally, the criteria for applying the scale effect in material characterization are mentioned in order to ensure the subsequent transferability of results to component design.

KEYWORDS: Polyamide 12, Probabilistic fatigue assessment, ProFatigue software, Test strategy, Scale effect

1. INTRODUCCIÓN

El comportamiento a fatiga de los materiales poliméricos procesados mediante fabricación aditiva es un área de creciente interés debido a sus numerosas aplicaciones en sectores tan exigentes como la industria automovilística,

aeronáutica y biomédica. Entre las tecnologías más utilizadas dentro de la fabricación aditiva, se encuentra la conocida como sinterización selectiva por láser (SLS), que consiste en un proceso de fusión de lecho de polvo. Esta técnica permite la fabricación de componentes garantizando un compromiso entre propiedades

mecánicas y acabado, comparable al obtenido con métodos tradicionales, como el moldeo por inyección, sin perder la flexibilidad característica de la fabricación aditiva [1].

Entre los diferentes materiales termoplásticos susceptibles de ser procesados mediante la sinterización selectiva por láser en polímeros, la poliamida 12 (PA-12) destaca por sus propiedades mecánicas, como su buena resistencia al impacto y su elevada resistencia a fatiga. Sin embargo, su potencial uso en las aplicaciones anteriormente citadas exige una caracterización fiable de su comportamiento a fatiga, que garantice un dimensionamiento basado en el enfoque de vida segura o de tolerancia al daño, según el caso. Este hecho es de especial relevancia en el caso de PA-12 debido a las inherentes heterogeneidades inducidas por el propio proceso de fabricación, basado en la deposición capa a capa [2,3].

En el presente trabajo se propone una caracterización probabilística a fatiga de PA-12, según dos orientaciones 0° y 90° , elaborada mediante fabricación asistida SLS. Para ello se recurre al software ProFatigue [4], basado en el modelo de Castillo-Canteli [5]. El modelo asegura una evaluación más fiable, como resultado de las condiciones impuestas en su derivación, y que permite una mayor racionalización en la campaña experimental, debido a una robusta estrategia de ensayos, incluso con menor número de probetas ensayadas.

Posibles mejoras en la definición del campo $S - N$, como la relativa a la evaluación de resultados en el dominio de LCF, pueden ser integrados en la aplicación de ProFatigue, permitiendo la unificación de los dominios de fatiga de bajo número de ciclos y de alto número de ciclos.

2. MATERIALES Y CAMPAÑA EXPERIMENTAL

El material utilizado es una poliamida 12 (PA-12), fabricada vía SLS con polvo EOS PA 2200 como material base en una máquina EOS Formiga P-100 LS con láser CO₂. Los detalles de los parámetros de fabricación, así como la caracterización mecánica pueden consultarse en [2,3]. En la Figura 2 (a), se muestran las medidas de las probetas tipo mancuerna, utilizadas tanto en los ensayos de caracterización estática como en los ensayos de fatiga. En la Figura 2 (b), se detalla la dirección de las capas en el avance del proceso de fabricación en las dos configuraciones, caracterizadas como PA-12 SLS 0° y PA-12 SLS 90° , respectivamente.

Los ensayos de fatiga realizados para la determinación del campo $S - N$, se realizaron con arreglo a la norma ASTM D7791, imponiendo una onda carga sinusoidal a una frecuencia de cargas de 1 Hz. Se utilizó una máquina servohidráulica MTS 810 Materials Testing con una célula de carga ± 5 kN.

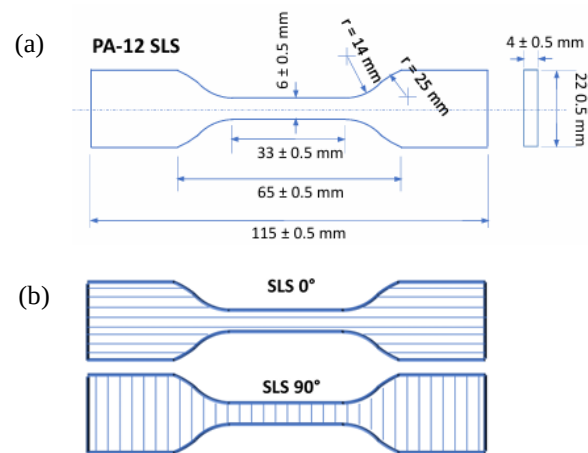


Figura 1: (a) Tipo de probeta con medidas empleadas en los ensayos de fatiga y (b) detalle de la dirección de avance en el proceso de fabricación en las dos direcciones 0° y 90° .

Como consecuencia de la baja frecuencia requerida en la caracterización a fatiga del material PA-12 y con el fin de limitar la duración de los ensayos a un número de ciclos comprendido entre 10^4 y 10^6 ciclos, se aplicaron 12 niveles de tensión manteniendo la relación σ_M/σ_u en un rango entre 0.60 y 0.85. Con ello, se pretendía alcanzar un compromiso entre el número de ensayos y duración de la campaña para la obtención de unos resultados que posibilitaran una evaluación fiable del campo $S - N$, dentro del régimen de fatiga de alto número de ciclos.

3. REEVALUACIÓN DE LOS RESULTADOS EXPERIMENTALES COMO DEFINICIÓN PROBABILÍSTICA DEL CAMPO S-N

La colaboración entre los equipos de investigación participantes en el trabajo propició la posibilidad de proceder a una nueva evaluación del campo $S - N$ mediante el software ProFatigue, [4], fundamentado en el modelo probabilístico propuesto por Castillo y Canteli [5]. Con ello, se pretende demostrar las ventajas de aplicar una nueva estrategia de ensayos, derivada de una metodología de evaluación, más fiable, basada en la compatibilidad entre las distribuciones de tensiones y vidas a fatiga en el campo $S - N$. El proceso comprende: (a) La reevaluación de los resultados obtenidos previamente en [2,3], con posible realización de ensayos complementarios; (b) La evaluación de una muestra reducida, extraída aleatoriamente, del programa original de ensayos, basada en la estrategia de ensayos propiciada por ProFatigue y la posible determinación de los intervalos de confianza mediante técnicas bayesianas [6] y (c) La evaluación del programa original de ensayos mediante el modelo propuesto en [7], que permite, la consideración de la influencia de la no linealidad de la ley $\sigma - \varepsilon$ del material mediante el concepto de $GRV = \psi \cdot \sigma_M$ (Generalized Reference Variable), y con ello una

reevaluación de los resultados de fatiga obtenidos, como situados en el dominio de LCF.

3.1 Reevaluación de los resultados originales

Como análisis preliminar se procede, mediante el programa ProFatigue [4], a la reevaluación de los resultados de fatiga, obtenidos de la campaña experimental realizada en el DIMME de la Universidad Rey Juan Carlos. Ello permite detectar posibles limitaciones en la planificación de ensayos realizada y la conveniencia de reforzar la fiabilidad de la evaluación con nuevos ensayos a ciertos valores de σ_M específicos. En la Figura 2 (a), se presentan los campos $S-N$ obtenidos en la evaluación de los resultados del programa experimental para ambas configuraciones 0° y 90° . En la evaluación del PA-12 SLS 90° se pone de manifiesto el bajo valor del parámetro de forma de Weibull y la anómala definición del percentil del 1%, debido presuntamente a la posible ausencia de resultados en la zona alta de las tensiones, ver Figura 2(a). Tras la oportuna propuesta de ensayos adicionales (como datos en amarillo en la Figura 2(b)) y su realización se observa una evidente mejora en la definición del campo S-N del SLS 90° , tal como se muestra en la Figura 2(b), coherente con la evaluación obtenida para el SLS 0° .

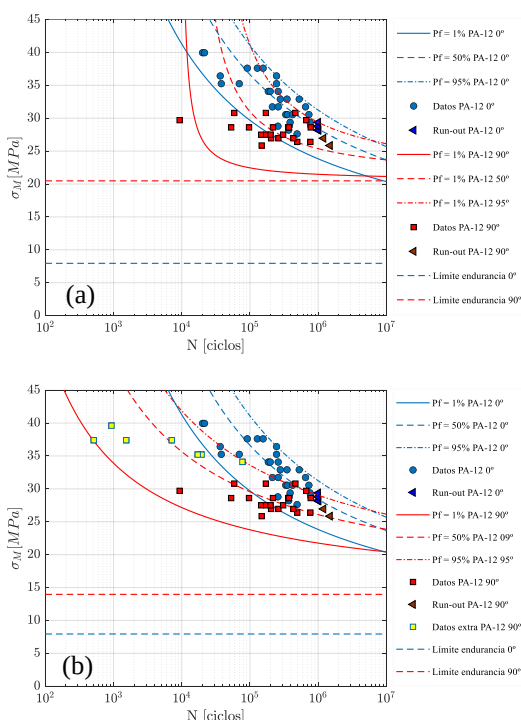


Figure 2: Campos $S-N$ probabilísticos obtenidos para SLS PA-12 0° y SLS PA-12 90° : (a) con los resultados de la campaña original y (b) incluyendo los ensayos adicionales en el SLS PA-12 90° propuestos tras la evaluación con ProFatigue.

Los resultados muestran una clara discrepancia entre los campos $S-N$ obtenidos para ambas configuraciones

SLS 0° y 90° , que se extiende a la estimación del límite de durancia. Ello revela la posible presencia de dos mecanismos de fatiga como resultado de la diferente configuración microestructural en el proceso de fabricación por capas según la orientación de éstas respecto a la carga aplicada durante el ensayo ambas direcciones 0° y 90° . Los resultados para la dirección SLS 90° evidencian un peor comportamiento, es decir, vidas de fatiga más cortas.

3.2 Evaluación de una muestra reducida, extraída aleatoriamente

La robustez y potencialidad del modelo de fatiga $S-N$ compatible propuesto por Castillo-Canteli, [5] quedan demostradas, tanto en lo referente a la optimización de la planificación de la campaña experimental, como de la evaluación probabilística del campo $S-N$, incluso en aquellos casos, en los que el número de ensayos es reducido. Ello se debe a las condiciones aplicadas en la deducción del modelo que se traducen en unas propiedades, entre las que destaca la compatibilidad impuesta entre las funciones de distribución $F(\sigma_M; N)$ y $F(N; \sigma_M)$, y la normalización del campo S-N garantizada por la variable normalizada, $V = \log(\sigma_M/\sigma_0) \log(N/N_0)$, que permite reducir el conjunto del campo S-N a una única función de distribución.

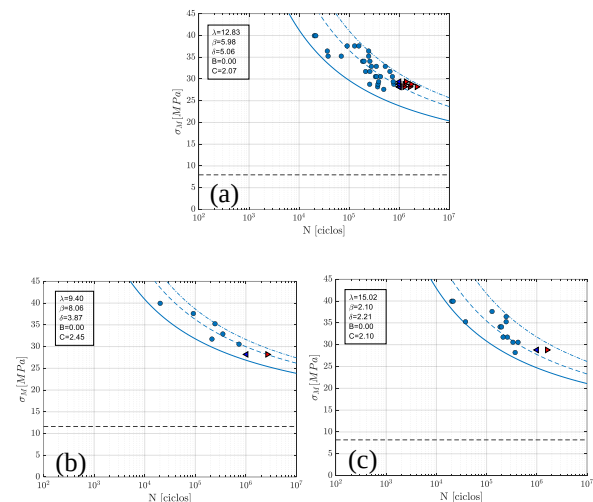


Figura 3: Simulación de evaluación de la campaña experimental para: (a) toda la muestra; (b) un resultado por rango de tensión y (c) dos resultados por rango de tensión.

Como ejemplo de aplicación, se muestran los resultados que se hubieran obtenido para el PA-12 SLS 0° si el plan de ensayos original se hubiera restringido a un menor número de ensayos, extraídos aleatoriamente de aquél, para el mismo rango de valores de carga. La simulación permite comparar el campo S-N para todos los resultados disponibles (ver Figura 3 (c)), con los obtenido tras extraer aleatoriamente siete y catorce resultados de tensión discretos, Figura 3(b) y 3(c), respectivamente. Nótese la apreciable coincidencia de los resultados

obtenidos para 14 ensayos con los obtenidos para toda la muestra.

3.3. Aplicación del modelo compatible en el dominio de LCF

La localización de los valores de σ_M , considerada aquí como variable de referencia, aplicados en la campaña experimental realizada en [2,3], corresponden a la zona no lineal de la relación $\sigma - \varepsilon$, ver Figura 4. Esto sugiere que los resultados experimentales se ubican en la zona de transición entre HCF y LCF, o incluso en el dominio de LCF. En consecuencia, resulta conveniente realizar una evaluación del campo $S - N$ que tenga en cuenta esta circunstancia, utilizando un modelo adecuado, como el propuesto en [7], basado en la definición de una nueva variable, denominada *GRV* (Generalized Reference Variable) que se obtiene como producto de la tensión normal σ_M y un factor ψ , deducido de la curva $\sigma - \varepsilon$ del material. El procedimiento que define el nuevo campo compatible $GRV - N$ queda definido en el diagrama de flujo de la Figura 5, en la que figura una posible definición del factor ψ , entre las posibles soluciones propuestas en [7].

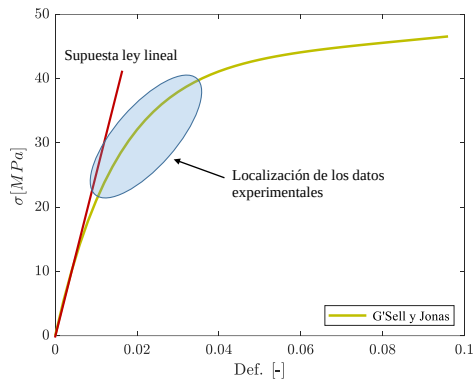


Figura 4. Ajuste del comportamiento del SLS PA-12 para la orientación de 90° según el modelo de G'Sell y Jonas, ley lineal y rango de tensiones utilizadas en la campaña de ensayos.

En la Figura 6(a), se muestra la definición probabilística del campo $GRV - N$ resultante, mientras la Figura 6(b) confirma una excelente normalización de todos los resultados, como pertenecientes a una única muestra del material, con independencia de los diferentes niveles de σ_M .

3.4 Definición de los intervalos de confianza mediante técnica bayesiana

La reducción del número de ensayos que promueve la aplicación de la nueva estrategia de ensayos inherente al software ProFatigue, conlleva un efecto secundario de una posible infravaloración de la dispersión, por tanto, de los percentiles más bajos relacionados con el diseño.

Una forma estricta de poder evaluar este efecto consiste en la determinación de los intervalos de confianza de los percentiles en el campo $S - N$, mediante la aplicación de

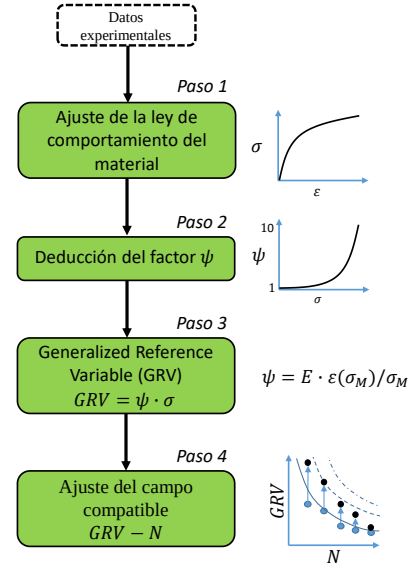


Figura 5. Diagrama de flujo de la metodología propuesta para la evaluación de resultados en el dominio LCF con el modelo compatible $GRV - N$ [7].

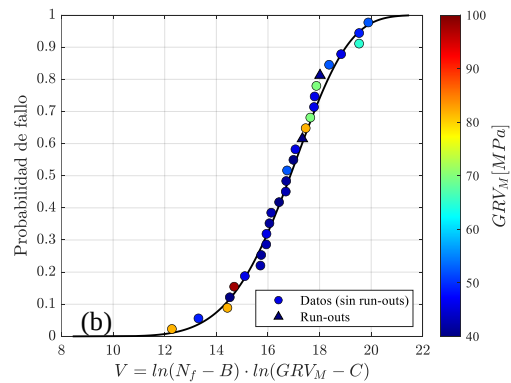
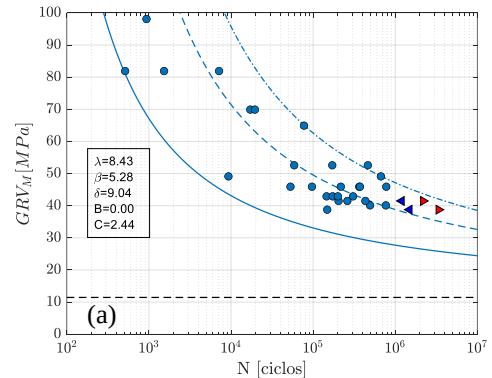


Figura 6. Campo $S - N$ probabilístico y su función de distribución obtenidos para el PA-12 SLS 90°, aplicando ProFatigue en la definición del modelo $GRV - N$

la técnica bayesiana, con la que concluiría la definitiva estimación probabilística de aquél. Una lógica

consecuencia en el caso de un número reducido de ensayos es la ampliación de los intervalos de confianza de los percentiles de acuerdo con el número de ensayos implicados para definir el campo $S - N$. En la Figura 7, se presentan la solución para el campo $S - N$ del PA-12 SLS 90°, en el caso de la extracción de 14 resultados del total de ensayos de la campaña original. Los fundamentos del procedimiento y una completa justificación de la aplicación del método, se tratan en detalle en [6].

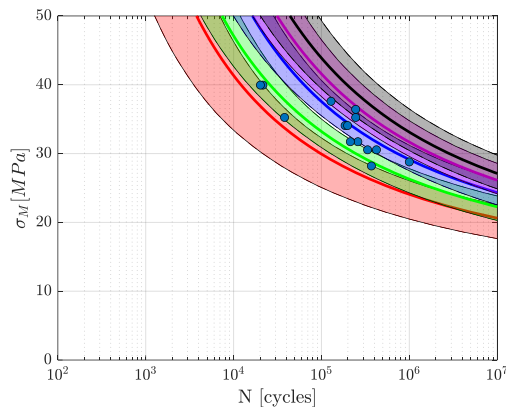


Figura 7. Intervalos de confianza de los percentiles 1, 5, 50, 95 y 99% para el campo $S - N$ obtenido para el PA-12 SLS 90°, con 14 ensayos extraídos de la muestra.

4. DISCUSIÓN

La sorprendente obsolescencia de diferentes normas de diseño de componentes a fatiga, como se demuestra en la norma ASTM D7791, sugiere la necesidad de su inmediata sustitución por modelos avanzados, como el presentado, que permitan una caracterización fiable del comportamiento a fatiga de polímeros (aunque esto es extensivo a materiales metálicos y otros). La propuesta de una regresión lineal, como corresponde al modelo de Basquin, propugnada por numerosas normas, directrices y recomendaciones sobre diseño en fatiga, no garantizan, desde una perspectiva científica y metodológica, la preceptiva integridad estructural en el dimensionamiento actual, debido a su incoherencia física y probabilística. Este modelo promueve una deficiente caracterización del material y con ello una insegura predicción de vida en el diseño basado en el criterio de vida segura (safe life).

La evaluación de los dos campos $S - N$ para el PA-12 SLS 0° y 90° demuestra la existencia de dos mecanismos específicos que determinan el comportamiento a fatiga del material, de acuerdo con el apilamiento de capas en la fabricación y el mecanizado de las probetas.

Esto conduce a la conclusión de que no es posible establecer una pauta de interpretación del comportamiento a fatiga en una dirección a partir de la otra, debido a los diferentes mecanismos de fallo. Por ello, ambas soluciones 0° y 90° tienen que ser

consideradas independientemente en el diseño de componentes según su posible implicación, en relación con la geometría y la carga (orientación de la configuración del material en la distribución tensional).

4.1 Sobre la transferibilidad de resultados al diseño real

Resulta evidente que una predicción fiable de la vida a fatiga de componentes y estructuras en un diseño real, basado en el cálculo de acumulación de daño, exige ineludiblemente una correcta definición probabilística del campo $S - N$ junto a un criterio de equivalencia de daño, como el definido mediante la variable normalizada $V = \log(\sigma_M/\sigma_0) \log(N/N_0)$, del modelo propuesto.

Sin embargo, ello no asegura la transferibilidad del campo $S - N$ evaluado desde los resultados experimentales en el laboratorio en la predicción de daño o rotura en el diseño real de componentes elaborados con estos materiales, a menos que se incluya la consideración del efecto de escala de acuerdo con un modelo local, como el representado por el Generalized Local Model (GLM) [8,9]. El campo $S - N$ obtenido requiere ser interpretado desde una perspectiva correcta del efecto de escala, que será una longitud, área o volumen en los que potencialmente se genera el defecto. En el caso de fabricación aditiva, el material resultante no es homogéneo e isótropo, por lo que el proceso de iniciación podría estar ligado, bien al acabado superficial o a las intercaras en el apilamiento por capas del proceso de fabricación y a la mecanización de la probeta. Un análisis fractográfico y de la particular geometría de apilamiento creada en el proceso de fabricación de la placa (badge) y en la mecanización de la probeta (0° y 90°) resultan imprescindibles para dilucidar correctamente el potencial origen del mecanismo de iniciación asociado a cada mecanismo de fatiga.

En el presente caso, la fractografía demuestra que en ambas configuraciones SLS 0° y 90° las roturas por fatiga se inician en defectos de origen superficial, por mecanizado, en las caras cortas (de 4 mm) de la superficie libre de las probetas. Sin embargo, T_0 , entendido como el tamaño de referencia al incluir el efecto de escala, resulta diferente en ambos casos, lo que justifica los diferentes campos $S - N$ deducidos atribuibles a dos orígenes diferentes en los mecanismos de fatiga. En el caso SLS 0°, se puede atribuir, simplemente, a la superficie mecanizada de las dos caras (superior e inferior), es decir $T_0 = 2 \times 4 \times 33 = 264 \text{ mm}^2$, mientras que para SLS 90° la iniciación se podría suponer debida a la conjunción del mecanizado en la cara corta de 4 mm pero con la presencia de las intercaras entre las capas, lo que sugiere $T_0 = 2 \times 4 \times \frac{33}{0,20} = 1320 \text{ mm}$, donde 0,20 sería el espesor de paso entre capas.

La sencilla geometría de las probetas ensayadas de PA-12, de sección constante en la longitud libre, permite una directa conversión desde la fdd experimental (EFCDF) de la variable de daño V , a su fdd primaria (PFCDF), que coincide ser T_0 , por lo que la transformación a un caso general de T , se realizaría simplemente considerando la relación T/T_0 en la expresión (1), ver [8,9]. La extensión, en el caso de considerar GRV en lugar de σ_M , es inmediata.

$$p = 1 - \exp \left[- \frac{T}{T_0} \left(\frac{\log \frac{N}{N_0} \log \frac{\sigma_M}{\sigma_{M0}} \lambda}{\delta} \right)^\beta \right] \quad (1)$$

En el diseño de componentes reales, el cálculo de la probabilidad de rotura global requiere la aplicación de un modelo local, como el Generalized Local Model (GLM) [8,9] para proceder al cálculo de la suma de las probabilidades de fallo de cada elemento primario i (entendido como elemento finito), con un tamaño de escala dado, T_i , sometido a la correspondiente tensión máxima representativa, σ_{Mi} . En cada caso se aplicaría la expresión (7) al campo $S-N$ obtenido mediante ProFatigue.

De todo lo anterior se deduce la necesidad de continuar el estudio del efecto de escala en la fabricación aditiva de la PA-12.

6. CONCLUSIONES

Las principales conclusiones que se derivan del presente trabajo son:

- El software ProFatigue basado en un modelo probabilístico del campo $S-N$, compatible y normalizable, con interpretación física de los parámetros, define analíticamente y con alta fiabilidad las curvas percentiles y el límite de endurance.
- La estrategia de ensayos basada en el uso de ProFatigue permite optimizar un plan de ensayos online con una reducción sustancial de su número.
- Su aplicación en la reevaluación de los resultados experimentales originales del plan de ensayos en PA-12, garantiza mayor robustez y fiabilidad que la norma ASTM D7791 en la definición probabilística del campo $S-N$ y, en consecuencia, en el diseño basado en la predicción de “vida segura” (safe life).
- El modelo de fatiga implementado en ProFatigue permite detectar anomalías o incoherencias y el posible sesgo entre los resultados para diferentes niveles de tensión mediante la variable normalizada V y, con ello, la conveniencia de realización de ensayos adicionales en zonas específicas.
- La acusada no linealidad de la curva $\sigma - \varepsilon$ del material y los niveles de tensión aplicados en los ensayos justifica una evaluación prospectiva del

conjunto del material en el dominio LCF aplicando el modelo $GRV = \psi \sigma_M$

- La aplicación de técnicas bayesianas facilita la definición de los intervalos de confianza y compensar así la posible infravaloración de la dispersión como resultado de la reducción de ensayos.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo económico recibido por el Ministerio de Economía y Competitividad de España en el marco del Proyecto DPI2016-80389-C2-1-R.

REFERENCIAS

- [1] F. Calignano, F. Giuffrida, M. Galati, *Effect of the build orientation on the mechanical performance of polymeric parts produced by multi jet fusion and selective laser sintering*. J. Manuf. Process., 65 (2021) 271–282
- [2] A. Salazar, A.J. Cano, J. Rodríguez. *Mechanical and fatigue behavior of polyamide 12 processed via injection and selective laser sintering. Analysis based on Kitagawa-Takahashi diagrams*, Eng. Fracture Mechanics, 275 (2022) 108825
- [3] A.J. Cano. *Fatigue behaviour of Polyamide 12 processed by selective laser sintering*, PhD Thesis, Universidad Rey Juan Carlos (2021)
- [4] A. Fernández Canteli, C. Przybilla, M. Nogal, M. López Aenlle, E. Castillo. *ProFatigue, a software program for probabilistic assessment of experimental fatigue data test*, Procedia Engineering, 74 (2014) 236-241
- [5] E. Castillo, A. Fernández Canteli. *A unified statistical methodology for modeling fatigue damage*, Springer (2009)
- [6] E. Castillo, M. Muñiz Calvente, A. Fernández Canteli, S. Blasón. *Fatigue assessment strategy using Bayesian techniques*, Materials, 12 (2019) 3239
- [7] A. Fernández Canteli, E. Castillo, D. Díaz Salamanca, M. Muñiz Calvente, S. Seitzl. *Advances in low cycle fatigue probabilistic modeling*, Theor. Appl. Fracture Mechanics, 133, Part B (2024) 104611
- [8] M. Muñiz Calvente, A. Fernández Canteli, V. Shlyannikov, E. Castillo. *Probabilistic Weibull methodology for fracture prediction of brittle and ductile materials*, Applied Mechanics and Materials, 784 (2015) 443-451
- [9] M. Muñiz Calvente. *The generalized local model: A methodology for probabilistic assessment of fracture under different failure criteria*, PhD Thesis, University of Oviedo (2017)

PAPEL DEL CAMPO TENSIONAL REMOTO EN LA FISURACIÓN ASISTIDA POR HIDRÓGENO: RELACIÓN CON EL DISCURSO CINEMATográfico Y MUSICAL

Jesús Toribio

Grupo de Investigación en Fractura e Integridad Estructural (GIFIE), Universidad de Salamanca (USAL)
Campus Viriato, Avda. Requejo 33, 49022 Zamora, España
Correo-e: toribio@usal.es

RESUMEN

El dominio de K sobre la difusión de hidrógeno se plantea en el artículo. Se analiza la precisión de la distribución aproximada de concentración de hidrógeno C_a gobernada por la componente dominada por K del campo tenso-deformacional próximo (i.e., por el término *asintótico* σ_a) para representar la concentración exacta C_f gobernada por el campo mecánico completo conteniendo la totalidad del desarrollo en serie (i.e., afectada por el *campo remoto* no autónomo σ_f). A tal fin, la discrepancia $E = C_a - C_f$ entre las dos distribuciones de concentración es la variable clave para estimar el efecto del campo lejano (el campo tenso-deformacional remoto no controlado por K) sobre la hidrogenación de la zona de proceso de fractura (ZPF). Finalmente la cuestión se relaciona con el discurso cinematográfico y musical.

PALABRAS CLAVE: fisuración asistida por hidrógeno (FAH), difusión de hidrógeno asistida por la tensión, condición de dominio de K , campo tensional próximo, campo remoto, zona de proceso de fractura (ZPF), música, cine.

ABSTRACT

The matter of K -dominance with regard to hydrogen diffusion in the near-tip region is addressed in the present paper. It is the question of the accuracy of the approximate hydrogen concentration distribution C_a governed by the K -dominated component of the near-tip stress-strain field (i.e., by the *asymptotic* term σ_a) to represent the actual concentration C_f being driven by the complete mechanical field containing the whole series expansion (i.e., influenced by the non-autonomous *far field* σ_f). To this end, the discrepancy $E = C_a - C_f$ between the two concentration distributions is the subject of interest to estimate the effect of the far field (the remote stress-strain field which is not K -controlled) on hydrogenation of the fracture process zone (FPZ). Finally the question is related to cinema and music speech.

KEYWORDS: hydrogen assisted cracking (HAC), stress-assisted hydrogen diffusion, K -dominance condition, near-tip stress field, far field, fracture process zone (FPZ), music, cinema.

1. INTRODUCCIÓN

El comportamiento de cualquier material depende de la historia mecánica previa y del entorno físico-químico, de modo que las ideas del filósofo Baruch de Spinoza sobre el carácter hetero-determinado de la existencia humana resultan totalmente pertinentes en lo que se refiere a materiales, cuyo comportamiento está regido por la hetero-determinación. Por su parte, Ortega y Gasset acuñó la frase “yo soy yo y mi circunstancia”, que constituye la piedra angular de su filosofía. Parafraseando a Ortega, el autor del presente artículo escribió en 1992: “el material es él y su circunstancia”.

En este trabajo científico, la circunstancia determinante del comportamiento de un material estructural dado es el *hidrógeno*, y se plantea la condición de dominio del factor de intensidad de tensiones K sobre la difusión de hidrógeno en el entorno próximo al extremo de la fisura.

Se analiza específicamente *el papel del campo tenso-deformacional remoto* (no controlado por K) sobre la hidrogenación de la zona de proceso de fractura (ZPF), y sobre el proceso total de fisuración asistida por hidrógeno (FAH), re-visitando trabajos científicos anteriores [1-8].

2. UNICIDAD DE LA CURVA DE CINÉTICA DE CRECIMIENTO DE FISURAS (CCF)

El diseño ingenieril seguro frecuentemente contempla problemas de *fisuración en ambiente agresivo* (FAA) en materiales y estructuras, un fenómeno que se manifiesta en diversas formas según el tipo de ambiente, a saber: (i) *fisuración por corrosión bajo tensión* (FCT) o *disolución anódica localizada* (DAL) bajo condiciones electro-químicas asociadas con potenciales anódicos; (ii) *fisuración asistida por hidrógeno* (FAH), también denominada *fragilización por hidrógeno* (FH) o, más propiamente, *degradación por hidrógeno* (DH) en el caso de potenciales catódicos.

En el marco conceptual descrito, el enfoque según la *Mecánica de Fractura* (MF) es relevante en selección de materiales y evaluaciones de integridad estructural. En *Mecánica de Fractura Elástico-Lineal* (MFEL) bajo condiciones de *plasticidad en pequeña escala* (PPE), el *factor de intensidad de tensiones* (FIT) K es el único parámetro que gobierna el estado tenso-deformacional en las proximidades del extremo de la fisura.

La piedra angular de este enfoque es la denominada *curva de cinética de crecimiento de fisuras* (curva CCF, Fig. 1) que representa la velocidad de fisuración v frente al FIT K , definida entre el umbral K_{th} (por debajo del cual v es cero) y la tenacidad de fractura K_c .

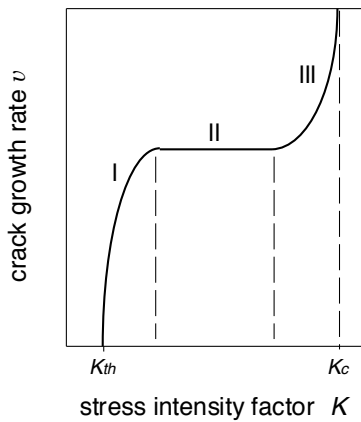


Fig. 1. Curva de cinética de crecimiento de fisuras (curva CCF) con tres estadios: cercano al umbral K_{th} (I), meseta (II) y fractura final (III).

La idea de *unicidad* de la curva $v(K)$ y del umbral K_{th} , i.e., de su *carácter intrínseco* para un sistema dado {material-ambiente} constituye la clave del análisis y garantiza la *transferibilidad* de resultados de laboratorio a estructuras ingenieriles reales.

Sin embargo, la idea clave de la unicidad (es decir, del carácter intrínseco) de la curva $v(K)$ y del umbral K_{th} como propiedades *únicamente* de la pareja específica {material-ambiente} resulta una cuestión abierta, muy relacionada con el dominio de K sobre todo el proceso, tanto mecánico como ambiental.

Especial importancia tiene el fenómeno de FAH dentro de la FCT, y la cuestión clave que aflora en procesos de FAH es elucidar la cuestión del *dominio de K* no sólo sobre los aspectos mecánicos del fenómeno sino, *también*, sobre los aspectos ambientales de naturaleza físico-química.

Dentro de la susodicha cuestión del dominio de K sobre la FAH, dos factores clave juegan un papel relevante: (i) el *campo tenso-deformacional remoto* no dominado por K ; (ii) la *historia acoplada de hidrogenación y fractura*. El presente artículo se ocupa del primero de ellos, es decir, del *papel del campo tensional remoto en la FAH*.

3. FISURACIÓN ASISTIDA POR HIDRÓGENO (FAH)

3.1. Eventos clave en FAH

Los principales eventos en FAH son: (i) transporte de hidrógeno a los lugares potenciales de fractura; (ii) estado tenso-deformacional; (iii) daño potenciado por el hidrógeno. La actividad de hidrógeno en el extremo de la fisura puede representarse en términos de presión parcial P^{CT} , potencial electroquímico E_v^{CT} y pH^{CT} *locales* referidos a la zona próxima al extremo de la fisura, y que pueden diferir de los valores *globales* P , E_v y pH de la solución. Las variables ambientales locales dependen de la geometría de la fisura y del tiempo t :

$$P^{CT} = P^{CT}(P, a, \delta, t) \quad (1)$$

en ambiente gaseoso o

$$pH^{CT} = pH^{CT}(pH, E_v, a, \delta, t) \quad (2)$$

$$E_v^{CT} = E_v^{CT}(pH, E_v, a, \delta, t) \quad (3)$$

en ambiente corrosivo, donde a es la longitud de fisura y δ la distancia entre las caras de la fisura.

3.2. Modelización de la FAH sobre la base del transporte por difusión asistida por el campo tenso-deformacional

La condición crítica tiene lugar cuando se alcanza una concentración crítica de hidrógeno:

$$C = C_{cr} \quad (4)$$

Dicha concentración crítica de hidrógeno es función del estado tenso-deformacional en el punto material:

$$C_{cr} = C_{cr}(\sigma, \epsilon_p) \quad (5)$$

donde $\sigma = \sigma(r, t)$ y $\epsilon_p = \epsilon_p(r, t)$ son respectivamente los tensores de tensiones y de deformaciones plásticas, r la coordenada espacial y t el tiempo.

La concentración actual es también función, aparte de la posición y del tiempo, del estado tenso-deformacional:

$$C = C(r, t; \sigma, \epsilon_p) \quad (6)$$

La entrada de hidrógeno puede caracterizarse mediante el valor de equilibrio C_f en la superficie de entrada Γ (contorno entre el metal y el ambiente):

$$C(\Gamma, t) = C_f \quad (7)$$

La fuerza motriz para la difusión X_D viene determinada por el gradiente ∇ de su potencial químico μ_H :

$$X_D = -\nabla\mu_H \quad (8)$$

el cual se relaciona con el coeficiente de solubilidad K_S de hidrógeno en el metal:

$$\mu_H = RT \ln \frac{C}{K_S} \quad (9)$$

donde R es la constante de los gases ideales y T la temperatura absoluta. La solubilidad K_S depende de la temperatura, la tensión hidrostática σ , la microestructura de la aleación, la composición química y de fases de la aleación y la densidad de trampas de hidrógeno, a su vez función de la deformación plástica equivalente o efectiva ϵ_p , que es otra variable que afecta a la solubilidad de hidrógeno en el metal, además de la tensión hidrostática y la temperatura:

$$K_S = K_S(\sigma, \epsilon_p, T) \quad (10)$$

que puede descomponerse en las partes dependientes de la deformación plástica (K_{Se}) y la tensión hidrostática:

$$K_S(\sigma, \epsilon_p, T) = K_{Se}(\epsilon_p, T) \exp(\Omega\sigma) \text{ with } \Omega = \frac{V_H}{RT} \quad (11)$$

donde V_H es el volumen parcial molar de hidrógeno en el metal. Asumiendo distribución uniforme de temperatura en el sólido (hipótesis que se mantiene en el presente artículo) el vector densidad de flujo de hidrógeno J puede expresarse como sigue:

$$J = \frac{D}{RT} C X_D = -DC \nabla \ln \frac{C}{K_S} \quad (12)$$

donde D es el coeficiente de difusión de hidrógeno en el metal, dependiente de la deformación plástica $D = D(\epsilon_p)$. Sustituyendo (11) en (12) se obtiene:

$$J = -D(\epsilon_p) \left\{ \nabla C - C \left[\nabla(\Omega\sigma) + \frac{\nabla K_{Se}(\epsilon_p)}{K_{Se}(\epsilon_p)} \right] \right\} \quad (13)$$

El balance de masa de la ecuación de difusión en términos de concentración como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\text{div } J \quad (14)$$

que da la evolución de concentración de hidrógeno con el tiempo t . A partir de (13)-(14) la ecuación de difusión de hidrógeno asistida por la tensión y la deformación en términos de concentración toma la forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D [\nabla^2 C - M \cdot \nabla C - NC] + \nabla D \cdot [\nabla C - MC] \quad (15)$$

donde $\cdot$ denota producto escalar y los coeficiente M y N son:

$$M = \nabla \ln K_S(\sigma, \epsilon_p); N = \nabla^2 \ln K_S(\sigma, \epsilon_p) \quad (16)$$

La entrada de hidrógeno en el metal se caracteriza por la condición de contorno para la difusión (7) con $C_r = C_0 K_S(\Gamma)$, donde C_0 es la concentración de equilibrio hidrógeno-metal en ausencia de tensión y deformación plástica. Teniendo en cuenta (11) se obtiene:

$$C_r = C_0 K_S(\Gamma) = C_0 K_{Se}(\epsilon_p(\Gamma)) \exp(\Omega\sigma(\Gamma)) \quad (17)$$

Cuando $C_0 = \text{const}$, se puede obtener la solución estacionaria exacta de la ecuación (15) que se alcanza asintóticamente para $t \rightarrow \infty$, lo cual corresponde al estado de equilibrio cuando la densidad de flujo de hidrógeno (12) es cero o, de forma equivalente, cuando la fuerza motriz (8) es nula. De acuerdo con la expresión (12), esto ocurre cuando $C/K_S = \text{const}$. Así pues, teniendo en cuenta la relación (11), la solución estacionaria es:

$$C_{\infty}(r) = C_0 K_S(r) = C_0 K_{Se}(\epsilon_p(r)) \exp(\Omega\sigma(r)) \quad (18)$$

Con $\epsilon_p=0$, $K_{Se}=1$ y (18) corresponde al caso de difusión de hidrógeno asistida *sólo* por la tensión.

4. ENFOQUE SEGÚN LA MECÁNICA DE FRACTURA DEL FENÓMENO DE FISURACIÓN ASISTIDA POR HIDRÓGENO (FAH): ANÁLISIS DE LA CONDICIÓN DE DOMINIO DE K

El concepto básico de autonomía mecánica de la región próxima al extremo de la fisura (*dominio de K*) es la piedra angular del enfoque según la MFEL, y puede interpretarse del modo siguiente: existe una región de tamaño R_{SIF} (Fig. 2), junto al extremo de la fisura, dentro de la cual el estado tenso-deformacional elástico está *dominado por K* , i.e., representado adecuadamente *sólo* mediante el término singular $r^{-1/2}$ del desarrollo completo en serie de potencias. Se trata del *término asintótico* σ_a de la tensión hidrostática si se pone el foco en tal componente (*relevante en difusión de hidrógeno*).

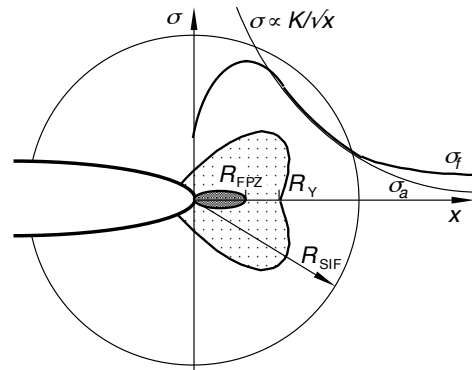


Fig. 2. Zonas específicas y estados tensionales junto al extremo de la fisura.

Además, existe en la vecindad del extremo de la fisura una región no lineal (la *zona de proceso de fractura* de tamaño R_{FPZ}) donde el daño microscópico tiene lugar, rodeada por la *zona plástica* de tamaño R_Y . La zona inelástica total (zona de proceso de fractura más zona plástica) puede ser tan pequeña que no distorsiona la solución elástico-lineal, cumpliéndose así la condición de *plasticidad a pequeña escala* (PPE). Si esto sucede, la región anular elástica dominada por K aparece a distancias desde el extremo de la fisura $R_Y < r \leq R_{SIF}$. Fuera de tal dominio anular (para $r > R_{SIF}$) el campo tenso-deformacional remoto (*campo remoto*) no está gobernado por K , ni lo está su componente hidrostática σ_I en particular.

Considerando el dominio de K sobre el estado tenso-deformacional en la vecindad del extremo de la fisura, la concentración crítica (5) es función de K en este caso:

$$C_{cr} = C_{cr}(\sigma(K, r), \epsilon_p(K, r)) \quad (19)$$

Y la concentración actual (6) deriva en:

$$C = C(r, t; \sigma(K, r), \epsilon_p(K, r)) \quad (20)$$

En términos de variables independientes sólo y usando la coordenada local x desde el extremo de fisura (Fig. 2):

$$C_{cr} = C_{cr}(K, x) \quad (21)$$

$$C = C(x, t; K) \quad (22)$$

Así pues, para conseguir dominio de K sobre el proceso total de FAH, y así unicidad de la curva $v(K)$, deben satisfacerse dos pre-condiciones:

/1/ Unicidad controlada por K de la concentración crítica de hidrógeno C_{cr} que debe alcanzarse en algún punto de la zona de proceso de fractura para causar fractura local y avance de fisura.

/2/ Dominio de K sobre el proceso de hidrogenación en zona de proceso de fractura en el frente de fisura, i.e., unicidad de la evolución de la concentración de hidrógeno $C(x, t)$.

Según el criterio (4), las curvas dadas por el segundo miembro de las ecuaciones (21)-(22) deberían tocarse en algún punto para causar propagación de fisura. Alcanzar el exclusivo dominio de K sobre la solución de dicho problema de contacto entre dos curvas (de concentraciones de hidrógeno crítica y actual) requiere control de K sobre las propias curvas. Puesto que la concentración crítica C_{cr} junto al extremo de fisura hereda la propiedad de dominio de K del campo tenso-deformacional, las pre-condiciones /1/-/2/ pasan a ser:

/1*/ K es la única variable que controla los campos tenso-deformationales próximos $\sigma = \sigma(K, r)$ y $\epsilon_p = \epsilon_p(K, r)$ en una región que incluye la zona física de proceso, dominando así los aspectos mecánicos, tanto pre-daño como hidrogenación afectada por el campo tenso-deformacional

/2*/ Además, K también gobierna los parámetros ambientales que contraolan la hidrogenación en la vecindad próxima al extremo de la fisura (parámetros ambientales locales) que determinan las evoluciones de concentración $C(x, t)$ en la zona de proceso de fractura.

Finalmente, las dos pre-condiciones pueden formularse en términos de conceptos de mecánica de fractura como:

/1**/ Autonomía mecánica, controlada por K , de la región próxima al extremo de la fisura i.e., dominio de K sobre el campo tenso-deformacional, lo cual constituye la piedra angular del enfoque según la MFEL bajo condiciones de PPE.

/2**/ Autonomía ambiental, controlada por K , de la región próxima al extremo de la fisura i.e., dominio de K sobre los eventos físico-químicos, a saber, las condiciones de contorno y la difusión de hidrógeno junto al extremo de fisura.

Mientras que la primera pre-condición siempre está garantizada en el marco conceptual de la MFEL bajo condiciones de PPE, el cumplimiento de la segunda no siempre está garantizado, puesto que muchas causas pueden destruir el dominio de K sobre la FAH, y así afectar al carácter intrínseco de la curva CCF. Dos causas son relevantes: (i) el rol del campo remoto; (ii) el papel de la historia. Este artículo trata sobre el primero, desarrollándolo en la sección siguiente.

Sin embargo, a pesar del hecho de que la curva $v(K)$ no siempre está dominada por K (la segunda pre-condición puede fallar), asumiendo condiciones de carga constante (hipótesis mantenida en el presente artículo) el umbral K_{th} siempre satisface las dos pre-condiciones de dominio de K , puesto que el límite de no-propagación de la fisura está asociado con la única distribución de concentración estacionaria $C_{\infty}(r)$ alcanzado junto al extremo de una fisura estática para $t \rightarrow \infty$. Esta solución estacionaria de la ecuación de difusión se da en (18). Así pues, sólo la primera pre-condición (autonomía mecánica) es necesaria para garantizar la unicidad del umbral K_{th} que siempre está dominado por K en MFEL bajo condiciones de PPE y carga constante.

5. PAPEL DEL CAMPO REMOTO EN LA CONDICIÓN DE DOMINIO DE K SOBRE LA FISURACIÓN ASISTIDA POR HIDRÓGENO (FAH)

5.1. Planteamiento del problema

Al considerar la difusión de hidrógeno (asistida por tensión y deformación) como mecanismo fundamental de transporte de hidrógeno a la vecindad del extremo de la fisura, se trata de elucidar el dominio de K sobre el propio mecanismo de transporte de hidrógeno por difusión.

La cuestión clave en el análisis es la precisión de la concentración aproximada de hidrógeno C_a gobernada por la componente que está dominada por K del campo tenso-deformacional próximo al extremo de la fisura (i.e., por el término asintótico σ_a) para representar adecuadamente la concentración actual (verdadera) C_f conducida por el campo mecánico completo conteniendo la totalidad del desarrollo en serie de potencias (i.e., influida de este modo por el campo remoto σ_f).

A tal fin, la discrepancia $\mathcal{E} = C_a - C_f$ entre las dos concentraciones de hidrógeno es la materia de análisis para estimar el efecto del campo remoto (el campo tenso-deformacional remoto que no es controlado por K) sobre la hidrogenación en la zona de proceso de fractura.

De acuerdo con la forma general de la ecuación de difusión asistida por el campo tenso-deformacional (15), las ecuaciones para obtener la concentración afectada por el campo remoto C_f (exacta) y la conducida asintóticamente junto al extremo de la fisura C_a (aproximada) son:

$$\frac{\partial C_f}{\partial t} = D [\nabla^2 C_f - M_f \cdot \nabla C_f - N_f C_f] + \nabla D \cdot [\nabla C_f - M_f C_f] \quad (23)$$

$$\frac{\partial C_a}{\partial t} = D [\nabla^2 C_a - M_a \cdot \nabla C_a - N_a C_a] + \nabla D \cdot [\nabla C_a - M_a C_a] \quad (24)$$

donde los coeficientes M y N con subíndices f y a se determinan a partir de (16) mediante sus campos mecánicos asociados (el completo y el asintótico).

Teniendo en cuenta la condición de PPE, junto al fondo de la fisura existe una región dominada por K ($r < R_{SIF}$) donde las dos distribuciones tensionales coinciden (Fig. 2). Así pues, la diferencia es relativa a la discrepancia entre los dos campos de tensión hidrostática: el campo remoto σ_f y el asintótico σ_a para $r > R_{SIF}$.

Restando las ecuaciones (23) y (24) se obtiene la siguiente relativa a la discrepancia:

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} = D [\nabla^2 \mathcal{E} - M_f \cdot \nabla \mathcal{E} - N_f \mathcal{E}] + \nabla D \cdot [\nabla \mathcal{E} - M_f \mathcal{E}] + Q \quad (25)$$

donde aflora un término adicional Q de tipo fuente:

$$Q = \begin{cases} D \Omega \nabla (\sigma_f - \sigma_a) \cdot \nabla C_a \neq 0 & \text{at } r > R_{SIF} \\ 0 & \text{at } r \leq R_{SIF} \end{cases} \quad (26)$$

Esta expresión representa el término fuente para la *difusión de la discrepancia* $\mathcal{E}$ que es la diferencia entre la distribución de concentración conducida por K (aproximada) y la exacta afectada por el campo remoto. Con condiciones iniciales nulas y condiciones de contorno para $\mathcal{E}$, su valor absoluto aumenta con el tiempo (desde cero) a medida que la fuente Q produce esta imaginable "sustancia que se difunde" en el sólido. Es una suerte de difusión "virtual", en la cual se difunde el "error" o discrepancia. Dicho "error" es generado por una fuente Q operativa en $r > R_{SIF}$, y se difunde desde la *lejanía* o *lontananza* hasta las proximidades del extremo de la fisura. El efecto del campo remoto en el dominio de K sobre la acumulación de hidrógeno en la zona de proceso de fractura se hace más severo a medida que una cantidad mayor de "error" $\mathcal{E}$ puede alcanzar la región próxima $r < R_{FPZ}$ mediante difusión "virtual" desde la fuente distante (26) situada en $r > R_{SIF}$.

5.2. Verificación de las condiciones de dominio de K

Es posible obtener la concentración asintótica C_a (conducida por K) en el borde exterior de la zona de proceso de fractura donde el efecto de la fuente Q aparece primero, i.e., en $x = R_{FPZ}$ como:

$$C_a(x=R_{FPZ}, t) = C_a(\tau) = C_\infty(R_{FPZ}) \operatorname{erfc}\left(\frac{1}{2\sqrt{\tau}}\right) \quad (27)$$

donde $\operatorname{erfc}(\bullet)$ es la función de error complementaria y τ el tiempo adimensional definido como $\tau = Dt/R_{FPZ}^2$. La Fig. 3 muestra un diagrama de dicha función $C_a(\tau)$ (línea continua). Aproximadamente para un tiempo $\tau \geq 130$, la concentración C_a en la zona de proceso de fractura (i.e., para $x \leq R_{FPZ}$) excede el 95% del nivel estacionario C_∞ .

Desde entonces en adelante, su variación posterior queda dentro de una banda de dispersión del 5% cerca del límite de hidrogenación para $t \rightarrow \infty$, i.e., el incremento de concentración conducida por K en la zona de proceso de fractura cae dentro de dicha banda del 5% desde el instante t_{SS} (estado estacionario) dado por:

$$t_{SS} = 130 \frac{R_{FPZ}^2}{D} \quad (28)$$

El tiempo t_Q^* para el cual Q llega a ser detectable es

$$t_Q^* \geq t_{SS} \left(\frac{1}{16.1} \frac{R_{SIF}}{R_{FPZ}} \right)^2 \quad (29)$$

Estimando el cociente R_{SIF}/R_{FPZ} con hipótesis de mecánica de fractura, se obtiene:

$$t_Q^* > t_{SS} \quad \text{si } E/\sigma_Y > 161 \quad (30)$$

donde E es el módulo de Young y σ_Y el límite elástico del material.

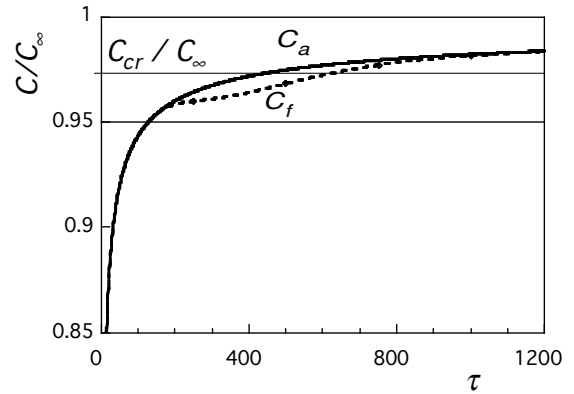


Fig. 3. Evolución temporal de la concentración de hidrógeno conducida asintóticamente (controlada por K) C_a (línea continua) y un representante de la concentración afectada por el campo remoto C_f (línea discontinua). Se muestra también un ejemplo del nivel de concentración crítica C_{cr} por debajo del nivel estacionario C_∞ para K_{th} .

Por consiguiente, el campo remoto puede afectar la hidrogenación conducida por K de la ZPF después de que la concentración transitoria se encuentre dentro de la banda de dispersión del 5% próxima a la distribución estacionaria de hidrógeno en tal área.

Dentro de dicha banda estrecha del 5% cercana al límite estacionario C_∞ que define K_{th} mediante el criterio (4), la suposición de control de K sobre la difusión de hidrógeno puede ser errónea, como se muestra en la Fig. 3 donde la línea discontinua representa esquemáticamente una de las posibles curvas C_f .

Este hecho puede afectar a la curva $v(K)$ sólo en su porción cercana al umbral, pero sin afectar al umbral K_{th} en sí mismo, el cual permanece controlado por K , garantizando así la total validez del enfoque según la MFEL.

6. CONCLUSIONES

En el marco conceptual del enfoque según la Mecánica de Fractura Elástico-Lineal (MFEL) de la fisuración asistida por hidrógeno (FAH), se analiza el dominio de K sobre la difusión de hidrógeno asistida por tensión y deformación.

El papel del *campo remoto* sobre la difusión de hidrógeno cerca del extremo de la fisura tiene importancia menor, y puede afectar a la curva $v(K)$ sólo en su parte cercana al umbral, pero no afecta al propio umbral, gobernado por K .

7. EPÍLOGO: RELACIÓN CON EL DISCURSO CINEMATográfico, PICTÓRICO Y MUSICAL

En el presente artículo sobre el papel del *campo remoto* en la FAH se ha planteado una ecuación diferencial de “*difusión virtual*”, según la cual, lo que se difunde desde la fuente distante (remota) es el *error o discrepancia* entre las dos distribuciones de hidrógeno (la exacta, con todos los términos del desarrollo en serie, y la dominada por K , usando sólo el primer término del desarrollo en serie o término singular). Dicho “error” es generado por una fuente operativa desde la *lejanía* o *lontananza* hasta el entorno cercano al extremo de la fisura.

Con respecto al discurso cinematográfico, la idea de algo (o alguien) que viene desde tierras lejanas se ha utilizado en el *western* clásico (John Ford, Howard Hawks, Raoul Walsh y Anthony Mann).

En el plano musical, lo que llega de la lejanía evoca el sonido del viento-metal (trompas y trompetas), y a modo de ejemplo excelente puede citarse el sonido de la trompeta en uno de los *westerns* más grandes de todos los tiempos, la soberbia obra maestra *Río Bravo* (1959) de Howard Hawks, en la cual la trompeta (procedente de la *lejanía* o *lontananza*) entona el tema denominado *El Deguello* (tema musical de la batalla de *El Álamo*), produciendo un efecto terapéutico en Dude, el personaje alcohólico encarnado por un excelente Dean Martin (en uno de sus mejores papeles, que desarrolla junto con las interpretaciones de un extraordinario John Wayne y una bellísima Angie Dickinson).

Pero la trompeta (arrancando muchas veces desde una lejanía conceptual) ha sido especialmente importante en la obra musical del compositor más grande de la Historia, Johann Sebastian Bach, especialmente en sus Cantatas y en el resto de su producción religiosa, pudiendo citarse tres ejemplos excelsos:

(i) el monumental *Oratorio de Navidad BWV 248 (Weihnachtsoratorium)*, compuesto de seis Cantatas, en el que cabe mencionar el bellissimo coral final de la primera Cantata, “*Ach mein herzliebes Jesulein*”, en el cual las trompetas irrumpen lentamente entre los fragmentos cantados del coral.

(ii) *La Misa en Si m BWV 232*, en la cual la trompa (desde la lejanía) tiene un papel clave en el aria para bajo “*Quoniam tu solus sanctus*”, y las trompetas en el bellissimo *Osanna*, así como en la imponente fuga final (recuérdese la soberbia versión de Otto Klemperer).

(iii) La *Cantata BWV 65* “*Sie werden aus Saba alle kommen*”, con el bello sonido de la trompa y los oboes da caccia que evocan la lejanía (lontanaza) desde la que vienen los tres magos de Oriente para ver al recién nacido Jesús de Nazaret.

La Fig. 4 muestra La Adoración de los Magos, de Tintoretto (Scuola Grande di San Rocco, Venezia).



Fig. 4. *La Adoración de los Magos*, de Tintoretto (Scuola Grande di San Rocco, Venezia).

REFERENCIAS

- [1] J. Toribio, V. Kharin. The reliability of the fracture mechanics approach to environmentally assisted cracking: 1. Uniqueness of the $v(K)$ -curve. *Mater. & Design* 18 (1997) 87-94.
- [2] J. Toribio, V. Kharin. The reliability of the fracture mechanics approach to environmentally assisted cracking: 2. Engineering safe design. *Mater. & Design* 18 (1997) 95-101.
- [3] J. Toribio, V. Kharin. Evaluation of hydrogen assisted cracking: the meaning and significance of the fracture mechanics approach. *Nucl. Engng. Design* 182 (1998) 149-163.
- [4] J. Toribio, V. Kharin. K -dominance condition in hydrogen assisted cracking: the role of the far field. *Fatigue Fract. Engng. Mater. Struct.* 20 (1997) 729-745.
- [5] J. Toribio, V. Kharin. The effect of history on hydrogen assisted cracking: 1. Coupling of hydrogenation and crack growth. *Int. J. Fracture* 88 (1997) 233-245.
- [6] J. Toribio, V. Kharin. The effect of history on hydrogen assisted cracking: 2. A revision of K -dominance. *Int. J. Fracture* 88 (1997) 247-258.
- [7] J. Toribio, V. Kharin. Fracture mechanics approach to hydrogen assisted cracking: Analysis of the K -dominance condition. *Mater. Sci.* 35 (1999) 461-476.
- [8] J. Toribio, V. Kharin. On the validity of the fracture mechanics approach to hydrogen assisted cracking. *Proc. ICCES'08* (2008) pp.785-790.

EVALUACIÓN DE LA FATIGA EN UNIONES EJE-CUBO CON AL7075-T651 Y SCALMALLOY

M. Moreno^{1*}, D. Erena¹, J. Vázquez¹, C. Navarro¹

¹ Departamento de Ingeniería Mecánica y Fabricación, Universidad de Sevilla, Camino de los descubrimientos s/n
41092 Sevilla, España

* Persona de contacto: mmoreno@us.es

RESUMEN

La fabricación aditiva de componentes metálicos ha demostrado su potencial para mejorar diseños y capacidades imposibles con las técnicas convencionales, pero se enfrenta a retos en el campo de la fatiga debido a los poros internos y a la variabilidad de los parámetros de fabricación. Por otro lado, la fatiga por fretting es un problema común observado en los ensamblajes de tipo eje-cubo, donde las altas tensiones y los desplazamientos relativos cerca del borde de contacto inician grietas rápidamente. Este trabajo tiene como objetivo estudiar una combinación de ambos problemas. Para ello, se han llevado a cabo dos campañas de ensayos en un conjunto eje-cubo, sometido a flexión, con dos materiales diferentes, la tradicional aleación de aluminio AL7075-T651 y la creada específicamente para la fabricación aditiva, Scalmalloy. Para determinar los campos de tensiones y deformaciones, se ha diseñado un modelo FEM 3D utilizando la técnica del submodelo, dada la complejidad de las condiciones de contorno. Después de los ensayos, se midió la trayectoria de la grieta con un microscopio confocal y se comparó con las predicciones numéricas. Finalmente, se ha aplicado un modelo de fatiga para predecir el fallo de los componentes, obteniendo resultados muy satisfactorios.

PALABRAS CLAVE: Fatiga por fretting, fabricación aditiva, modelo de fatiga

ABSTRACT

Additive manufacturing of metallic components has demonstrated its potential to improve designs and capabilities impossible with conventional techniques, but faces challenges in the field of fatigue due to internal pores and the variability of manufacturing parameters. On the other hand, fretting fatigue is a common problem observed in shaft-hub assemblies, where high relative stresses and displacements near the contact edge rapidly initiate cracks. This work aims to study a combination of both problems. To this end, two test campaigns have been carried out on a shaft-hub assembly, subjected to bending, with two different materials, the traditional aluminum alloy AL7075-T651 and the one specifically created for additive manufacturing, Scalmalloy. To determine the stress and strain fields, a 3D FEM model has been designed using the sub-model technique, given the complexity of the boundary conditions. After the tests, the crack path was measured using a confocal microscope and compared with the numerical assessments. Finally, a fatigue model has been applied to predict the failure of the components, obtaining very satisfactory results.

KEYWORDS: Fretting fatigue, Additive manufacturing, fatigue model

1. INTRODUCCIÓN

La fabricación aditiva (FA) es una tecnología que se ha desarrollado enormemente en los últimos años, con la capacidad de utilizar una gran variedad de materiales, especialmente metales. Uno de estos materiales es Scalmalloy®. Este material podría sustituir eficazmente las aleaciones de aluminio de la serie 7000 de alta resistencia, atrayendo el interés de varias industrias aeronáuticas y aeroespaciales.

Este tipo fabricación ofrece numerosas ventajas y aplicaciones; sin embargo, para que pueda consolidarse como una alternativa confiable frente a otras técnicas de fabricación, es necesario resolver previamente diversos desafíos técnicos y operativos. El primer desafío es

comprender el efecto de la gran cantidad de parámetros de fabricación en la vida a fatiga. Y el segundo gran problema radica en el estudio de los defectos de fabricación inherentes a esta técnica, puesto que actúan como concentradores de tensión, promoviendo el inicio temprano de grietas. Además, es importante destacar que, en muchos casos, las piezas fabricadas por fabricación aditiva presentan importantes problemas de resistencia y fiabilidad [1].

Por otro lado, el fenómeno del fretting describe un proceso de daño en la interfaz entre dos materiales sometidos a presión y a movimientos relativos oscilatorios de pequeña amplitud. Este fenómeno provoca el desgaste de las superficies, la oxidación y el inicio de numerosas grietas en la zona de contacto, las

cuales pueden crecer hasta el fallo final del componente. En este último caso, el proceso se denomina fatiga por fretting. La fatiga por fretting se produce en numerosos sistemas mecánicos, tiene un impacto significativo en la industria y, por ello, existe un gran interés en encontrar soluciones que eliminen o reduzcan sus consecuencias [2][3].

El presente trabajo trata de analizar el comportamiento de la fatiga cuando se combinan ambos fenómenos, o problemas: la fatiga por FA y la fatiga por fretting. Para ello, ambos fenómenos se han combinado en una unión eje-cubo. Esta decisión se basa en los conocimientos adquiridos en trabajos previos de los autores, tanto en FA [4] como en uniones tipo eje-cubo [5]. Además, la unión eje-cubo es fácilmente reproducible para pruebas de laboratorio, considerando solo simplificaciones menores.

2. ENSAYOS EJE-CUBO

La caracterización mecánica del Scalmalloy se realizó en un trabajo anterior [6]. Partiendo de ese punto procedemos a realizar los montajes de la unión eje-cubo proponiendo el esquema que se muestra en la Fig. 1. Para llevar a cabo el ensayo, se fabricarán una serie de probetas en forma de eje cónico, con el fin de ahorrar material y reducir el coste de las probetas. Estos ejes están fabricados en dos tipos aluminio: un aluminio AL7075-T651, que servirá de referencia y que está perfectamente caracterizado y, por otro lado, aluminio de fabricación aditiva, Scalmalloy. La rugosidad superficial se ha medido para ambos especímenes, caracterizándose mediante el parámetro R_a , el cual indica el valor medio de la rugosidad en micras a lo largo del área de medición. Los valores obtenidos fueron de 7,99 micras para Scalmalloy y 0,5 micras para AL7075-T651. Estos resultados evidencian una rugosidad significativamente mayor en las probetas fabricadas mediante técnicas aditivas en comparación con aquellas obtenidas por métodos convencionales.

Estos ejes o probetas se insertan en dos carcasas que abrazan el eje en la parte superior e inferior, ambas

fabricadas con AL7075-T651 (ver Fig. 1b). Estos soportes tienen orificios a través de los cuales pasan cuatro varillas roscadas para producir el ajuste a presión entre el eje y el cubo. Cada una de las varillas tiene en su extremo una célula de carga tipo anillo para controlar la fuerza de la precarga aplicada. Es importante comentar que se ha decidido realizar el ajuste de esta forma con el fin de controlar la fuerza de apriete y, por tanto, la presión en el ajuste, tratando de reproducir un ajuste de interferencia de forma controlada, asegurando la repetibilidad en los ensayos. Tras varias pruebas para comprobar el buen funcionamiento del equipo y, teniendo en cuenta que la carga máxima que se puede aplicar con el material disponible en el laboratorio es de 25kN, se decide aplicar una carga por perno de 20kN. Todo este sistema está montado sobre un utillaje especial fabricado en acero, por lo que es lo suficientemente rígido en comparación con todo el sistema que descansa sobre él.

La carga normal, N , que produce la presión de ajuste en la junta, se aplica antes de montar el sistema en la máquina de ensayo. Se utiliza un sistema de adquisición QuantumX de HBM para medir la precarga aplicada a cada uno de los cuatro tornillos. Una vez aplicada la carga, todo el sistema se monta en una máquina de pruebas MTS810. En el extremo opuesto de la máquina de ensayo (mordaza superior) se monta un utillaje que se requiere para aplicar la carga de flexión. Este dispositivo está equipado con un sistema giratorio para garantizar que la carga aplicada sea siempre perpendicular al eje. La distancia a la que se aplica la carga de flexión se puede ajustar mediante ranuras en el utillaje de acero, con el fin de colocar el eje en la posición deseada antes de aplicar la carga normal. El elemento que está en contacto con el eje para aplicar la carga de flexión se mecaniza de tal manera que encaja perfectamente en el eje, distribuyendo la carga en la superficie cónica superior del eje en lugar de aplicarla en un solo punto. La carga normal, N , se aplica al principio (tal y como se ha comentado anteriormente) y se mantiene constante, mientras que la carga de flexión, F , es una carga cíclica con relación de carga $R = 0,1$, produciendo así fatiga por fretting en el

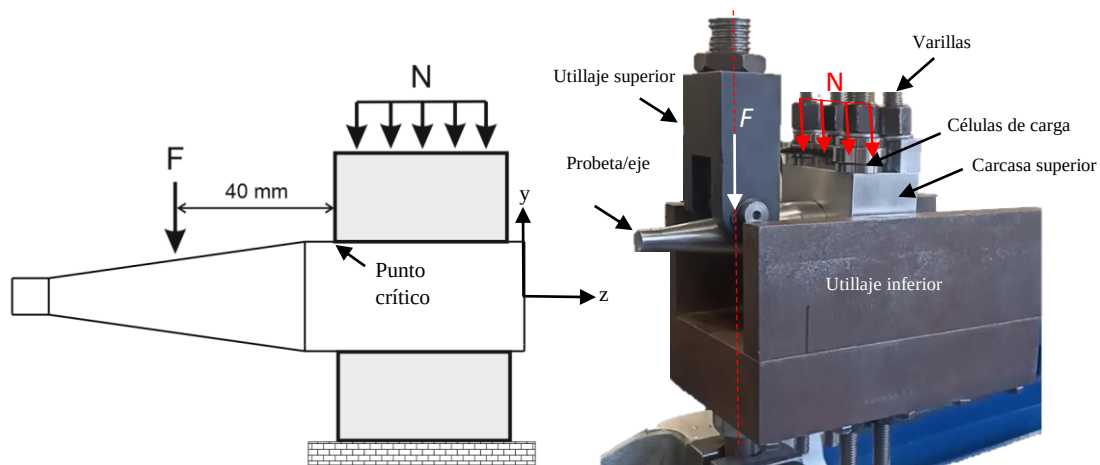


Figura 1. a) Esquema del ensamblaje diseñado, b) fotografía del utillaje en el equipo de ensayos.

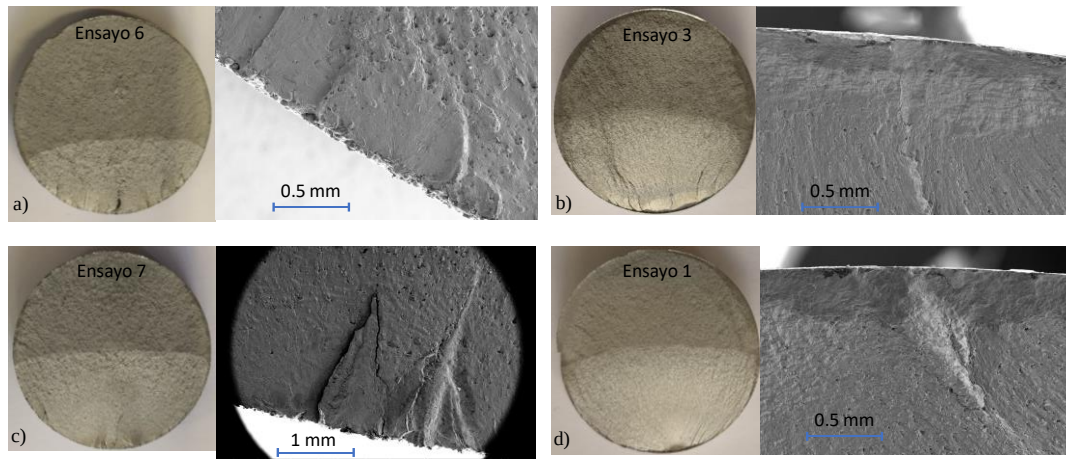


Figura 2. Superficies de fractura observadas en SEM para probetas de Scalmalloy a) y c), y para AL7075-T651 b) y d)

punto crítico o marcado en la Fig. 1a, es decir, el borde superior entre el eje y el cubo, donde hay grandes presiones de contacto, combinadas con un pequeño deslizamiento relativo debido a la flexión del eje.

Se han realizado cinco ensayos con AL7075-T651 y cuatro con Scalmalloy, cubriendo el rango más amplio posible de vidas. Los resultados y las cargas aplicadas se muestran en la Tabla 1. En todos los especímenes de AL7075-T651, la iniciación ocurrió en la zona crítica que se muestra en la Fig. 1a, siguiendo un frente de grieta elíptico. Aunque es difícil medir el punto exacto de rotura en la dirección z , basándose en la inspección visual se puede concluir que la iniciación se produce justo en el borde o ligeramente dentro del contacto (a menos de un milímetro del borde).

Tabla 1. Datos de ensayos de fatiga de ensamblaje eje-cubo.

Prueba	Material	N (kN) por perno	F_{max} (kN)	Ciclos
1	AL7075-T651	20	13	303217
2*	AL7075-T651	20	5,4	>5000000
3	AL7075-T651	20	13	202564
4	AL7075-T651	20	14	140270
5*	AL7075-T651	20	9,2	>3000000
6	Scalmalloy	20	13	65568
7	Scalmalloy	20	9,2	203800
8	Scalmalloy	20	5,4	857330
9	Scalmalloy	20	11	74700

*Vida infinita

Las muestras de Scalmalloy son más complejas que las muestras de AL7075-T651 como se puede observar en las micrografías que se muestran en la Fig. 2. En todos los especímenes de Scalmalloy, se han observado varios puntos principales de iniciación de grietas, los cuales

crecen desde diferentes zonas de la superficie, cerca del punto crítico o en sus proximidades. Además, en este tipo de probeta se observaron grietas secundarias en zonas alejadas de este punto crítico. No se observan defectos relevantes en estas zonas, aparte de los inherentes a la rugosidad del acabado superficial. Por otro lado, en el caso de las probetas AL7075-T651, se presentaron dos escenarios: en algunos casos apareció una grieta principal localizada justo en el punto crítico, mientras que en otros se observaron varios puntos de iniciación, pero siempre cerca de la zona crítica.

Ambos materiales se analizaron mediante microscopía electrónica de barrido (SEM) en combinación con el software AZtec EBSD para determinar el tamaño de grano. El análisis se realizó en una sección de la probeta perpendicular al eje x , considerando dos parámetros. Mediante una ponderación entre área y tamaño de grano se obtuvieron valores de 20 micras para el aluminio 7075 y de 3 micras para Scalmalloy utilizando el método del diámetro equivalente. Por otro lado, con el método del diámetro de Feret, los valores obtenidos fueron 42 micras y 6 micras, respectivamente

3. RESULTADOS NUMÉRICOS.

Tras el bloque experimental, y para conocer los campos de tensiones y deformaciones del conjunto, se ha realizado un modelo de elementos finitos (FEM) que reproduce lo más fielmente posible los ensayos y las condiciones de contorno presentados en el apartado anterior. Para ello, se ha optado por realizar un modelo tridimensional, dadas la geometría y condiciones de contorno.

Debido al tamaño del modelo, se utiliza la técnica de submodelado. De esta manera, en primer lugar, hemos diseñado un modelo global con un tamaño de elemento de aproximadamente 1 mm. Las condiciones de contorno aplicadas se han definido con el fin de reproducir de la manera más exacta posible las del ensayo real. En primer lugar, se ha restringido el movimiento de la cara inferior. La carga normal se aplica al soporte superior mediante

cuatro fuerzas situadas en las posiciones de las varillas roscadas y con una carga constante de 20kN cada una. Por otro lado, la fuerza de flexión, F , se aplica mediante un nodo maestro. Este nodo maestro se enlaza a los nodos superiores del eje a la distancia especificada. Las diferentes cargas de flexión aplicadas se muestran en la Tabla 1, considerando un ciclo con una relación de carga igual a 0,1. El conjunto está modelado en ANSYS con elementos SOLID185, y en las zonas de contacto se han utilizado los elementos CONTA173 y TARGE170. El modelo es elástico, con un módulo de Young de 70 GPa, un coeficiente de Poisson de 0,33 y un coeficiente de fricción de 0,75 [7]. En cuanto al coeficiente de fricción del Scalmalloy, aún no hay información en la literatura, por lo que se ha decidido utilizar el mismo valor obtenido para el AL7075-T651.

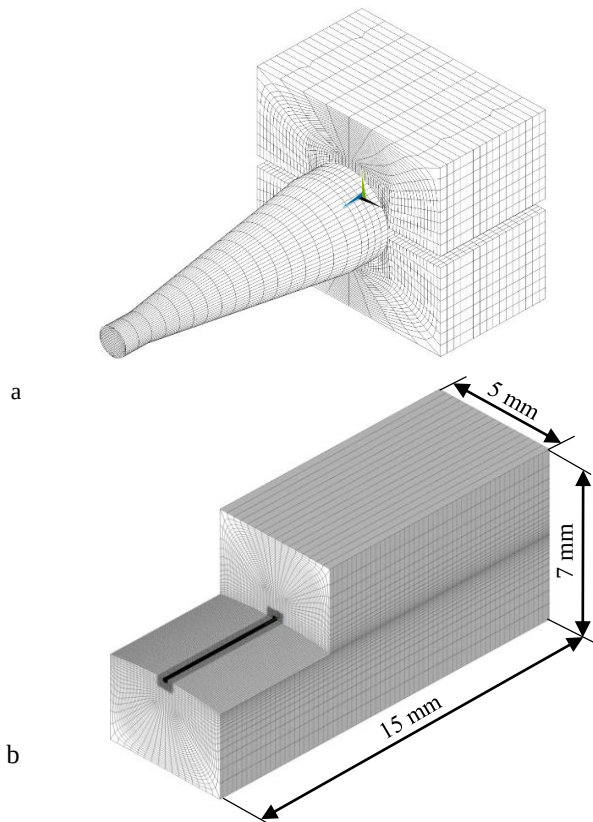


Figura 3. Malla FEM: a) Modelo global, b) Submodelo.

Adicionalmente, se ha realizado un submodelo para reproducir con más detalle las condiciones de tensión/deformación solo en el área cercana al punto crítico. Para ello los desplazamientos obtenidos del modelo tosco, se traspan al submodelo en las zonas correspondientes (Ver Fig. 3) y este se resuelve nuevamente. El tipo de elemento y el algoritmo de contacto son los mismos que los del modelo global. Sin embargo, en este caso el tamaño del elemento en las zonas de contacto es de 7 micras para tener un modelo más refinado en el área de interés. Esta técnica disminuye sustancialmente el costo computacional y, al mismo tiempo, aumenta la precisión de los resultados, capturando así de manera más fiel los fuertes gradientes

de tensión en el borde de la zona de contacto producidos por la combinación de presión y deslizamiento.

Tras resolver los modelos, en la fase de post-procesado, se analizaron las distribuciones de presión y las tensiones principales producidas para las diferentes cargas de flexión aplicadas en la generatriz superior del eje.

Los resultados obtenidos se muestran en la Fig. 4. La línea negra vertical y discontinua corresponde a la posición inicial del borde de contacto antes de aplicar la flexión. La carga de flexión se aplica a la izquierda de esta línea y a la derecha está la zona de contacto entre los cuerpos. La línea roja es el caso en el que se aplica la carga de flexión más baja de 0,54 kN y la línea azul la carga de flexión más alta de 14 kN. Las líneas grises son el resultado de cada una de las cargas intermedias. Teniendo en cuenta que la carga de flexión se aplica con una relación de carga R igual 0,1, tal y como se ha comentado anteriormente.

Los resultados indican que, para valores muy bajos de la carga de flexión, de 0,54 kN a 1,4 kN, la tensión principal

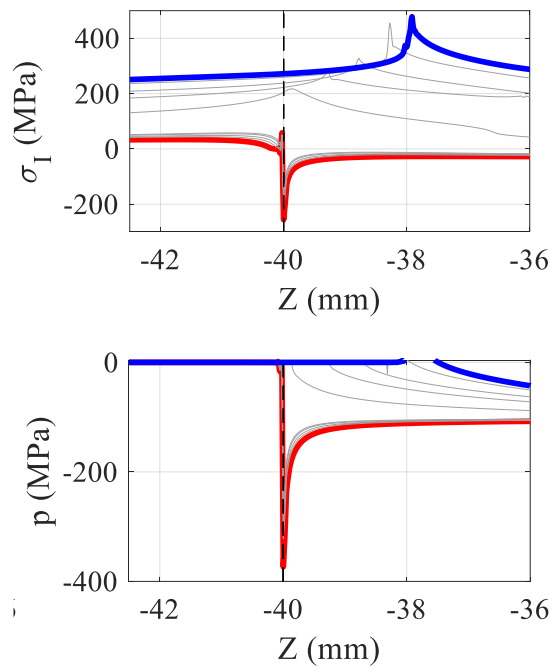


Figura 4. Distribuciones de tensiones principales y presión en la generatriz superior del eje.

es negativa en el punto crítico, ya que la compresión producida por la interferencia eclipsa la carga flectora. Por otro lado, con el aumento de la carga de flexión, a partir de cargas de 5,4 kN, se observa que la tensión principal máxima aumenta a medida que se desplaza hacia la derecha debido a la separación del eje y el cubo.

4. MODELO DE FATIGA.

La metodología aquí aplicada para la evaluación de la fatiga necesita algunos datos de entrada. Además de los

campos de tensión producidos en el conjunto, también es necesario conocer las propiedades de fatiga del material, es decir, tanto las resistencias a la fatiga, $\sigma_{af,-1}$ y $\tau_{af,-1}$, a un número de ciclos de carga de referencia, N_0 , y la pendiente de la curva S-N, m y m^* bajo carga axial y cortante, respectivamente. Además, se requiere el tamaño medio de grano del material, d .

En las Ecs. 1 y 2, N_{cal} representa la vida útil estimada a fatiga. Teniendo en cuenta la forma de las Ecs. 1 y 2, los parámetros de fatiga utilizados para ambos materiales se muestran en la Tabla 2.

$$\sigma'_{af,-1} = \sigma_{af,-1} \left(\frac{N_{cal}}{N_0} \right)^m \quad (1)$$

$$\tau'_{af,-1} = \tau_{af,-1} \left(\frac{N_{cal}}{N_0} \right)^{m^*} \quad (2)$$

Las propiedades que se muestran en la Tabla 2 se han obtenido de las referencias [6]-[8]. En ambos casos no se conocía el límite de fatiga torsional, $\tau_{af,-1}$, por lo que se ha obtenido como $\tau'_{af,-1} = \frac{\sigma'_{af,-1}}{\sqrt{3}}$, además hemos considerado el mismo valor de la pendiente que el obtenido en los ensayos axiales.

Tabla 2. Parámetros de fatiga para AL7075-T651 y Scalmalloy.

Material	$\sigma_{af,-1}$ (MPa)	m	N_0 (Ciclos)	$\tau_{af,-1}$ (MPa)	m^*	N_0 (Ciclos)
AL7075-T651	193	-0.12	$2 \cdot 10^6$	111	-0.12	$2 \cdot 10^6$
Scalmalloy	151	-0.13	$2 \cdot 10^6$	88	-0.13	$2 \cdot 10^6$

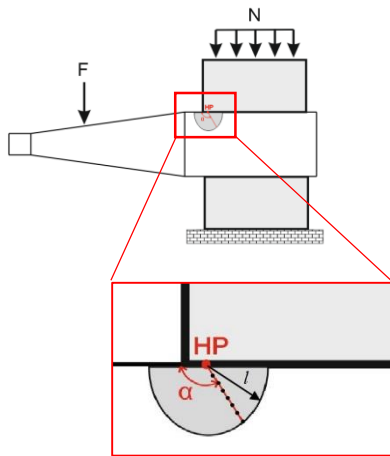


Figura 5. Esquema del procedimiento para estimar vida.

Una vez que se conocen los parámetros de fatiga, es necesario calcular el campo de tensión en la muestra. En el presente trabajo de investigación, se utilizan los modelos FEM descritos anteriormente. Con ellos se localiza la ubicación de nucleación de la grieta, HP, (es decir, la ubicación del punto crítico en la superficie del material): es el punto en la superficie que alcanza el valor máximo de la tensión principal, σ_I , en un ciclo.

A continuación, se determina la orientación de la nucleación de la grieta. Se supone que esta orientación

coincide con la del plano crítico, α_{cr} , el cual se encuentra definido según el Método de Dirección Crítica (MDC) propuesto por Araujo et al. [9][10]. Suponiendo que las tensiones en el plano de simetría serán más altas que en cualquier otro, el plano crítico para el inicio de la grieta se buscará solo aquí. Cada candidato a plano crítico aparece como un segmento de longitud dada, l , que parte del HP, como se muestra en Fig. 5. De acuerdo con la metodología actual, el tamaño físico, l , se supone que es “ $2d$ ”. Por otra parte, la orientación, α , de dicho segmento se identifica como se muestra en Fig. 5.

Se calcula un parámetro de fatiga para cada segmento que se obtiene variando α entre 0° y 180° con incrementos de 1° . La orientación que identifica el valor máximo del parámetro de fatiga se considera la correspondiente al plano crítico, α_{cr} . De acuerdo con la metodología actual, el parámetro de fatiga es $N_{eq,a}$, y viene dado por [12][13]:

$$N_{eq,a} = \bar{N}_a + \sigma_{af,-1} \left(\frac{\bar{N}_m}{\sigma_u} \right) \quad (3)$$

siendo $\bar{N}_a$ y $\bar{N}_m$ los valores medios, calculados para cada segmento orientado según α , de la amplitud y la media de la tensión normal a cada plano.

Finalmente, la vida a fatiga, N_{cal} , se estima según el criterio de Carpinteri et al., empleando los componentes de tensión que actúan sobre el plano crítico en el punto de verificación, situado a una distancia $2d$, del punto crítico (HP) a lo largo de un segmento con una orientación α_{cr} , empleando la siguiente ecuación:

$$\sqrt{\left[N_a(2d, \alpha_{cr}) + \sigma_{af,-1} \left(\frac{N_m(2d, \alpha_{cr})}{\sigma_u} \right) \right]^2 + \left(\frac{\sigma'_{af,-1}}{\tau'_{af,-1}} \right)^2 [C_a(2d, \alpha_{cr})]^2} = \sigma'_{af,-1} \quad (4)$$

donde C_a es la amplitud de la componente de tensión tangencial que se encuentra en el plano crítico.

Una vez conocido el punto crítico y la orientación crítica, se ha aplicado la Ec. 4 junto con las Ec. 1 y 2 para estimar la vida útil de cada una de las pruebas. Los resultados se muestran en las Figs. 6 y 7. En las figuras se muestran los resultados estimados frente a los obtenidos experimentalmente. Las figuras no incluyen los valores de vida infinita (prueba 2 y prueba 5 de la Tabla 1) ya que las predicciones también arrojan valores infinitos.

5. CONCLUSIONES.

Se ha diseñado un ensamblaje que reproduce una unión por interferencia sometida a flexión. En este caso los ejes se han fabricado utilizando dos materiales, un aluminio tradicional y una aleación Scalmalloy. En los ensayos se observa que el comportamiento en términos de vida, para la misma carga, es sustancialmente menor para los ejemplares de Scalmalloy.

Se ha desarrollado un modelo numérico 3D y se ha aplicado un modelo de fatiga para predecir la vida útil de

los ejes sometidos a presión y flexión. Estas predicciones se han realizado para ambos materiales, en base a la caracterización previa. Los resultados obtenidos son muy satisfactorios, ya que casi todas las predicciones se encuentran dentro de una banda de dispersión de 2, lo que dada la complejidad del modelo es un muy buen resultado.

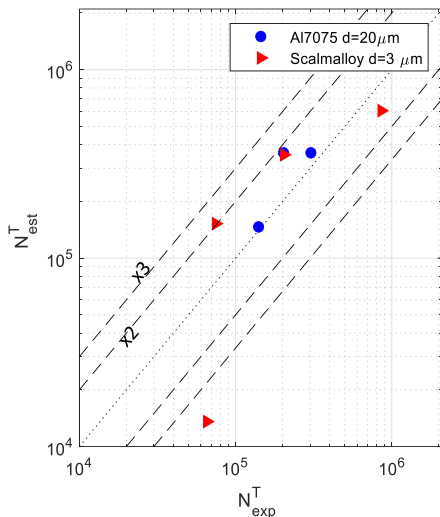


Figura 6. Vida experimental vs. Estimación para el método del diámetro de Feret.

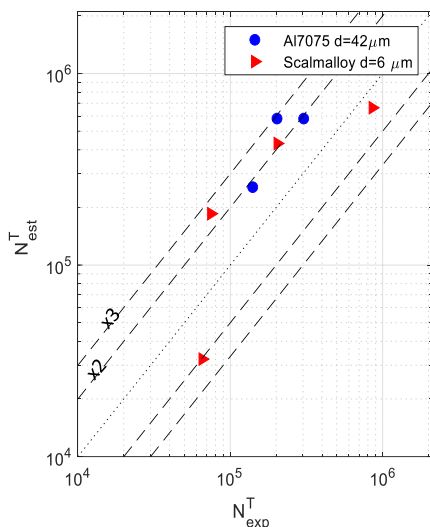


Figura 7. Vida experimental vs. Estimación para el método del diámetro equivalente.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Consejería de Economía, Conocimiento, Empresa y Universidad la financiación de la investigación a través del proyecto P20_01079.

REFERENCIAS

[1] S. R. Daniewicz y N. Shamsaei, «An Introduction to the fracture and Fatigue Behavior of Additive

Manufactured Parts,» International Journal of Fatigue, vol. 84, 2017.

[2] GOLDEN, Patrick J. Development of a dovetail fretting fatigue fixture for turbine engine materials. International Journal of Fatigue, 2009, vol. 31, no 4, p. 620-628.

[3] M. Ciavarella, G. Demelio, A review of analytical aspects of fretting fatigue, with extension to damage parameters, and application to dovetail joints, Int. J. Solids Struct. 38 (10-13) (2001) 1791–1811.

[4] Borja Erice, Christian C. Roth, Dirk Mohr. *Stress-state and strain-rate dependent ductile fracture of dual and complex phase steel*, Mechanics of Materials, 116 (2018) 11-32.

[5] Aguado-Montero, S., Vázquez, J., Navarro, C., & Domínguez, J. (2024). Fatigue behavior of notched and unnotched AM Scalmalloy specimens subjected to different surface treatments. International Journal of Fatigue, 181, 108146.

[6] Erena, D., Vázquez, J., Navarro, C., & Talemi, R. (2020). Numerical study on the influence of artificial internal stress relief groove on fretting fatigue in a shrink-fitted assembly. Tribology International, 151, 106443.

[7] Erena, D., Vázquez, J., Navarro, C. y Domínguez, J. (2023). Caracterización de la aleación Scalmalloy y comparación entre fabricantes. En 39 Congreso del Grupo Español de Fractura GEF2023. Revista Española de Mecánica de la Fractura, vol. 6 (267-272), Sociedad Española de Integridad Estructural - Grupo Español de Fractura.

[8] Martín, V., Vázquez, J., Navarro, C., & Domínguez, J. (2019). Fretting-fatigue analysis of shot-peened al 7075-t651 test specimens. Metals, 9(5), 586.

[9] Vantadori, S., Zanichelli, A., Erena, D., & Vázquez, J. (2023). Effect of rolling on fretting fatigue assessment of cylindrical contact in partial slip regime. Tribology International, 188, 108772.

[10] Araújo J.A., Almeida G.M.J., Ferreira J.L.A., da Silva C.R.M., Castro F.C., Early cracking orientation under high stress gradients: the fretting, International Journal of Fatigue, 2017; 100: 302-311.

[11] Araújo J.A., Castro F.C., Matos I.M., Cardoso R.A., Life prediction in multiaxial high cycle fretting fatigue, International Journal of Fatigue 2020; 134: 105504.

[12] Vandatori S., Carpinteri A., Luciano R., Ronchei C., Scorza D., Zanichelli A., Okamoto Y., Saito S., Itoh T., Crack initiation and life estimation for 316 and 430 stainless steel specimens by means of a critical plane approach, International Journal of Fatigue, 2020; 138: 105677.

[13] Vantadori S., Ronchei C., Scorza D., Zanichelli A., Carpinteri A., Fatigue behaviour assessment of ductile cast iron smooth specimens, International Journal of Fatigue, 2021; 152: 106459.

FATIGUE SAFETY ANALYSIS OF ALUMINUM CRANKS PRODUCED BY ADDITIVE MANUFACTURING

L. P. Borrego^{1,2*}, J.S. Jesus², M. J. P. António², R. Fernandes², R. Branco², J.A.M. Ferreira², J.D.M. Costa¹

¹ Polytechnic University of Coimbra, Rua da Misericórdia, Lagar dos Cortiços, S. Martinho do Bispo
3045-093 Coimbra, Portugal

² University of Coimbra, CEMMPRE, ARISE, Department of Mechanical Engineering, P-3004 516 Coimbra, Portugal

* Persona de contacto: borrego@isec.pt

RESUMEN

Este estudio investiga el impacto del tratamiento de alivio de tensión a baja temperatura en la vida útil por fatiga de bielas de AlSi10Mg producidas por fusión de lecho de polvo láser (L-PBF). La investigación se centra en un brazo de biela de bicicleta, comparando su rendimiento en condiciones de fabricación y tratamiento térmico. Se realizaron estudios de optimización de la geometría, utilizando el método de elementos finitos (FEM) para obtener un modelo final del pedal con masa reducida y suficiente seguridad frente a la fatiga. El tratamiento térmico implicó un alivio de tensión a 250 °C durante 2 horas seguido de un enfriamiento en agua. El estudio mostró que la condición de fabricación exhibía una microestructura celular-dendrítica de Si sobresaturada, mientras que la condición de tratamiento térmico mostró un engrosamiento de las fases β -Mg₂Si y precipitados de Si. Este cambio morfológico condujo a una disminución de la dureza y un aumento de la ductilidad.

Las pruebas experimentales permiten concluir que las bielas de aluminio de referencia y las piezas procesadas por L-PBF con tratamiento térmico de post procesamiento podrían soportar la vida de fatiga impuesta por la norma NP EN ISO 4210-8:2019 sin fallar, pero las piezas procesadas por L-PBF sin tratamiento térmico de post procesamiento fallan por debajo de la vida de seguridad propuesta en la mencionada norma.

PALABRAS CLAVE: Fatiga, L-PBF, Biela de bicicleta, Aleación de aluminio.

ABSTRACT

This study investigates the impact of low-temperature stress-relieving heat treatment on the fatigue life of AlSi10Mg cranks produced by Laser Powder Bed Fusion (L-PBF). The research focuses on a bicycle crankset, comparing its performance in as-built and heat-treated conditions. A geometry optimization study was done, using the Finite Element Method (FEM) to obtain a final model of the pedal with reduced mass and enough fatigue safety. The heat treatment involved stress relieving at 250°C for 2 hours followed by water quenching. The study found that the as-built condition exhibited a supersaturated Si cellular-dendritic microstructure, while the heat-treated condition showed coarsening of β -Mg₂Si phases and Si precipitates. This morphological change led to a decrease in hardness and an increase in ductility. Experimental tests allow to conclude that the reference cranksets and pieces processed by L-PBF with post processing heat treatment could withstand the fatigue life imposed by NP EN ISO 4210-8:2019 standard without failing, but the pieces processed by L-PBF without post processing heat treatment fail below the safety life proposed in the aforementioned standard.

KEYWORDS: Fatigue, L-PBF, Cranksets, Aluminum alloy.

1. INTRODUCTION

Additive manufacturing (AM) has revolutionized the production of complex geometries and lightweight components in industries such as aerospace, automotive, and biomedical engineering. Laser Powder Bed Fusion (L-PBF) has emerged as a highly versatile method for producing high-performance metallic parts and

revolutionized the production of complex metallic parts [1]. The integration of Laser Powder Bed Fusion (LPBF) with topology optimization enables a reduction in the component weight, often by approximately 30-50% [2].

In the as-built condition, AlSi10Mg microstructure presents large Al grains present a fine cellular-dendritic

solidification structure with submicron-sized primary Al cells and an intercellular Si network [3].

Research has demonstrated that AlSi10Mg parts produced by L-PBF can exhibit variations in the mechanical behavior based on the process parameters and post-treatments, like heat treatment, can improve fracture resistance and durability of these components [4].

Real-world component failures in AlSi10Mg produced by L-PBF are often related to the presence of residual stresses, which are introduced during the process. Optimizing the laser parameters and applying appropriate post-processing strategies can mitigate these issues [5].

Residual stresses interact with applied stresses by modifying the loading cycle, thereby modifying the effective stress ratio which can be detrimental to the fatigue life.

The main objective of this work is to prove, using a real functional part, the benefits of a heat treatment previously studied by the authors [6] on the fatigue behavior.

The chosen functional part was a bicycle crankset, typically, made in aluminum alloy and subjected to different types of cyclic combined stress as tensile, torsional and bending [7].

2. MATERIAL AND EXPERIMENTAL METHOD

Firstly, a simplest crankset supplied by a Portuguese bike manufacturer, Miranda® (Portugal), produced through a forging process, was chosen as the basis for developing a new optimized model, featuring reduced weight and a more complex geometry, to be produced by L-PBF. Table 1 presents the nominal chemical composition for the aluminum alloy 6061-T6.

Table 1. Nominal chemical composition for AA 6061-T6 (wt.%) [8].

Al	Si	Mg	Mn	Cu
Bal.	0.4-0.8	0.8-1.2	0-0.15	0.15-0.4
Fe	Zn	Ti	Others	
0-0.7	0-0.25	0-0.15	0-0.15	

2.1. Topology optimization method

Second, the improved crankset design was developed from the conventional crank mentioned before. The topology optimization was performed using software such as Autodesk Inventor 2025 ® and Autodesk Inventor Nastran 2025®. By simulating loads, constraints, and materials, it generates an ideal shape for

a part based on its functional requirements. It uses topology optimization to suggest lightweight designs that maintain structural integrity.

The Shape Generator then analyzes the part, suggesting material removal from areas that do not significantly contribute to its strength, thus creating a design that balances performance and weight.

In the Shape Generator settings, the Young's modulus was 72 GPa, and the applied load was 1300 N at an angle of 45°, 65 mm from the crankset's cross-sectional plane (yellow arrow in Figure 1(a)), as specified in the NP EN ISO 4210-8:2019 [9] standard for adults and youths' leisure bicycles. Figure 1 (b) shows the result of the Shape Generator analysis, achieving a weight reduction of 51% in comparison with the standard model.

Here, the authors considered the mechanical properties presented in Table 2. These properties were obtained in previous work [10].

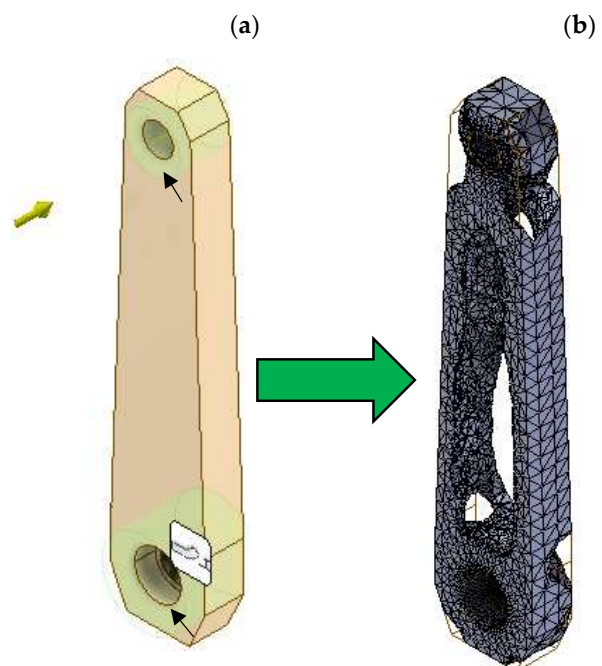


Figure 1. Topology optimization, (a) standard shape and (b) result from the Shape Generator.

Table 2. Mechanical properties of the tested aluminum alloy [10].

Series	σ_{UT} (MPa)	σ_{YS} (MPa)	ϵ_f (%)	E (GPa)
As-build (AB)	435	250	4.1	72
Heat-treated (HT)	380	210	5.6	72

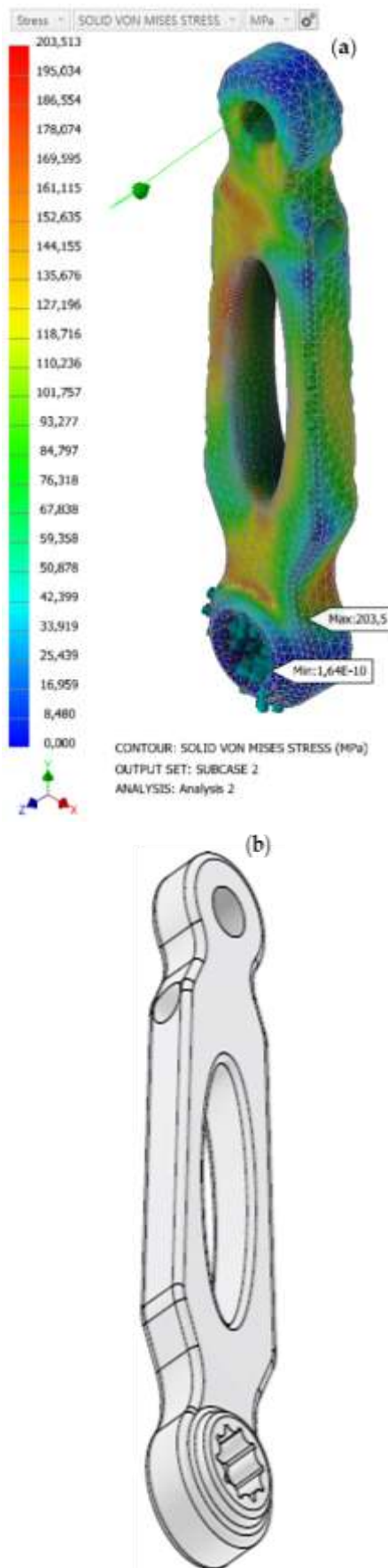


Figure 2. (a) FEA results and (b) final topology.

Thus, a new crank arm was designed through FEA in Autodesk Inventor Nastran. The FEA model was developed using a linear static analysis with 308,648 tetrahedral elements, resulting in a final shape (Figure 2), that achieved a 26% weight reduction compared to the standard form.

Observing the FEA results (Figure 2 (a)), it can be concluded that the maximum Von Mises stress value was 203.51 MPa, which is clearly below the yield stress listed in Table 2.

2.2. Additive manufacturing process

After defining the final geometry, a Renishaw model AM400 was employed to produce the crankset by L-PBF process using a Renishaw machine, AM 400 model.

The additive manufacturing process was conducted under controlled conditions: the building platform was preheated to 150°C, while the laser operated at a power of 350W, with a hatch distance of 80 µm, a scanning speed of 1800 mm/s, a layer thickness of 30 µm and a rotation incremental angle of 67°. All specimens were produced in the vertical orientation. (Figure 2).

Figure 3 shows the geometry comparison between the AISi10Mg cranksets produced by L-PBF and the aluminum crankset from the Miranda® brand.



Figure 3. Comparison between cranksets produced by L-PBF and the Miranda® brand.

2.3. Post-treatment condition and microstructure

For one batches of the manufactured pieces, a post-processing heat treatment was applied. The heat treatment consisted of a low-temperature stress relieving at 250 °C for 2 hours, followed by water quenching.

Metallographic analyses were conducted on the cross-sections of each material condition to evaluate their morphological characteristics. Key microstructures were identified using scanning electron microscopy (SEM) with a Hitachi Jeol JSM-5310 model.

2.4. Fatigue tests and fractography

The fatigue tests were performed on a test bench specifically developed for this purpose, based on the NP EN ISO 4210-8:2019 standard [9]. Figure 4 shows a photograph of the test bench. According this standard the crankset at an angle of 30° or 45°, with the load applied at 65 mm from the longitudinal plane of the crankset.



Figure 4. Fatigue tests device.

This device was attached to a servo-electric testing machine, model Instron ElectroPuls E10000. The fatigue tests were performed at room temperature under constant amplitude ($R=0$) with sinusoidal load waves, and a cyclic frequency of 5 Hz.

The objective of the fatigue tests was to comply with the recommendations of the NP EN ISO 4210-8:2019 standard, specifying a fatigue life of 100,000 cycles with 1300 N of maximum load.

Additionally, the morphology of the fracture surfaces and the primary failure mechanisms were analysed using a Hirox HR-5000 3D optical microscope and a Hitachi Jeol JSM-5310 scanning electron microscope (SEM).

3. RESULTS AND DISCUSSION

The microstructure of the as-built (AB) cranksets is presented in Figure 5 (a), showing supersaturated Si cellular-dendritic microstructure, where aluminum is surrounded by a fibrous network of silicon, as verified in a previous study of the authors [11].

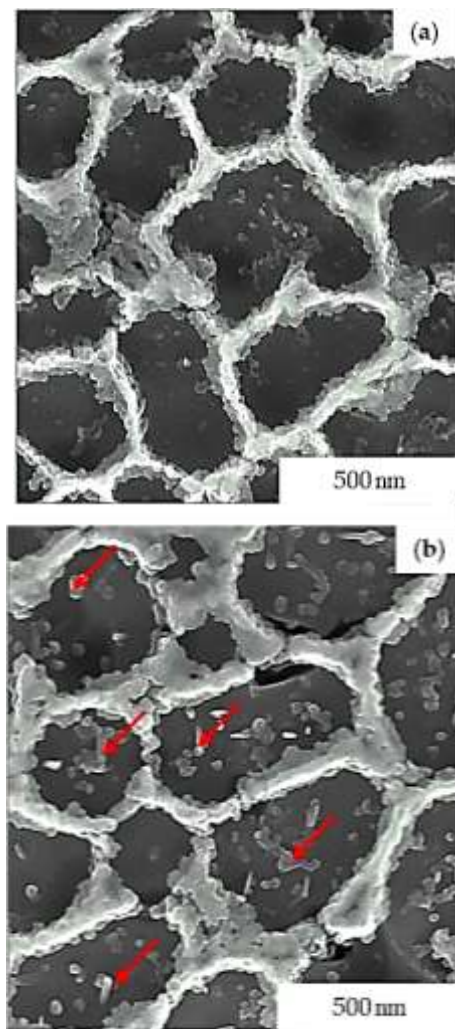


Figure 5. SEM images of the cellular structure in transversal cross-section: (a) As-build condition and (b) heat-treated condition.

The low-temperature stress relieving heat treatment strategy (HT) did not introduce macroscopic alterations due to the moderately low thermal exposure, (Figure 5 (b)).

However, the high supersaturation of Si and Mg atoms in the Al lattice led to the development and coarsening of β -Mg₂Si forerunner phases (red arrows) and Si precipitates inside the α -Al cells.

The results of fatigue tests are presented in Figure 6, in addition with reference life proposed by the NP EN ISO 4210-8:2019 standard [9].

The as-build cranksets failed in the region where the maximum load was achieved in the FEA (see figure 2), before reaching the target of 100,000 cycles, being 78,000 the average number of cycles achieved. Contrary, all the heat-treated cranksets reached a medium value of 126,000 loading cycles without fracturing.

Also, the conventional cranks failure also above the minimum number of cycles imposed by the standard, 100,000 cycles. Some of these tests were stopped afterwards fatigue life reached the 100,000 cycles imposed by the NP EN ISO 4210-8:2019 standard [9].

Then, low temperature stress relief heat treatment presents high benefits in fatigue life by reducing the residual stresses produced during the Laser Powder Bed Fusion technic.

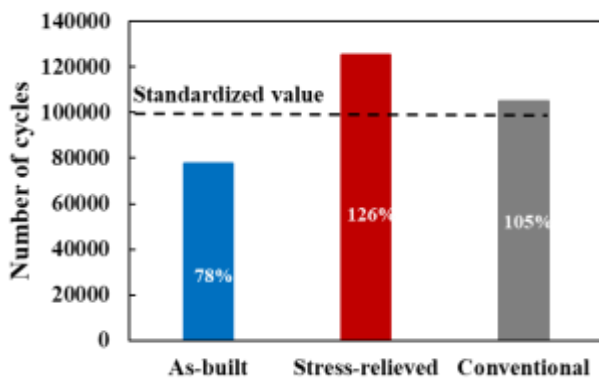


Figure 6. Average fatigue results.

Afterwards, a fractography analysis was performed. Figure 7, compares the fracture surfaces of a non-heat-treated cranksets that reached 94,312 fatigue cycles and a heat-treated one reaching 125,549 fatigue cycles.

It is noticed that the crack initiation position was similar in both cases, with the crack initiation location being where the stresses are highest. In a direct comparison, it can be stated that the heat treatment increased the fatigue life by 33% due to a less defect's sensitivity.

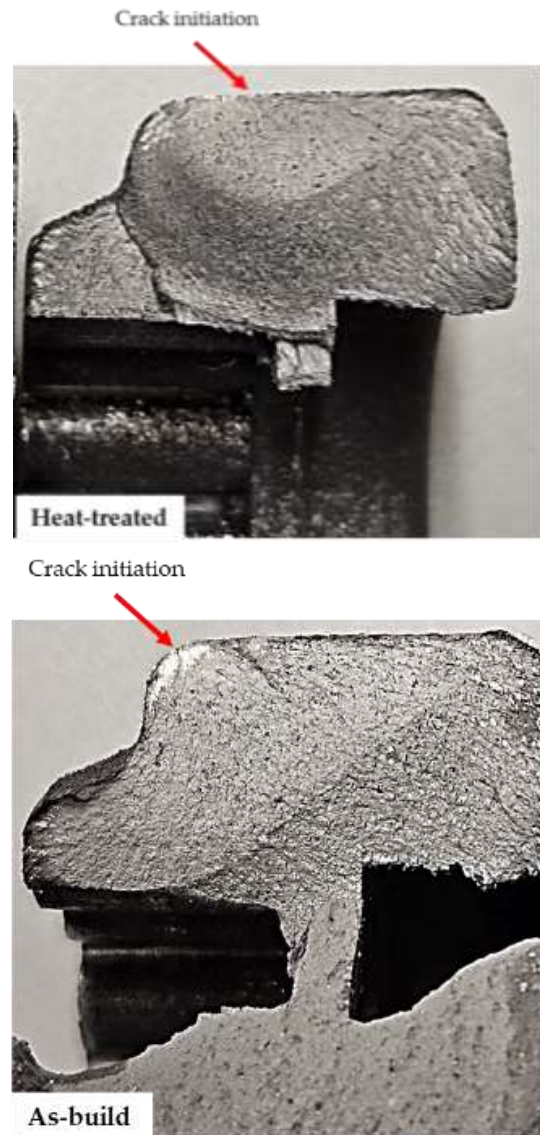


Figure 7. Crack initiation position in the as-built and heat-treated crank arms.

4. CONCLUSIONS

This study allowed to draw the following conclusions:

- Defects such as porosity and surface roughness significantly impact the fatigue life of components produced by L-PBF. This work demonstrated the benefits of applying a low temperature stress relief heat treatment to an AlSi10Mg bicycle crankset produced using the Laser Powder Bed Fusion technic.
- The post-processed cranksets showed improved fatigue life, successfully reaching 100,000 cycles, while the as-built condition failed prematurely. The heat treatment reduced residual stresses, resulting in less sensitivity to defects and surface roughness.

ACKNOWLEDGMENTS

This study was funded by national funds through FCT – Fundação para a Ciência e a Tecnologia –, under the project UIDB/00285/2020 and LA/P/0112/2020. This research was funded by the FACI-2023-MPR-04-014323 project, supported by European Funds and facilitated by Agência Nacional Inovação (ANI) under the Eureka smart label S0612-BRACER. This research was also funded by project MATEL, with the reference COMPETE2030-FEDER-00587200, supported by European Funds under Portugal 2030, Compete2030 and FEDER. Rui Fernandes is also grateful to the FCT for the PhD grant with reference 2022.14234.BD.

REFERENCES

- [1] Yadroitsev, I., Du Plessis, A., Yadroitsava, I. Basics of Laser Powder Bed Fusion. *Fundamentals of Laser Powder Bed Fusion of Metals* 2021, 15–38, <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-824090-8.00024-X>.
- [2] Liu G, Zhang X, Chen X, He Y, Cheng L, Huo M, et al. Additive manufacturing of structural materials. *Materials Science and Engineering R: Reports* 2021;100596.
- [3] Krochmal, M., Rajan, A.N.R., Moeini, G. Microstructural and mechanical properties of AlSi10Mg: Hybrid welding of additively manufactured and cast parts. *Journal of Materials Research* (2023) 38, 297–311 <https://doi.org/10.1557/s43578-022-00838-1>.
- [4] Jiang, Z., Sun, J., Berto, F. Fatigue and Fracture Behavior of AlSi10Mg Manufactured by Selective Laser Melting: A Review. *Phys Mesomech* (2023). 26, 367–390, <https://doi.org/10.1134/S102995992304001X>.
- [5] Egger, C., Grünbart, F., Silvayeh, Z., Šulcová, O., Seper, C., Pfeifer, T., Sommitsch, C., Domitner, J. Mechanical Properties of Selective Laser-Melted Components of Alsi10mg for Prototype Vehicles. *Materials Science Forum*, (2021) 1016, 399–406. www.scientific.net/msf.1016.399.
- [6] Fernandes, R. F., Jesus, J. S., Borrego, L., Ferreira, J. A. M., Neto, D., Branco, R., Costa, J. D. Notch sensitivity and heat treatment effect on the fatigue behaviour of AlSi10Mg aluminium alloy processed by additive manufacturing. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, (2024) <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2024.104553>.
- [7] Ismail, A.Y., Na, G., Koo, B. Topology and Response Surface Optimization of a Bicycle Crank Arm with Multiple Load Cases. *Appl. Sci.* (2020) 10, 2201. <https://doi.org/10.3390/app10062201>.
- [8] BS EN 573-3:2009, Aluminium and aluminium alloys. Chemical composition and form of wrought products - Chemical composition and form of products, 2009.
- [9] NP EN ISO 4210-8:2019, "Cycles — Safety requirements for bicycles — Part 8: Pedal and drive system test methods".
- [10] Fernandes, R.F., Jesus, J.S., Borrego, L.P., Ferreira, J.A.M., Branco, R., Costa, J. D., Batista, A.C., Marques, M. J. Failure analysis of fatigue crack propagation in specimens of AlSi10Mg aluminum alloy produced by L-PBF: Effect of different heat treatments, *Engineering Failure Analysis* (2024). 163, Part B, 108595. <https://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2024.108595>.
- [11] Fernandes, R.F., Jesus, J.S., Branco, R., Borrego, L.P., Costa, J.D., Ferreira, J.A.M. Influence of post-processing heat treatment on the cyclic deformation behaviour of AlSi10Mg aluminium alloy subjected to laser powder bed fusion. *Int. J. Fat.* (2022) 164 107157. <https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2022.107157>.

APLICACIONES Y CASOS PRÁCTICOS

ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES PARA LA EVALUACIÓN DEL ENVEJECIMIENTO DE PROPULSANTES SÓLIDOS DE MATERIAL COMPUESTO

Mario Martínez^{1,*}, Raúl López², Jesús Rodríguez^{1,3}, Alicia Salazar^{1,3}

¹ Grupo de Durabilidad e Integridad Mecánica de Materiales Estructurales (DIMME), Universidad Rey Juan Carlos, C/ Tulipán S/N, 28933, Móstoles-Madrid, España

² Departamento de Sistema de Armas y Balística. Campus “La Marañosa”, Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial (INTA). Ctra. M301 km 10.5, 28330 San Martín de la Vega-España

³ Instituto de Investigación de Tecnologías para la Sostenibilidad. Universidad Rey Juan Carlos

* Persona de contacto: Mario Martínez, mario.martinez@urjc.es

RESUMEN

Los propulsores sólidos de tipo compuesto (CSPs) son materiales clave en las industrias aeroespacial y de defensa en sistemas de propulsión, siendo su envejecimiento un problema a considerar respecto a su uso y conservación. Típicamente, la supervisión del envejecimiento de estos materiales se realiza en las conocidas como pruebas de vigilancia. Este trabajo recoge una aplicación innovadora del Análisis de Componentes Principales (PCA) para evaluar el envejecimiento de CSPs, únicamente mediante parámetros relacionados con el comportamiento mecánico y la integridad estructural, los cuales se han obtenido de ensayos de relajación, tracción uniaxial y fractura en materiales envejecidos aceleradamente. Los envejecimientos acelerados de tipo mecánico, térmico y por ozono tratados en este estudio cubren los diferentes fenómenos de degradación a los que se ven sometidos los CSPs durante su vida útil. Los resultados muestran que el PCA alimentado con variables de carácter estructural permite discriminar de manera efectiva entre distintos tipos y grados de envejecimiento, consiguiendo, además, simplificar el análisis del envejecimiento y la toma de decisiones en las pruebas de vigilancia.

PALABRAS CLAVE: Propulsores, PCA, Envejecimiento, Integridad estructural, Fractura.

ABSTRACT

Composite solid propellants (CSPs) are key materials in aerospace and defence propulsion systems, with ageing being a critical issue for their use and preservation. Typically, the monitoring of these materials' ageing is conducted through so-called surveillance programmes. This work presents an innovative application of Principal Component Analysis (PCA) to evaluate the ageing of CSPs, using only parameters related to mechanical behaviour and structural integrity. These parameters were obtained from relaxation, uniaxial tensile, and fracture tests on materials subjected to accelerated ageing. The accelerated ageing procedures applied encompass the different degradation phenomena that CSPs experience during their service life, namely mechanical, thermal, and ozone ageing. The results demonstrate that PCA, fed with structural variables, effectively discriminates between different ageing types and severities, simplifying both the ageing analysis and decision-making processes in surveillance programmes.

KEYWORDS: Propellants, PCA, Ageing, Structural integrity, Fracture.

1. INTRODUCCIÓN

Los propulsores sólidos de material compuesto (CSP, por sus siglas en inglés) son materiales energéticos esenciales en las industrias de propulsión en defensa y espacio. Estos materiales están compuestos principalmente por partículas cerámicas (oxidante) y polvo metálico (combustible) embebidas en una matriz elastomérica que le aporta la capacidad estructural a este conjunto de partículas. Estos materiales presentan un comportamiento mecánico complejo debido a su naturaleza heterogénea, además de su dependencia del tiempo y la temperatura.

En muchas de sus aplicaciones, la vida útil de los motores de CSP es lo suficientemente larga como para que el propulsor se deteriore antes de su uso, afectando sus propiedades físicas, balísticas y mecánicas [1]. Durante su ciclo de vida, los motores CSP pasan por fases de transporte y almacenamiento, donde están sujetos a vibraciones, variaciones térmicas y exposición al ambiente (humedad/oxígeno) [1,2], contribuyendo al deterioro o envejecimiento del material. Este envejecimiento puede manifestarse de diversas maneras, siendo una de las más relevantes la aparición de grietas macroscópicas en el grano del propulsor [3], lo que

altera el proceso de combustión inicialmente diseñado, afectando a la operatividad y seguridad del motor [4,5]. La caracterización de los granos de CSP es crucial para determinar la utilización de los motores CSP. Para ello, se han desarrollado los programas de vigilancia, que abordan este problema mediante la medición y el cálculo de algunas de las propiedades del material a lo largo de la vida útil del motor, utilizando un número extenso de pruebas. Estas propiedades incluyen tanto características químicas como mecánicas. Algunas de estas propiedades son empleadas de manera individual para predecir la vida útil restante de los motores CSP, como la densidad de entrecruzamiento o la deformación máxima [6,7]. Para propiedades que no son valores concretos, como podría ser un espectro obtenido mediante FTIR, algunos autores han empleado el análisis de componentes principales (PCA, por sus siglas en inglés) para evaluar el envejecimiento de, en su caso, propulsores sólidos homogéneos [8]. Sin embargo, no existe una estandarización para determinar el envejecimiento de los CSP y su uso para la predicción de la vida útil remanente del motor.

Como se ha comentado previamente, la historia del motor puede verse afectada por diversos factores, haciendo compleja la predicción del envejecimiento de los propulsores mediante procedimientos acelerados. En la literatura, la práctica totalidad de estudios se centran en los efectos del envejecimiento acelerado isotérmico, lo cual no es representativo de toda la posible historia del motor.

Este trabajo se fundamenta en dos aspectos clave. El primero es la evaluación estructural de un propulsor sólido de material compuesto, que ha sido sometido a diferentes procesos de envejecimiento acelerado, simulando así diferentes condiciones reales de degradación del CSP. El segundo es la aplicación del análisis por componentes principales para el tratamiento de las múltiples propiedades que han sido caracterizadas. Esto permite observar cambios en el estado del CSP provocados por los diferentes envejecimientos que no se observarían si sólo se tuvieran en cuenta una única propiedad, como es habitual en los análisis de predicción de vida en servicio. Además, el análisis ha resultado satisfactorio empleando únicamente variables relacionadas con la integridad estructural, obtenidas a través de ensayos de relajación, tracción uniaxial y fractura, lo que reduciría el número de pruebas a realizar sobre estos materiales en pruebas de vigilancia.

2. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

2.1. Material

Para la realización de este trabajo se utilizó un propulsor proveniente de un motor cohete de dos etapas. El CSP utilizado proviene de la etapa de aceleración, cuyo propulsor se basa en una matriz de

polibutadieno carboxilterminal (CTPB), que se con partículas embebidas de perclorato de amonio (AP) en un 54% en peso (oxidante) y de aluminio micronizado en un 16% en peso (combustible). Más detalles sobre la composición pueden consultarse en [9].

2.2. Envejecimientos acelerados

Se han utilizado tres procedimientos de envejecimiento acelerado para cubrir todos los posibles mecanismos de degradación del CSP de un motor durante su vida útil, como las vibraciones, cambios de temperatura y exposición ambiental. Estas degradaciones pueden conseguirse a nivel de laboratorio con procedimientos de envejecimiento acelerado de tipo mecánico, térmico y por ozono, respectivamente.

El envejecimiento mecánico acelerado consistió en la aplicación de un ciclo de carga-descarga hasta deformaciones longitudinales objetivo de un 15% y un 30% a una velocidad de desplazamiento de 500 mm/min. Los ensayos mecánicos utilizados para evaluar el efecto de este tipo de envejecimiento se realizaron 1 hora después del ciclo de carga-descarga [10].

El envejecimiento térmico acelerado se realizó siguiendo el procedimiento más habitual, sometiendo al CSP a una temperatura de 80 °C constante en un horno durante 24 y 36 días, lo que corresponde a ≈ 22 y ≈ 33 años de tiempo de almacenamiento equivalente a 25 °C, t_{25} , siguiendo

$$t_a = t_{25} \exp\left(\frac{E_a}{RT_a} - \alpha\right) \quad (1)$$

donde t_a es el tiempo de envejecimiento acelerado, E_a es la energía de activación determinada como 120 kJ/mol para temperaturas de envejecimiento superiores a 60 °C, T_a es la temperatura de envejecimiento acelerado, R es la constante de gas ideal y α es una constante que es 46.713 para temperaturas de envejecimiento superiores a 60 °C [11].

El uso de ozono como agente de envejecimiento acelerado es común en la industria de los elastómeros. Sin embargo, no se encuentran estudios en los que se emplee con propulsores sólidos. La presencia de ozono supone una exposición del CSP a oxígeno, produciendo reacciones de ozonólisis, las cuales resultan en efectos similares a las reacciones de hidrólisis, más propias de la exposición del motor a ambientes húmedos y/o con altas concentraciones de ozono. Éste es un problema de gran relevancia, pero que todavía no ha sido explorado lo suficiente [1]. Por ello, en este trabajo se ha propuesto el uso de ozono como envejecimiento acelerado. Las muestras de CSP se expusieron a una concentración de ozono de 160 ppm durante 14 y 42 días utilizando una cámara realizada ad-hoc para tal propósito.

Por último, también se ensayaron muestras del material tal y como se extrajeron del motor. A este material se le

denominará en adelante como no envejecido (aceleradamente).

2.3. Ensayos y propiedades

Tal y como se ha avanzado previamente, se realizaron ensayos de relajación uniaxial, tracción uniaxial y fractura para evaluar la integridad mecánica del CSP. Los ensayos se llevaron a cabo a temperatura ambiente en una máquina de ensayos universal electromecánica Instron 5967 con una celda de carga de ± 500 N. Más detalles de la caracterización se recogen en [12,13]

Los ensayos de relajación uniaxial se emplearon para obtener las funciones de relajación del material, $E(t)$, con el fin de usarlas para la caracterización mediante la Mecánica de la Fractura Viscoelástica (MFVE) desarrollada por R. Schapery [14]. Las condiciones de los ensayos se describen a continuación. Se impuso una deformación del 3% en la dirección longitudinal (asegurando un régimen viscoelástico lineal), excepto para las muestras envejecidas térmicamente que se sometieron a un 0.15% para mantenerse lo más cerca posible de ese régimen [15]. Se aplicó una rampa de carga a una velocidad de cruceta de 50 mm/min hasta alcanzar la deformación objetivo, que se mantuvo durante 30 minutos. Las muestras empleadas fueron paralelepípedos de dimensiones 45×10×10 mm.

Las funciones de relajación uniaxial, $E(t)$, se obtuvieron de los ensayos realizados siguiendo el procedimiento descrito en [16], y cuyos resultados fueron analizados previamente en [13].

Tabla 1. Datos obtenidos de los ensayos de tracción.

Envejecimiento	E (MPa)	ϵ_{max}	σ_{max} (MPa)	ϵ_{dew}	σ_{dew} (MPa)
Sin envejecer	5.9	0.52	1.15	0.096	0.44
Mecánico 15%	4.4	0.51	1.16	0.138	0.56
Mecánico 30%	4.1	0.50	1.24	0.267	0.85
Térmico 24 días	430	0.43	1.30	0.013	0.68
Térmico 36 días	494	0.36	1.33	0.008	0.81
Ozono 14 días	5.9	0.49	1.09	0.106	0.44
Ozono 42 días	1.7	0.55	0.76	0.112	0.18

Los ensayos de tracción uniaxial se realizaron utilizando probetas JANNAF descritos en la norma STANAG 4506 [17]. Los ensayos se realizaron a temperatura ambiente y a una velocidad de desplazamiento del puente de 5 mm/min ($\sim 10^{-3}$ s⁻¹). Para obtener el campo de deformaciones en la superficie de las probetas, se empleó la técnica de correlación digital de imágenes utilizando el videoextensómetro VIC2D. Debido a limitaciones en la disponibilidad de material, solo se ensayó una muestra por condición. Los parámetros determinados a partir de

estos ensayos de tracción fueron: módulo elástico aparente, E ; deformación verdadera en el máximo, ϵ_{max} ; tensión verdadera en el máximo, σ_{max} ; la deformación verdadera en el punto de *dewetting*, ϵ_{dew} ; y su correspondiente tensión en el punto de *dewetting*, σ_{dew} . El punto de *dewetting* es el punto en la curva tensión-deformación en la que se produce la transición del régimen elástico al régimen inelástico, que se debe a la decohesión de las partículas de la matriz. Los datos obtenidos de los ensayos de tracción se recogen en la Tabla 1.

Los ensayos de fractura también se llevaron a cabo a una velocidad de desplazamiento del puente de 5 mm/min en la configuración del tipo panel en tracción con grieta lateral (*Single Edge Notched Tension*, SENT), con dimensiones de 70×25×12.5 mm. La grieta se introdujo deslizando una cuchilla afilada a través de uno de los lados de la probeta antes del ensayo de fractura, siendo su longitud inicial $a_0 = 10$ mm correspondiente a una relación de longitud de grieta respecto a la anchura, W , de $a_0/W = 0.4$. Todos los ensayos también se grabaron utilizando el equipo VIC2D. Los fotogramas se utilizaron para medir el crecimiento de la grieta en la superficie visible de las probetas, así como la apertura en la punta de la grieta (*Crack Tip Opening Displacement*, CTOD). Se realizaron tres ensayos por condición.

Los ensayos de fractura se analizaron siguiendo la aproximación de la Mecánica de Fractura Viscoelástica desarrollado por R. Schapery [14], y el análisis pormenorizado se recoge en [12,13]. Los parámetros empleados en este trabajo relativos a los ensayos de fractura son el valor crítico de la integral J viscoelástico, J_c^R , asociado con el inicio visible de la propagación de la grieta, y el correspondiente pseudo CTOD crítico, δ_c^R , las constantes de la ley de propagación estable de grieta para la integral J, C_1 y C_2 , y para el CTOD, C_1^* y C_2^* , y la tensión cohesiva, σ_m . La ley de propagación se describe como en términos de la integral J viscoelástica como

$$J^R = C_1 \Delta a^{C_2} \quad (2)$$

donde Δa es el crecimiento de la grieta, mientras que en término del CTOD es

$$\delta^R = C_1^* \Delta a^{C_2^*} \quad (3)$$

Por su parte, la tensión cohesiva viene determinada por la relación

$$J^R = \sigma_m \delta^R \quad (4)$$

entre los parámetros de fractura integral J viscoelástica, J^R , y pseudo CTOD, δ^R durante la propagación de la grieta. Los datos relativos a los ensayos de fractura se recogen en la Tabla 2.

Tabla 2. Datos de los ensayos de fractura.

Envejecimiento	J_c^R (kJ/m ²)	C_1	C_2	δ_c^R (mm)	C_1^*	C_2^*	σ_m (MPa)
Sin envejecer	0.20±0.01	0.38±0.03	0.38±0.04	0.40±0.06	0.78±0.06	0.40±0.10	0.47±0.03
Mecánico 15%	0.16±0.01	0.36±0.02	0.38±0.02	0.31±0.04	0.66±0.03	0.40±0.10	0.57±0.05
Mecánico 30%	0.13±0.01	0.30±0.03	0.46±0.07	0.35±0.03	0.60±0.10	0.30±0.10	0.8±0.3
Térmico 24 días	0.17±0.01	0.50±0.03	0.47±0.06	0.31±0.06	0.80±0.03	0.43±0.07	0.69±0.03
Térmico 36 días	0.19±0.01	0.49±0.03	0.44±0.06	0.29±0.01	0.77±0.08	0.39±0.05	0.80±0.20
Ozono 14 días	0.16±0.01	0.32±0.03	0.34±0.03	0.61±0.04	0.97±0.09	0.26±0.07	0.43±0.02
Ozono 42 días	0.14±0.01	0.28±0.01	0.34±0.01	0.58±0.08	0.97±0.04	0.24±0.05	0.35±0.02

3. ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES

Debido a la escasa disponibilidad de material, se han creado de manera artificial 500 muestras para cada condición (un total de 3500 muestras) empleando un método de Monte Carlo basado en las medidas de las propiedades analizadas (media y desviación estándar, asumiendo una distribución normal para todas las propiedades). El análisis de componentes principales se realizó con la función PCA incorporada de Matlab®, utilizando el algoritmo de descomposición en valores singulares (SVD).

4. RESULTADOS

El objetivo del análisis es lograr diferenciar las muestras según su tipo y grado de envejecimiento. Las propiedades de fractura son vitales para la seguridad del motor CSP [4]. Por esa razón, el primer análisis realizado se centró únicamente en las propiedades a fractura recogidas en la Tabla 2. En la Figura 1(a) se muestra el biplot resultante respecto a las dos primeras componentes principales, PC1 y PC2, las cuales conservan aproximadamente el 68% de la información contenida en las variables originales. El resultado obtenido es parcialmente satisfactorio puesto que, aunque se logra observar a las muestras de CSP en grupos diferenciados según el tipo de envejecimiento al que se han sometido, los grados de envejecimiento no se distinguen en la mayoría de los casos. También es posible observar las cargas que indican la influencia de las variables originales en el gráfico PC1 vs. PC2. Para esta representación, PC1 se asocia positivamente a δ_c^R y C_1^* , mientras que negativamente a casi todas las demás variables de fractura. Por su parte, la PC2 se relaciona positivamente con J_c^R , las constantes de crecimiento de grietas C_1 y C_1^* y la tensión cohesiva σ_m . Las muestras de material envejecido mecánicamente muestran un descenso en según la PC2 con respecto a las muestras no envejecidas a medida que σ_m aumenta con este envejecimiento, y la resistencia al crecimiento de grietas disminuye [18]. El envejecimiento térmico está relacionado aquí con valores más bajos de PC1 en comparación con el material no

envejecido, lo que está vinculado al aumento de la densidad de entrecruzamiento provocado por la exposición a alta temperatura [19], resultando en un material con una mayor resistencia a la propagación de las grietas. Por su parte, el envejecimiento por ozono se ve influenciado en la dirección opuesta al proceso de envejecimiento térmico, asociado con un PC1 más alto impulsado por mayores valores de δ_c^R y C_1^* , ya que la movilidad de las cadenas poliméricas aumenta con las reacciones de ozonólisis.

Tras la obtención de un resultado parcialmente satisfactorio con las propiedades de fractura, se realizó un análisis añadiendo las propiedades de tracción uniaxial recogidas en la Tabla 1. Es importante recordar que el PCA es un análisis factorial empleado para la reducción dimensional de un problema, por lo que aun añadiendo más variables (información) al análisis, se puede reducir el problema a dos o tres nuevas componentes. El resultado del análisis se muestra en la Figura 1(b) en términos de las dos primeras componentes principales, las cuales son capaces de conservar aproximadamente un 72% de la información contenida en las variables originales. Los resultados obtenidos muestran una mayor diferenciación de los grupos de muestras en comparación con el PCA anterior. De nuevo, los envejecimientos térmico y con ozono están relacionados con un desplazamiento según la PC1 en sentidos contrarios. Esto se debe a la influencia de cada tipo de envejecimiento acelerado sobre la microestructura del CSP, lo que está ligado a mayor rigidez y resistencia del material envejecido térmicamente en comparación con el aumento de la flexibilidad y la reducción de la capacidad resistente del material envejecido con ozono. Por su parte, el envejecimiento acelerado de origen mecánico se desplaza a lo largo de la PC2 con respecto a las muestras de material sin envejecer, lo que identifica claramente una diferente naturaleza de los efectos provocados por este envejecimiento.

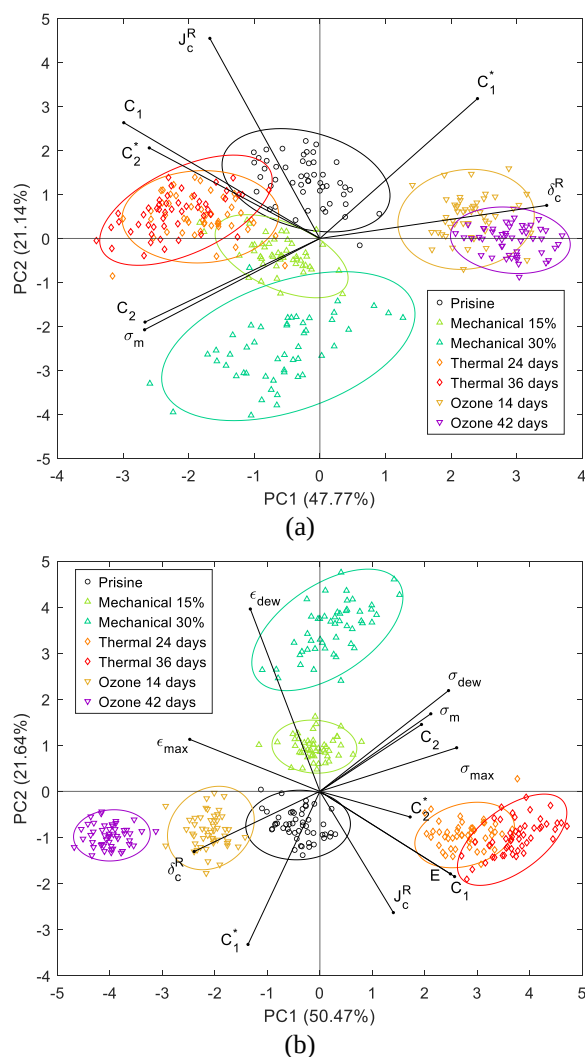


Figura 1. Análisis por componentes principales, biplot PC2 vs. PC1. (a) Datos de fractura como fuente (Tabla 2), (b) datos de tracción y fractura como fuente (Tabla 1 y Tabla 2).

5. CONCLUSIONES

La aplicación del análisis de componentes principales (PCA) para evaluar la degradación por envejecimiento de los propulsores sólidos de material compuesto se ha presentado como una herramienta potencial para su uso en programas de vigilancia. Esta técnica no sólo es capaz de identificar muestras envejecidas respecto a no envejecidas, sino también identifica los diferentes tipos de envejecimiento acelerado al que se han sometido estos materiales, siendo de origen mecánico, térmico y por ozono. Además, este resultado satisfactorio ha sido posible teniendo únicamente en cuenta variables obtenidas a través de ensayos de relajación uniaxial, tracción y fractura. Por ello, este tipo de análisis también permitiría la optimización de las pruebas de vigilancia, identificando los ensayos y propiedades necesarios a analizar, reduciendo los costes relacionados con las pruebas de vigilancia de los motores de CSP.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer, en primer lugar, al Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial (INTA) por facilitar el acceso a los materiales y a las instalaciones para la realización de los ensayos experimentales y, en segundo lugar, al Ministerio de Ciencia Innovación y universidades por la financiación a través de los proyectos PID2019-108968RB-I00 and PID2022-140868OB-I00.

REFERENCIAS

- [1] H. Naseem, J. Yerra, H. Murthy, P.A. Ramakrishna, Ageing studies on AP/HTPB based composites solid propellants, *Energetic Materials Frontiers*. 2 (2021) 111–124.
- [2] Z. Wang, H. Qiang, G. Wang, B. Geng, Strength criterion of composite solid propellants under dynamic loading, *Defence Technology*. 14 (2018) 457–462.
- [3] C. Wu, X. Fu, H. Li, Research progress on crack propagation behavior of solid propellant, *AETR*. 1 (2023) 878.
- [4] G.S. Tussiwand, V.E. Saouma, R. Terzenbach, L.T. De Luca, Fracture Mechanics of Composite Solid Rocket Propellant Grains: Material Testing, *Journal of Propulsion and Power*. 25 (2009) 60–73.
- [5] W.G. Knauss, A review of fracture in viscoelastic materials, *International Journal of Fracture*. 196 (2015) 99–146.
- [6] C. Dubois, F. Perreault, Shelf Life Prediction of Propellants Using a Reaction Severity Index, *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 27 (2002) 253–261.
- [7] H. Shekhar, Prediction and Comparison of Shelf Life of Solid Rocket Propellants Using Arrhenius and Berthelot Equations, *Propellants Explo Pyrotec*. 36 (2011) 356–359.
- [8] S. Chelouche, D. Trache, R. Benlemir, A. Soudani, Principal Component Analysis of FTIR Data to Accurately Assess the Real/Equivalent In-Service-Times of Homogenous Solid Propellant, *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 47 (2022).
- [9] R. López, A. Salazar, J. Rodríguez, Fatigue crack propagation behaviour of carboxyl-terminated polybutadiene solid rocket propellants, *International Journal of Fracture*. 223 (2020) 3–15.
- [10] L. Mullins, Softening of Rubber by Deformation, *Rubber Chemistry and Technology*. 42 (1969) 339–362.
- [11] AOP-48, Explosives, nitrocellulose-based propellants, stability test procedures and requirements using stabilizer depletion, North Atlantic Treaty Organization (NATO), 2008.
- [12] M. Martínez, Structural integrity of composite solid propellant based on a carboxyl-terminated polybutadiene binder, PhD thesis, King Juan Carlos University, 2024.

- [13] M. Martínez, R. López, J. Rodríguez, A. Salazar, Aging effects on the structural integrity of carboxyl terminated polybutadiene propellants, *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. 136 (2025) 104828.
- [14] R.A. Schapery, Correspondence principles and a generalized J integral for large deformation and fracture analysis of viscoelastic media, *International Journal of Fracture*. 25 (1984) 195–223.
- [15] C.D. Bencher, R.H. Dauskard, R.O. Ritchie, Microstructural damage and fracture processes in a composite solid rocket propellant, *Journal of Spacecraft and Rockets*. 32 (1995) 328–334.
- [16] J. Xu, Y. Ju, B. Han, C. Zhou, J. Zheng, Research on relaxation modulus of viscoelastic materials under unsteady temperature states based on TTSP, *Mechanics of Time-Dependent Materials*. 17 (2013) 543–556.
- [17] STANAG 4506, Explosive Materials, Physical/Mechanical Properties Uniaxial Tensile Test, North Atlantic Treaty Organization (NATO), 2000.
- [18] C.T. Liu, Effect of predamage on crack growth behavior in a particulate composite material, *Journal of Spacecraft and Rockets*. 32 (1995) 533–537.
- [19] H. Naseem, H. Murthy, P.A. Ramakrishna, Accelerated ageing of composite solid propellants under cyclic temperature variations, *Journal of Energetic Materials*. 39 (2020) 452–478.

ESTUDIO DE ESTRUCTURAS METÁLICAS DEL PATRIMONIO HISTÓRICO MEDIANTE MICROSCOPIA ÓPTICA

L. Rodríguez^{1*}, S. Ruiz¹, B. Mohamed¹, A. Morales¹

¹ CEDEX – Laboratorio Central de Estructuras y Materiales, Alfonso XII, 3-5, Madrid, 28014, Spain

* Laura Rodríguez: laura.rodriguez@cedex.es

RESUMEN

Entre los bienes que forman el patrimonio histórico, se pueden encontrar varios puentes de ferrocarril y de carreteras contruidos con diferentes aleaciones hierro-carbono. Durante su vida útil, han estado expuestos a distintos agentes externos que han provocado algunos deterioros en las estructuras metálicas como corrosión, fisuras, defectos, fracturas... Para la evaluación de los daños alcanzados, además de una caracterización físico-mecánica del material, es aconsejable añadir una identificación de la composición microestructural.

En la presente comunicación, se muestran varios resultados obtenidos de diferentes puentes metálicos tanto de la evaluación de sus propiedades tenso-deformacionales como de la caracterización de la estructura micrográfica detallada de los aceros analizados mediante microscopía óptica.

PALABRAS CLAVE: Acero estructural, Patrimonio, Microscopio óptico.

ABSTRACT

Among the assets that make up the historical heritage, you can find several road and railway bridges built with different iron-carbon alloys. During their useful life, they have been exposed to different external agents that have caused some deterioration in the metal structures such as corrosion, cracks, defects, fractures... To evaluate the damage achieved, in addition to a physical-mechanical characterization of the material, it is advisable to add an identification of the microstructural composition.

In this communication, several results obtained from different metallic bridges are shown, both from the evaluation of their stress-strain properties and from the characterization of the detailed micrographic structure of the steels analyzed by optical microscopy.

KEYWORDS: Structural Steel, Historical Heritage, Optical Microscope.

1. INTRODUCCIÓN

Durante varios años, el Laboratorio Central de Estructuras y Materiales ha llevado a cabo una campaña de estudio de varios de estos puentes, tanto de carreteras como de ferrocarril. Esta tarea ha consistido en la recogida de muestras de materiales metálicos procedentes de dichas estructuras y la realización de diferentes ensayos como el de tracción y de flexión por choque, además de un análisis químico y una evaluación de su estructura metalográfica.

Estos puentes contruidos a finales del siglo XIX y principios del siglo XX, situados en diferentes puntos de

la geografía española, han visto comprometidas sus estructuras por graves problemas de corrosión y/o oxidación después de más de un siglo de exposición ambiental.

En la presente comunicación, se van a presentar los resultados de tres de los puentes estudiados. Se trata de puentes metálicos de ferrocarril, contruidos en la misma época y situados en el norte de España, por lo tanto, con la misma exposición climática. En la Figura 1 se pueden ver dos de tres puentes analizados.



Figura 1. Imagen de dos de los puentes estudiados

2. EXPERIMENTAL

Las muestras recibidas en el laboratorio fueron recogidas por el Área de Estudios y Auscultación de Estructuras del LCEYM del CEDEX. En la Tabla 1 que se muestra a continuación, se relacionan los puentes estudiados y las muestras recogidas en cada uno de ellos:

Tabla 1. Puentes estudiados y muestreo

PUENTE	MUESTREO
Puente A metálico roblonado (1904)	A: chapa de acero
Puente B metálico con estructura de arco exento (1910)	B: chapa de acero
Puente C metálico roblonado con estructura recta (principios s XX)	C: chapa de acero

De las muestras recibidas, se mecanizaron las correspondientes probetas para la realización de los ensayos de caracterización del material que consistían en: ensayo de tracción, ensayo de flexión por choque a diferentes temperaturas, análisis químico y estudio metalográfico. En la Figura 2 se ve la distribución de la muestra recibida de uno de los Puentes para los diferentes ensayos.

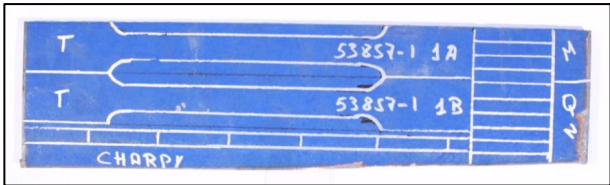


Figura 2. Distribución del material recibido del Puente B para los diferentes ensayos

Todas las muestras venían externamente cubiertas de pintura envejecida y en algunas ocasiones la muestra era muy escasa por lo que para la preparación de las probetas de análisis químico y estructura metalográfica se empleó el material de una de las zonas de amarre de mordazas de las probetas de tracción una vez realizado el ensayo.

En la muestra recibida del Puente A, al limpiarla y mecanizar las probetas se puso de manifiesto que el material presentaba una aparente estratificación en la dirección paralela a la superficie, observándose incluso separación entre los distintos estratos en los extremos de las probetas, como se puede ver en la Figura 3.

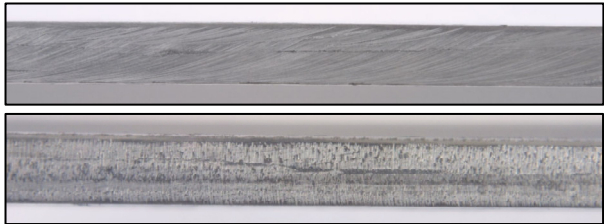


Figura 3. Corte lateral de las probetas de tracción para el Puente A

El **ensayo de tracción** se realizó de acuerdo con las especificaciones de la norma *UNE-EN ISO 6892-1 Ensayo de tracción. Método de ensayo a temperatura ambiente* [1].

El **ensayo de flexión por choque** sobre probeta Charpy se realiza sobre probetas mecanizadas de acuerdo con la norma *UNE-EN ISO 148-2 Materiales metálicos. Ensayo de flexión por choque sobre probeta de Charpy. Método de ensayo* [2]. La entalla de las probetas empleadas es de tipo “V” y la energía nominal del ensayo de 300 J, aplicada mediante péndulo. Las temperaturas de ensayo se han establecido en +20 °C, -20 °C para los Puentes A y C; +20 °C, 0 °C y -20 °C para el Puente B. Antes del ensayo se han medido las probetas (longitud, altura y anchura) y se ha comprobado la altura bajo entalla, el ángulo de entalladura, el radio del fondo de la entalladura, la distancia del eje de la entalladura al extremo de la probeta y la rugosidad superficial.

Para la realización del **análisis químico**, se han empleado diferentes técnicas analíticas en función del elemento a determinar: para el contenido de carbono y azufre se ha empleado un analizador de infrarrojos, para el contenido de nitrógeno se ha empleado un analizador de nitrógeno mediante conductividad térmica y para el resto de elementos químicos (Al, Si, P, V, Cr, Mn Ni, Cu y Mo)

se ha usado la técnica de espectrometría de emisión atómica de chispa, con sus correspondientes materiales de referencia certificados.

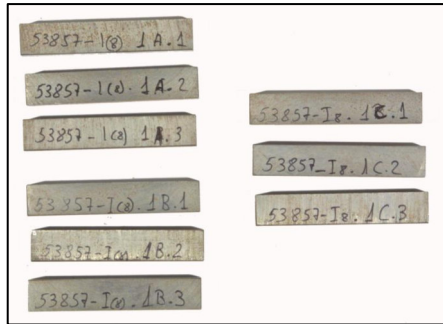


Figura 4. Probetas mecanizadas para el ensayo de flexión por choque para el Puente B

Por último, para la **evaluación de la estructura metalográfica**, se ha utilizado un microscopio óptico de reflexión.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1. Ensayo de tracción

Los ensayos de tracción se realizaron sobre probetas proporcionales de sección constante (Puentes A y C) o con cabezas de amarre (Puente B) mecanizadas por el propio laboratorio. En la Figura 5 se muestran las probetas antes del ensayo de tracción del Puente B.



Figura 5. Probetas mecanizadas para ensayo de tracción

A continuación, en la Tabla 2, se muestran los resultados obtenidos para el módulo elástico, límite elástico, resistencia a tracción y alargamiento de rotura de las muestras recibidas de los tres puentes analizados.

Para el Puente A, la probeta A-1T rompió en el tercio central y tras el ensayo se manifestó aún más la estratificación del acero en planos longitudinales. La superficie de contacto entre los distintos estratos mostraba presencia de pátinas finas de óxidos u otros compuestos (Figura 6).

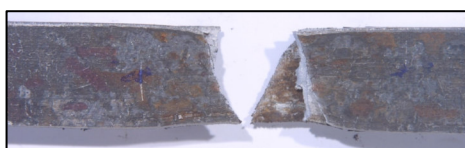


Figura 6: Detalle de la zona de rotura de la probeta A-1T

La probeta A-2T rompió en uno de los tercios extremos, en la zona de mordazas, con roturas parciales en distintas secciones de los estratos longitudinales centrales, y tras el ensayo se manifestó aún más la estratificación del acero en planos longitudinales. La superficie de contacto entre los distintos estratos mostraba presencia de pátinas finas de óxidos u otros compuestos (Figura 7).



Figura 7. Detalle de la zona de rotura de la probeta A-2T

Tabla 2: Resultados del ensayo de tracción

Probeta	Módulo elástico (GPa)	Límite elástico (MPa)	Resist. tracción (MPa)	Alarga. de rotura (%)
A-1T	211	289	388	29
A-2T	211	275	332	11
B-1T	273	327	358	33
B-2T	201	339	441	30
C-1T	216	259	365	33
C-2T	224	247	326	38

Las mencionadas roturas parciales en distintas secciones se manifiestan en el gráfico de tracción mediante irregularidades en la zona plástica (Figura 8). El alargamiento de rotura de la probeta A-2T es un 62 % inferior al de la probeta A-1T y se debe considerar como un resultado no válido dado que la rotura se ha producido en la zona de agarre de las mordazas y fuera de la longitud calibrada.

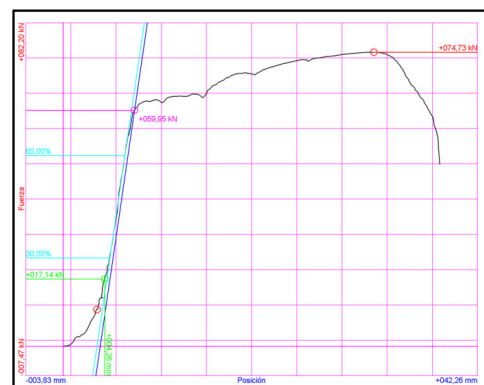


Figura 8. Probeta A-2T. Gráfico de tracción

Para el puente B, las probetas B-1T y B-2T rompieron a una distancia superior a $L_0/3$ del punto de referencia más próximo. En las secciones de rotura se manifestaron ciertas estratificaciones del acero en planos paralelos a la superficie de la chapa (Figuras 9 y 10).

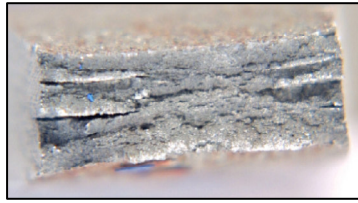


Figura 9. Sección transversal de la zona de rotura. Probeta B-1T

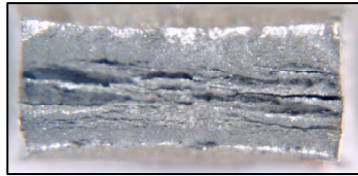


Figura 10. Sección transversal de la zona de rotura. Probeta B-2T

El material ensayado del Puente B presenta un buen comportamiento en cuanto a valores de límite elástico y alargamiento en rotura, obtenidos en el ensayo de tracción. Los valores de resistencia máxima obtenidos en cada una de las probetas resultan dispares; mientras que un resultado indica un adecuado comportamiento del material (B-2T) el otro presenta una resistencia significativamente menor (B-1T). El gráfico tensión deformación de esta última probeta (Figura 11) presenta una amplia zona de cedencia y una relación entre la resistencia a tracción y el límite elástico baja. El comportamiento en rotura de las dos probetas sometidas al ensayo de tracción, aunque fueron mecanizadas de material prácticamente adyacente, resulta heterogéneo.

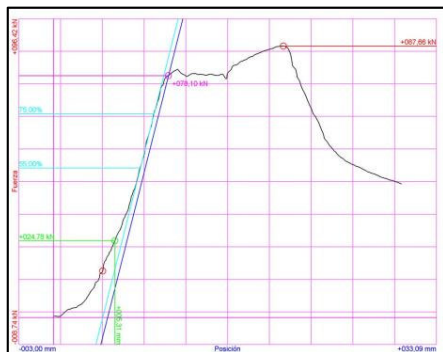


Figura 11. Probeta B-1T. Gráfico de tracción

Las probetas C-1T y C-2T rompieron en el tercio central, sin ninguna singularidad en la sección de rotura (Figuras 12 y 13).

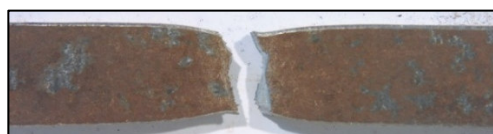


Figura 12. Detalle de la zona de la rotura de la probeta C-1T

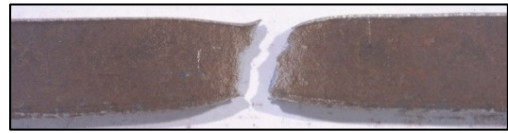


Figura 13. Detalle de la zona de la rotura de la probeta C-2T

3.2. Ensayo de Charpy

Para el puente A, las dos probetas A-C1 y las probetas 1 y 3 de la serie A-C2 no rompieron en el plano de la entalla, sino que la rotura se propagó en los planos longitudinales de estratificación del acero, mostrando las pátinas de óxidos y otros compuestos en las superficies de contacto (Figuras 14 y 15). Este tipo de rotura no ha permitido medir realmente la energía absorbida en el ensayo de flexión por choque, al no producirse la fractura en el plano deseado; por ello los resultados se consideran no válidos para la medición pretendida.



Figura 14. Perfil de la probeta A-C1-1 después del ensayo de flexión por choque a t^a ambiente



Figura 15. Perfil de la probeta A-C2-3 después del ensayo de flexión por choque a -20°C

La probeta 2 de la serie A-C2 si rompió en el plano de la entalla, por lo que su resultado se considera válido (Figura 16).

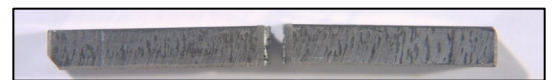


Figura 16. Probeta A-C2-2 después del ensayo de flexión por choque a -20°C

Las probetas ensayadas para el puente B presentan distintos tipos de fractura con porcentajes variados de rotura por cizallamiento y rotura por clivaje (frágil); aunque en general la deformación en la sección de fractura es baja y predomina la rotura frágil con fractura por clivaje. Todas las roturas fueron completas, con separación de ambas partes de las probetas. Se aprecia cómo, cuanto mayor es el porcentaje de rotura por cizallamiento mayor es la energía absorbida en el ensayo de flexión por choque y la resistencia del material al efecto entalla. Se observan reducciones significativas de energía media al disminuir la temperatura, principalmente a la temperatura inferior de las ensayadas, -20°C , para la que el descenso de resistencia es muy significativo.

Tabla 3. Resultados del ensayo de Charpy

Condiciones del ensayo	Probeta	Energía (J)	Energía media (J)
Energía absorbida KV 300/5. Temperatura 20 °C	A-C1-1	7	8
	A-C1-2	9	
	A-C1-3	---	
Energía absorbida KV 300/5. Temperatura -20 °C	A-C2-1	13	12
	A-C2-2	16	
	A-C2-3	7	
Energía absorbida KV 300/7,5. Temperatura 20 °C	B-C1-1	27	25,3
	B-C1-2	14	
	B-C1-3	35	
Energía absorbida KV 300/7,5. Temperatura 0 °C	B-C2-1	15	21,3
	B-C2-2	35	
	B-C2-3	14	
Energía absorbida KV 300/7,5. Temperatura -20 °C	B-C3-1	3	5,3
	B-C3-2	6	
	B-C3-3	7	
Energía absorbida KV 300/5. Temperatura 20 °C	C-C1-1	19	19
	C-C1-2	19	
	C-C1-3	19	
Energía absorbida KV 300/5. Temperatura -20 °C	C-C2-1	10	9
	C-C2-2	9	
	C-C2-3	8	

En estas mismas probetas, en la sección de rotura, se manifiesta cierta estratificación del acero en planos paralelos a la superficie de la chapa; este detalle es más acentuado en las probetas en las que la fractura presenta mayor deformación y porcentaje de rotura por cizallamiento; esto es, en las probetas B-C1-1, B-C1-3 y B-C2-2 (Figura 17).

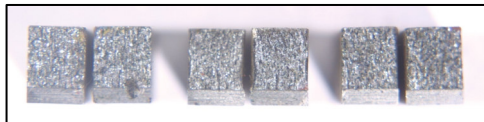


Figura 17. Superficie de fractura de las probetas B-C3 (-20 °C) después del ensayo Charpy

Para el puente C, la resistencia a la flexión por choque y al efecto entalla del material es adecuada a temperatura ambiente, apreciándose una disminución importante de dicha resistencia con la disminución de temperatura.

3.3. Análisis químico

Las probetas para el análisis químico fueron mecanizadas y preparadas por el laboratorio de un trozo de la muestra. El carbono equivalente fue calculado mediante la expresión (1):

$$CEV = C + \frac{Mn}{6} + \frac{Cr + Mo + V}{5} + \frac{Ni + Cu}{15} \quad (1)$$

Para la probeta del Puente A, el contenido de carbono es la mitad que para las otras dos muestras. El carbono es el elemento responsable de la dureza y la resistencia del acero por lo que, al ser más bajo, denotaría una capacidad resistente menor de la muestra de ese acero. En cambio, el contenido de nitrógeno es el doble, y también afectaría a las propiedades mecánicas del acero, lo que podría explicar una resistencia similar de estos aceros al resto con la misma composición restante.

Para las probetas del Puente B y del Puente C, teniendo en cuenta que se trata de un acero de bajo contenido en carbono, el porcentaje de este elemento, obtenido mediante análisis químico, es significativo.

Los porcentajes en elementos fragilizantes, fósforo y azufre, de la muestra del puente B resultan bastante elevados; principalmente el del fósforo, cuyo principal efecto es aumentar la fragilidad en frío del material. El azufre también provoca fragilidad en el acero, en este caso en caliente, aunque también puede colaborar a aumentar la fragilidad en frío.

Para la probeta del Puente C, no se aprecia en su composición química ningún elemento que haga pensar que el comportamiento del material vaya a ser diferente al obtenido en el resto de los ensayos realizados.

3.3. Evaluación estructura metalográfica

La estructura que presenta el material recibido de los tres Puentes corresponde a un acero al carbono en estado de

recocido. El examen micrográfico de las tres muestras presencia de constituyentes intermetálicos de ferrita y pequeña proporción de perlita en la matriz del acero

En la muestra del Puente A se aprecia presencia de inclusiones no metálicas en la estructura del acero. Su morfología apunta a su formación por atrapes de escoria en la masa de acero (Figura 18).

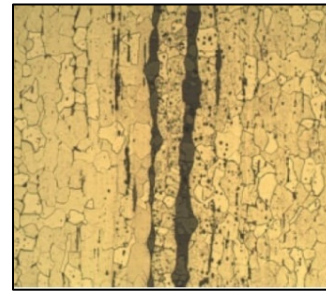
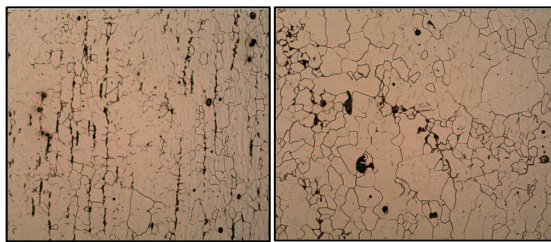


Figura 18. Evaluación micrográfica

Tabla 4. Resultados del análisis químico

Probeta: A-1Q - CEV = 0,14 %											
C (%)	Si (%)	Mn (%)	P (%)	S (%)	Cr (%)	Mo (%)	Ni (%)	Cu (%)	V (%)	Al (%)	N (%)
0,048	<0,010	0,478	0,060	0,079	<0,015	<0,005	0,045	0,060	<0,005	<0,015	0,015
Probeta: B-1Q - CEV = 0,14 %											
C (%)	Si (%)	Mn (%)	P (%)	S (%)	Cr (%)	Mo (%)	Ni (%)	Cu (%)	V (%)	Al (%)	N (%)
0,156	<0,010	0,369	0,26	0,120	0,105	<0,005	0,018	0,039	<0,005	<0,015	0,007
Probeta: C-1Q - CEV = 0,17 %											
C (%)	Si (%)	Mn (%)	P (%)	S (%)	Cr (%)	Mo (%)	Ni (%)	Cu (%)	V (%)	Al (%)	N (%)
0,101	0,015	0,370	0,022	0,096	<0,015	<0,005	0,046	0,042	<0,005	<0,015	0,007

En las muestras de los Puentes B y C (Figuras 19 a 21) no se observan indicaciones de heterogeneidades físicas en la estructura del acero, en los diferentes campos muestrales ensayados.



Figuras 19 y 20. Evaluación micrográfica

Por último, en la muestra del Puente C se observa decarburación superficial en la estructura del acero (Figura 21).

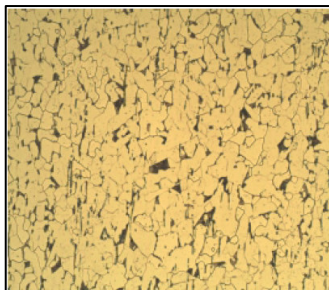


Figura 21: Evaluación micrográfica

4. CONCLUSIONES

El material analizado es un acero de bajo contenido en carbono cuyos constituyentes microscópicos son

principalmente ferrita y perlita. La estructura metalográfica presenta cierta heterogeneidad en el tamaño, forma y distribución de los constituyentes.

Las zonas de rotura, tanto de las probetas sometidas a tracción como de las sometidas al ensayo de resiliencia, ponen de manifiesto una cierta estratificación del material en planos paralelos a la superficie de la muestra original (chapa). Esta estratificación sólo resulta apreciable a simple vista en las muestras del Puente A no sometida a esfuerzos. Es menos visible en las roturas de apariencia más frágil obtenidas en alguno de los ensayos mediante péndulo Charpy que en las probetas con secciones de fractura más deformadas. A simple vista las superficies entre planos están libres de degradación o de presencia de subproductos, procedentes de corrosión u otros fenómenos excepto en las muestras del puente A.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer a todo el personal del Laboratorio Central de Estructuras y Materiales que ha intervenido en este estudio, en especial, a las Áreas de Estudios y Auscultación de Estructuras y de Productos de Construcción.

REFERENCIAS

- [1] UNE-EN ISO 6892-1 Materiales metálicos. Ensayo de tracción. Parte 1: Método de ensayo a temperatura ambiente. 2020.
- [2] UNE-EN ISO 148-1 Materiales metálicos. Ensayo de flexión por choque con péndulo Charpy. Parte 1: Método de ensayo. 2017.

ESTUDIO DE MODOS DE FALLO EN ELECTRODOS DEBIDO A LA EXPOSICIÓN A DESCARGA CORONA EN CORRIENTE CONTINUA

J. Jimenez-Aguirre^{1,2*}, A. Ridruejo¹, C. Muñoz-Rodríguez²

¹ ETSI Caminos Canales y Puertos de Universidad Politécnica de Madrid – Dpto. de Ciencia de Materiales, C/. Prof Aranguren 4, Madrid 28040, Spain

² Cedrión SL,

Av/. Gregorio Peces Barba 1, Leganés 28919, Spain

* Persona de contacto: jorge.jimeneza@upm.es

RESUMEN

La descarga corona es un fenómeno físico donde un campo eléctrico intenso entre electrodos de distinto tamaño en un fluido dieléctrico genera una ionización parcial y propulsa el fluido. Aunque existen múltiples patentes de propulsores electro-hidrodinámicos (EHD), su comercialización se ha visto limitada por la complejidad de su degradación.

Este estudio analiza la degradación del electrodo colector en descarga corona atmosférica en corriente continua. Se realizaron ensayos con electrodos de cobre expuestos a descarga durante 25, 50, 75 y 100 horas, evaluando eficiencia, estabilidad y propiedades eléctricas. Además, se inspeccionó la superficie de los electrodos con SEM.

Esta caracterización permite establecer dos principales mecanismos de daño superficial del electrodo durante su vida útil. En primer lugar, la exposición a atmósfera ionizada y productos de descarga corona (O_3 y NO_x) provoca la formación de una capa dieléctrica de óxido. En exposiciones cortas, esta capa aumenta la impedancia. En segundo lugar, asociado a la descarga parcial, se producen arcos eléctricos responsables de daño localizado en la superficie. En tiempos prolongados, la erosión por arcos elimina parte de la capa dieléctrica, reduciendo la impedancia y desestabilizando la descarga corona aumentando la frecuencia a la que se producen estos arcos.

PALABRAS CLAVE: Degradación por plasma frío, Corrosión por ozono, Erosión por descarga eléctrica.

ABSTRACT

Corona discharge is a physical phenomenon where a strong electric field between electrodes of different sizes in a dielectric fluid generates partial ionization and produces movement. Although multiple patents exist for electrohydrodynamic thrusters (EHD), their commercialization has been limited due to the complexity of their degradation. This study analyses the degradation of the collector electrode under atmospheric corona discharge in direct current. Tests were conducted with copper electrodes exposed to discharge for 25, 50, 75, and 100 hours, evaluating efficiency, stability, and electrical properties. Additionally, the electrode surface was inspected using SEM.

This characterization led to the definition of two main surface degradation mechanisms during the electrode service lifespan. On the one hand, exposure to ionized atmosphere and corona discharge products (O_3 and NO_x) forms a dielectric oxidation layer. During short exposure times, this layer increases the impedance of the system. On the other hand, electric sparking associated to corona discharge produces localized damage on the surface. During long exposure times, electric spark erosion partially removes the dielectric layer previously formed, therefore reducing the system impedance and destabilizing corona discharge leading to an increment in spark discharge frequency.

KEYWORDS: Non-thermal plasma degradation, Ozone-induced corrosion, Electrical discharge erosion.

1. INTRODUCCIÓN

En los últimos años, el desarrollo de tecnologías de enfriamiento basadas en propulsores electro-fluidodinámicos (EHD) ha emergido como una alternativa prometedora a los sistemas tradicionales de refrigeración en sectores como la microelectrónica y la aeronáutica [1]. Estos sistemas aprovechan el fenómeno del viento iónico generado por la descarga de corona para inducir flujos de aire sin necesidad de partes móviles,

reduciendo ruido y consumo energético [2]. Sin embargo, la durabilidad de los electrodos que componen estos dispositivos sigue siendo un desafío clave para su implementación industrial a gran escala.

Si bien numerosos estudios han abordado la degradación del electrodo emisor, la degradación del electrodo colector (o masa) ha recibido menos atención, a pesar de su impacto en la eficiencia y vida útil del sistema [3, 4]. Los mecanismos de degradación incluyen oxidación,

erosión por impacto iónico, formación de depósitos de plasma y cambios en la conductividad eléctrica, los cuales pueden comprometer la estabilidad del dispositivo a largo plazo [5].

Este estudio se centra en la caracterización de la degradación de electrodo colector en configuraciones de descarga corona en corriente continua positiva, evaluando el efecto de la exposición a las condiciones de operación en distintos materiales metálicos. Se realizarán caracterizaciones eléctricas del sistema evaluando el efecto de la degradación en las condiciones y eficiencia del dispositivo en función del tiempo y energía de exposición. A su vez, se busca correlacionar la variación de las propiedades eléctricas de los electrodos con los cambios físicos que sufren mediante la inspección posterior de la superficie, para lo cual se emplea microscopía electrónica de barrido (SEM) y espectroscopía de rayos X (EDS) [6, 7]. Además, se investigarán estrategias para mitigar la degradación mediante recubrimientos avanzados y modificaciones en la configuración de los electrodos [8].

Los resultados de este trabajo contribuirán al diseño de dispositivos de enfriamiento más robustos y eficientes, facilitando su aplicación en entornos exigentes como la electrónica de alta potencia y la aviación [9, 10].

2. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

2.1 Materiales

Para el estudio de la degradación del electrodo colector en sistemas electro-fluidodinámicos (EFD), se ha diseñado un dispositivo experimental basado en una configuración de descarga de corona de hilo frente a cilindro. Esta configuración permite un flujo eficiente del viento iónico sin acumulación excesiva de especies químicas activas en la superficie del colector, lo que facilita un análisis más preciso de su deterioro. Además, su comportamiento es comparable al de las configuraciones de hilo-plano previamente estudiadas en sistemas EFD [2].

El sistema experimental consta de un electrodo corona fabricado con un hilo de wolframio de 50 μm de diámetro, sometido a una tensión mecánica de 1 N para garantizar su estabilidad geométrica durante la descarga. El electrodo colector es una varilla cilíndrica de 5 mm de diámetro, situada a una distancia de 3 mm del electrodo emisor (gap). La longitud efectiva de la ventana de descarga de corona es de 50mm. Los soportes de la estructura están fabricados en policarbonato mediante impresión 3D, garantizando aislamiento eléctrico y resistencia mecánica adecuada, Figura 1.

Para evaluar la degradación del electrodo colector, se ha seleccionado uno de los materiales más ampliamente utilizados en aplicaciones eléctricas: cobre. El cobre posee una excelente conductividad eléctrica y buena resistencia

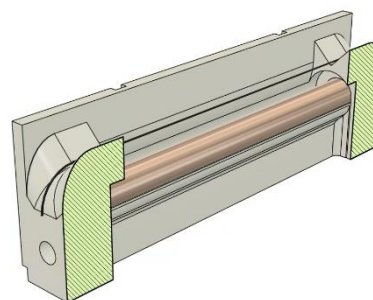


Figura 1. Dispositivo experimental EHD Hilo-Cilindro

a la corrosión. El cobre forma una capa protectora de óxido de cobre (Cu_2O y CuO) que puede ralentizar la corrosión, pero en ambientes agresivos puede desarrollar pátinas de carbonatos y sulfatos [11]. Sin embargo, en su aplicación en descarga corona expone la superficie a especies químicas activas e inestables como ozono y óxidos de nitrógeno, acidificación en presencia de humedad, deposición electrostática de partículas, a lo que se suma la aparición de arcos eléctricos entre electrodos de forma espontánea.

2.2 Caracterización eléctrica

La caracterización eléctrica de los dispositivos electrohidrodinámicos (EHD) se realiza mediante un barrido de voltaje controlado, donde el electrodo colector se mantiene a un potencial de masa y el electrodo corona se somete a un voltaje variable entre 1 kV y 10 kV. Para ello, se emplea una fuente de alta tensión Heinzinger LNC-10000-5, cuya regulación se efectúa externamente mediante una tarjeta de adquisición analógica USB-231 de MCC, garantizando un control preciso del voltaje aplicado.

Los barridos de voltaje se realizan de forma invertida, comenzando desde el voltaje máximo y reduciéndolo progresivamente hasta el apagado del dispositivo. Este enfoque minimiza la variabilidad asociada a la ignición de la descarga corona a bajos voltajes, un fenómeno afectado por la formación de especies cargadas en la región de ionización. Cada caracterización se repite cinco veces para asegurar la reproducibilidad de los datos.

El comportamiento eléctrico se describe mediante la curva característica corriente-voltaje (I-V), que sigue la ecuación empírica:

$$I = k(V - V_0)^n \quad (1)$$

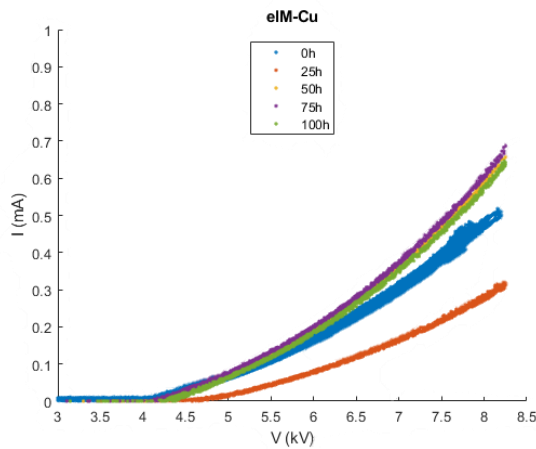
donde V_0 es el voltaje mínimo para que se alcance la ionización del medio, y k y n son parámetros de ajuste obtenidos experimentalmente que dependen de la geometría del dispositivo y de las condiciones ambientales. Esta ecuación es ampliamente utilizada en la literatura para modelar la descarga corona en dispositivos EHD [13].

Adicionalmente, se calcula la curva impedancia-voltaje (Z-V), definida por la ley de Ohm como:

$$Z = \frac{V}{I} = \frac{V}{k(V-V_0)^n} \quad (2)$$

La caracterización también permite identificar un límite superior de voltaje, ya que a medida que este aumenta, la probabilidad de formación de arcos eléctricos crece, generando inestabilidades en la descarga corona. La estabilidad del proceso depende de factores ambientales como la presión, temperatura y humedad, así como del tiempo de uso, ya que la degradación de los electrodos altera la distribución del campo eléctrico, afectando el rendimiento del dispositivo [14].

2.3 Ensayos de duración en servicio



Este punto de operación permite la ocurrencia frecuente de arcos eléctricos, favoreciendo la erosión por arco, pero manteniendo la exposición al plasma como el principal mecanismo de degradación del electrodo colector.

Las caracterización inicial indica un voltaje máximo de los dispositivos en torno a 9kV y un voltaje de encendido de 4kV por lo que se establece un voltaje de operación para los ensayos de 8kV.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La Figura 2 muestra las curvas I-V características de los dispositivos antes de iniciar la prueba de aguante (0h) y tras acumular 25, 50, 75 y 100 horas de funcionamiento. También se representa la impedancia en función del voltaje (curva Z-V) para cada uno de los tiempos.

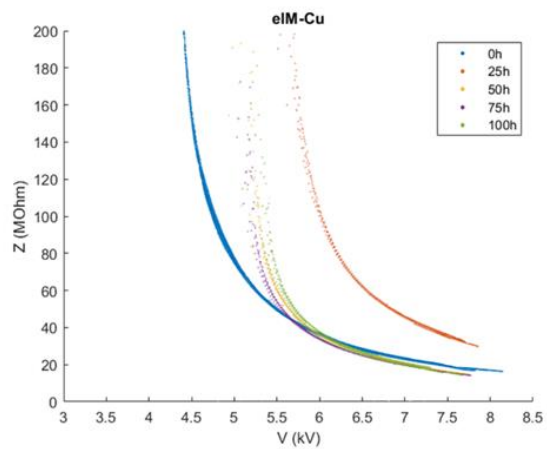


Figura 2. Curvas características I-V (izq.) y Z-V (der.) a 0, 25, 50, 75 y 100 horas de trabajo acumuladas.

Los ensayos de duración en servicio se realizan para evaluar la estabilidad y degradación del electrodo colector bajo condiciones operativas prolongadas. Para ello, los dispositivos se someten a funcionamiento continuo durante 100 horas, con caracterizaciones eléctricas I-V cada 25 horas. Este periodo se ha seleccionado con la expectativa de detectar variaciones en la impedancia, y la estabilidad de la descarga minimizando el daño producido durante la propia caracterización, la cual requiere llevar a los dispositivos a voltajes donde se producen arcos con mayor frecuencia. Para definir el voltaje de operación V_T en los ensayos se ha definido el voltaje máximo admisible V_F como aquel para el que se registran más de cinco arcos por minuto en las condiciones de operación. A medida que el voltaje se acerca a este umbral, los arcos eléctricos se producen con mayor frecuencia, y con mayor impacto erosivo. Para equilibrar la degradación por descargas y la exposición prolongada a la atmósfera activada, el voltaje seleccionado corresponde al 80 % del voltaje de fallo respecto al voltaje de encendido, V_0 :

$$\frac{(V_T - V_0)}{(V_F - V_0)} = 0.8 \quad (3)$$

En las curvas se observa que el voltaje de encendido aumenta tras las primeras 25 horas de operación. Este incremento sugiere que la degradación inicial del electrodo colector se debe principalmente a la formación de una capa de oxidación que actúa de aislante dieléctrico y aumenta el voltaje necesario para producir la ionización. Sin embargo, tras 50 horas de funcionamiento, el voltaje de encendido disminuye progresivamente acercándose al valor original, llegando a presentar menor impedancia de funcionamiento a alto voltaje. Esto indica la pérdida de propiedades dieléctricas en la capa formada antes de las primeras 50 horas.

T	V_0
0 h	4.1 kV
25 h	4.8 kV
50 h	4.2 kV
75 h	4.2 kV
100 h	4.3 kV

A voltajes más elevados, los dispositivos con 50, 75 y 100 horas de uso presentan impedancias incluso menores en comparación con los dispositivos sin uso. Esto sugiere que la evolución de la superficie del electrodo en este

periodo ayuda a la ionización del medio debido a heterogeneidades en el campo eléctrico formado entre electrodo corona y colector. Este fenómeno podría asociarse tanto a falta de continuidad en el recubrimiento formado como a la modificación de la topografía del electrodo colector.

La Figura 3 muestra el estado superficial de los electrodos de cobre tras 0, 25, 50, 75 y 100 horas de operación. Inicialmente, el electrodo de 0h exhibe una superficie brillante sin decoloración. Sin embargo, tras 25h de funcionamiento, la superficie adopta un aspecto mate y un tono ligeramente ennegrecido y homogéneo, lo que sugiere la formación de una capa superficial. Este cambio coincide con lo esperado tras detectar el aumento de impedancia en las curvas Z-V, lo que indica que la capa formada es dieléctrica e introduce una barrera resistiva en el sistema.

En los electrodos de 50 horas, se observa una mayor acumulación de material oscuro, aunque una línea longitudinal de cobre con pequeñas ramificaciones transversales es visible. En los de 75 y 100 horas, la capa



Figura 3. Macrografía mostrando el estado de electrodos sin uso (0h) y tras la exposición a descarga corona (25, 50, 75 y 100h).

superficial continúa ennegreciéndose, con un patrón similar al de 50 horas, pero más pronunciado. La presencia de zonas expuestas de cobre en los electrodos degradados sugiere que la capa dieléctrica no es homogénea y que la erosión por arco eléctrico ha afectado la continuidad de la superficie. Este comportamiento coincide con los resultados eléctricos,

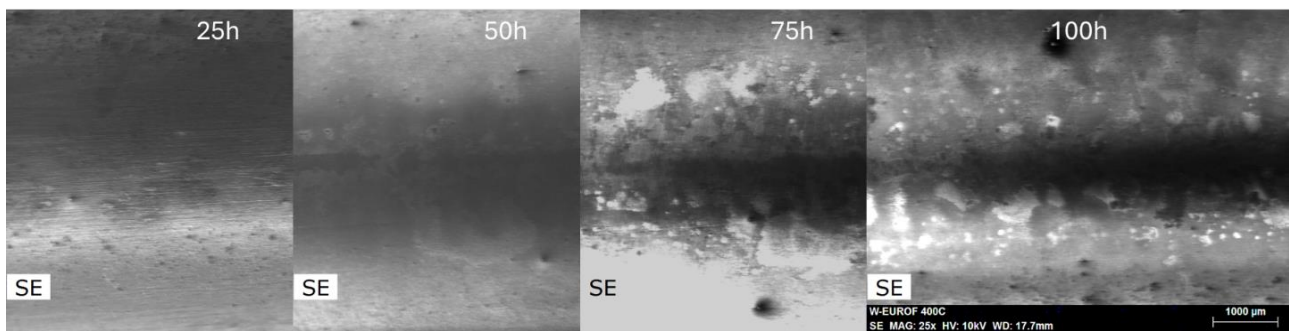


Figura 4. Micrografías en SEM de la superficie más expuesta a la descarga corona de los electrodos colectores sometidos a 25, 50, 75 y 100 horas de operación (de izq. a der.)

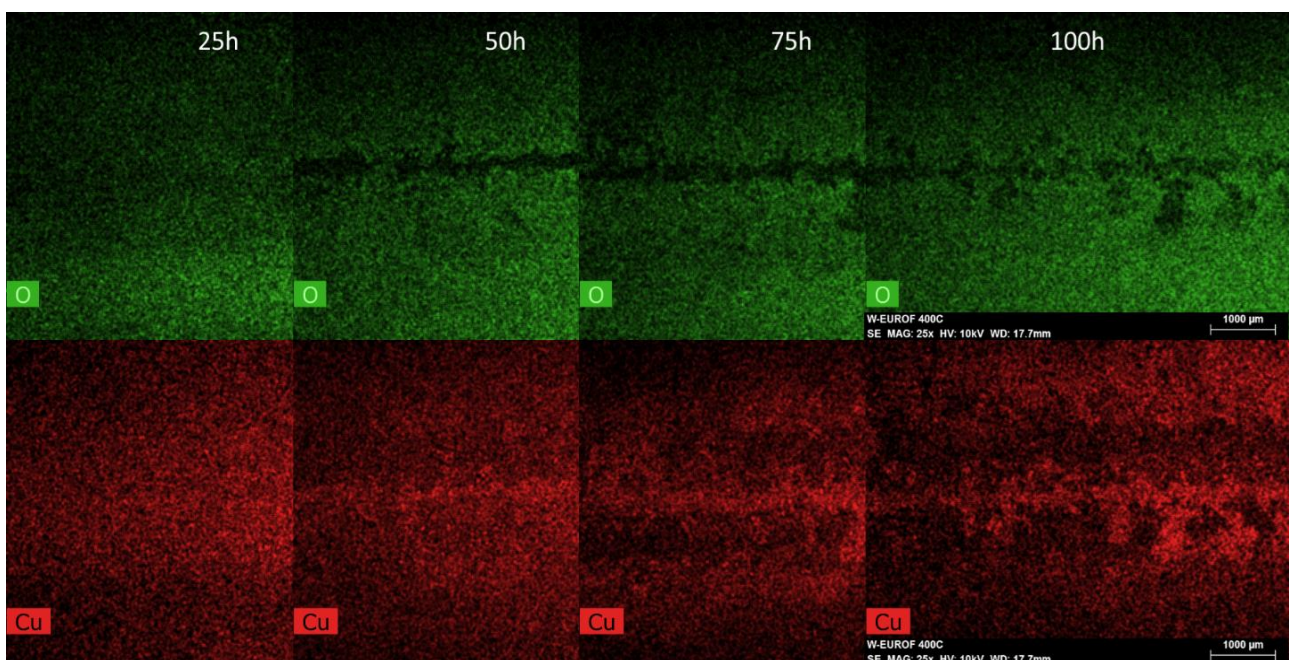


Figura 5. Mapa de composición en Oxígeno y Cobre observado mediante EDS correspondiente a las imágenes en la Figura 4

donde el voltaje de encendido se reduce tras 50 horas, facilitando la ionización del gas en el régimen de alta tensión, resultando en que la impedancia a alto voltaje es menor que en dispositivos de 0h.

Para caracterizar con mayor detalle la evolución superficial, la Figura 4 muestra micrografías en SEM de los electrodos a distintos tiempos de operación. En las imágenes obtenidas con electrones secundarios, no se observan cambios significativos en la topografía, lo que sugiere que la degradación no está dominada por un proceso de erosión sobre el cobre debido a las descargas. La ausencia de rugosidad marcada indica que el material base no ha sufrido ablación significativa por impactos energéticos.

No obstante, el análisis de composición (EDS) revela una alta concentración, no solo de oxígeno, sino también de carbono en la superficie de los electrodos utilizados durante más tiempo. Este resultado sugiere que la capa dieléctrica formada en estos electrodos envejecidos no es exclusivamente un producto de oxidación metálica en presencia de atmósfera activada y ozono, sino que también incluye una cantidad significativa de carbono, lo que explica el color negro observado. Es probable que el carbono provenga de la deposición electrostática de compuestos orgánicos presentes en la atmósfera, que hayan sido descompuestos por el plasma iónico y depositados en la superficie.

En la Figura 5, los mapas composicionales obtenidos por EDS confirman la correlación entre la presencia de oxígeno y la formación de capa dieléctrica. En zonas donde el electrodo aparece ennegrecido se detecta una alta concentración de oxígeno y una disminución en la señal de cobre por oclusión. En la región central de los electrodos más degradados, se observa cobre expuesto. La presencia de estas áreas con electrodo expuesto sin recubrir concuerda con la disminución de impedancia observada en las curvas Z-V a alto voltaje. La morfología superficial irregular resultante modifica la distribución del campo eléctrico, concentrando la intensidad de campo en la región expuesta, lo que facilita la ionización. Este efecto, a su vez, contribuye a la pérdida de estabilidad de la descarga corona, favoreciendo la formación más frecuente de arcos eléctricos. A medida que los arcos impactan repetidamente en la superficie del electrodo colector, es de esperar que la erosión avance de manera localizada, impidiendo la formación de una capa homogénea e incrementando el contraste. Este mecanismo de daño podría retroalimentarse, ya que cada nueva descarga de arco altera aún más la superficie y con ello el campo, promoviendo el aumento de la frecuencia a la que se produzcan los arcos siguientes y acelerando la degradación del electrodo a lo largo del tiempo.

4. CONCLUSIONES

La degradación del electrodo colector en descargas de corona prolongadas está dominada por la formación y erosión de una capa dieléctrica, cuya pérdida de

continuidad altera el campo eléctrico, reduce la estabilidad de la descarga y favorece la formación de arcos eléctricos, acelerando la degradación del sistema. Según los resultados obtenidos, la secuencia de mecanismos sería la siguiente:

- **Formación de capa dieléctrica:** Inicialmente, la superficie del electrodo colector desarrolla una capa de óxidos y depósitos carbonosos que incrementan la impedancia y el voltaje de encendido, dificultando la ionización.
- **Erosión por descargas de arco:** La exposición prolongada a descargas de corona genera arcos eléctricos que erosionan localmente la capa dieléctrica, exponiendo regiones de cobre subyacente.
- **Modificación del campo eléctrico:** La exposición de cobre altera la distribución del campo eléctrico, reduciendo la impedancia a alto voltaje y favoreciendo la ionización en condiciones operativas elevadas.
- **Aumento de la frecuencia de arcos:** La morfología irregular del electrodo degradado en la superficie intensifica el campo eléctrico en puntos específicos, aumentando la inestabilidad de la descarga y la recurrencia de arcos.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer la financiación recibida mediante el programa de Doctorado Industrial de la Comunidad de Madrid (IND2022/IND-23686) así como el apoyo de la empresa CEDRIÓN, S.L., con la que se desarrolla este doctorado industrial.

REFERENCIAS

- [1] M. Robinson, "Movement of air in the electric wind of the corona discharge," *Trans. Am. Inst. Electr. Eng. Part Commun. Electron.*, vol. 80, no. 2, pp. 143–150, May 1961, doi: 10.1109/TCE.1961.6373091.
- [2] E. Moreau, "Airflow control by non-thermal plasma actuators," *J. Phys. Appl. Phys.*, vol. 40, no. 3, p. 605, Jan. 2007, doi: 10.1088/0022-3727/40/3/S01.
- [3] T. C. Corke, M. L. Post, and D. M. Orlov, "Single dielectric barrier discharge plasma enhanced aerodynamics: physics, modeling and applications," *Exp. Fluids*, vol. 46, no. 1, pp. 1–26, Jan. 2009, doi: 10.1007/s00348-008-0582-5.
- [4] M. Cogollo de Cádiz, A. López Arrabal, A. Díaz Lantada, and M. V. Aguirre, "Materials degradation in non-thermal plasma generators by corona discharge," *Sci. Rep. 2021 111*, vol. 11, no. 1, Art. no. 1, Dec. 2021, doi: 10.1038/s41598-021-03447-w.
- [5] E. D. Fylladitakis, M. P. Theodoridis, and A. X. Moronis, "Review on the History, Research, and Applications of Electrohydrodynamics," *IEEE*

- Trans. Plasma Sci.*, vol. 42, no. 2, pp. 358–375, Feb. 2014, doi: 10.1109/TPS.2013.2297173.
- [6] J. R. Roth, *Industrial Plasma Engineering: Volume 2 - Applications to Nonthermal Plasma Processing*. New York: Routledge, 2017. doi: 10.1201/9780203750995.
 - [7] A. Jaworek, A. Krupa, and T. Czech, “Modern electrostatic devices and methods for exhaust gas cleaning: A brief review,” *J. Electrostat.*, vol. 65, no. 3, pp. 133–155, Mar. 2007, doi: 10.1016/j.elstat.2006.07.012.
 - [8] J.-S. Chang, P. A. Lawless, and T. Yamamoto, “Corona discharge processes,” *IEEE Trans. Plasma Sci.*, vol. 19, no. 6, pp. 1152–1166, Dec. 1991, doi: 10.1109/27.125038.
 - [9] A. Mizuno, “Generation of non-thermal plasma combined with catalysts and their application in environmental technology,” *Catal. Today*, vol. 211, pp. 2–8, Aug. 2013, doi: 10.1016/j.cattod.2013.03.029.
 - [10] M. K. Sharma, Y. Jang, J. Kim, H. Kim, and J. P. Jung, “Plasma Electrolytic Oxidation in Surface Modification of Metals for Electronics,” *J. Weld. Join.*, vol. 32, no. 3, pp. 27–33, 2014, doi: 10.5781/JWJ.2014.32.3.27.
 - [11] R. W. Revie, *Corrosion and Corrosion Control: An Introduction to Corrosion Science and Engineering*. John Wiley & Sons, 2008.
 - [12] G. S. Frankel, “Pitting Corrosion of Metals: A Review of the Critical Factors,” *J. Electrochem. Soc.*, vol. 145, no. 6, p. 2186, Jun. 1998, doi: 10.1149/1.1838615.
 - [13] H. A. Said, H. Nouri, and Y. Zebboudj, “Analysis of current-voltage characteristics in the wires-to-planes geometry during corona discharge,” *Eur. Phys. J. - Appl. Phys.*, vol. 67, no. 3, p. 30802, Sep. 2014, doi: 10.1051/epjap/2014140089.
 - [14] M. Cogollo De Cádiz, P. Martí Balsalobre, and A. Díaz Lantada, “Research on Wire-to-Two Fin Configuration for Positive Atmospheric Plasma by Electrokinetic Blower,” *Energies*, vol. 15, no. 15, p. 5443, Jul. 2022, doi: 10.3390/en15155443.

ENSAYOS MINIATURA

FRAGILIZACIÓN POR HIDRÓGENO DE ACEROS ESTRUCTURALES MEDIANTE ENSAYOS SPT IN-SITU: INFLUENCIA DEL TIPO DE ELECTROLITO

S. Otero*, S. Sampayo, G. Álvarez, M.M. Llera, C. Rodríguez

SIMUMECAMAT Research Group. Universidad de Oviedo
Edificio Departamental Oeste. 7.1.10. Campus Universitario, 33203 Gijón, Asturias-España

* Persona de contacto: oterosara@uniovi.es

RESUMEN

El hidrógeno se está posicionando como un elemento clave en la generación de energías limpias, como única alternativa en la lucha contra el cambio climático. Su uso conlleva el desarrollo de infraestructuras que garanticen su almacenamiento y distribución de forma segura, lo que requerirá la utilización de materiales resistentes a la fragilización por hidrógeno, entre los que se encuentran los aceros y sus uniones soldadas. En este contexto, el ensayo miniatura de punzonado (SPT) se presenta como una técnica altamente eficaz en la caracterización de estos materiales en presencia de hidrógeno, permitiendo su análisis a partir de muestras de tamaño reducido, lo que resulta fundamental en el caso de uniones soldadas o de componentes en servicio.

En este trabajo, se utiliza el ensayo SPT para caracterizar diferentes aceros expuestos a ambiente de hidrógeno producido por vía electroquímica utilizando dos tipos de electrolitos: ácido y básico. Además, en el SPT, al igual que ocurre en tracción, los parámetros más afectados por la fragilización son los relacionados con la deformación (alargamiento), con la energía de fractura y la deformación biaxial equivalente. Los resultados muestran que tanto la microestructura del material como las condiciones de carga tienen un impacto significativo en el comportamiento frente al hidrógeno de los distintos aceros.

PALABRAS CLAVE: Small Punch Test, fragilización por hidrógeno, aceros estructurales.

ABSTRACT

Hydrogen is emerging as a key element in the generation of clean energy, serving as the sole alternative in the fight against climate change. Its use entails the development of infrastructure that ensures its safe storage and distribution, necessitating materials resistant to hydrogen embrittlement, including steels and their welded joints. In this context, the small punch test (SPT) is presented as a highly effective technique for characterising these materials in the presence of hydrogen, enabling their analysis using small-sized samples, which is particularly crucial for welded joints or in-service components.

In this work, the SPT test is used to characterise different steels exposed to an electrochemically produced hydrogen environment using two types of electrolytes: acidic and basic. Moreover, in the SPT, as in tensile testing, the parameters most affected by embrittlement are those related to deformation (elongation), fracture energy and equivalent biaxial deformation. The results reveal that both the microstructure of the material and the loading conditions significantly influence the hydrogen resistance behaviour of the various steels.

KEYWORDS: Small Punch Test, Hydrogen embrittlement, structural steels.

1. INTRODUCCIÓN

La necesidad de desarrollar fuentes de energía limpias se ha convertido en uno de los principales desafíos de nuestra época, especialmente por el impacto global del cambio climático. En este contexto, el hidrógeno se presenta como un vector energético con un gran potencial para contribuir a un sistema de energía sostenible [1]. No obstante, su implementación enfrenta retos significativos, especialmente en lo que respecta a la infraestructura necesaria para su transporte y

almacenamiento. Estas infraestructuras, compuestas principalmente por tuberías y depósitos a presión fabricados en acero y ensamblados mediante procesos de soldadura, requieren una evaluación exhaustiva de su integridad y durabilidad [2].

Uno de los principales problemas asociados con estas infraestructuras es la fragilización por hidrógeno [3], un fenómeno que degrada las propiedades mecánicas de ciertos aceros, comprometiendo su resistencia y fiabilidad. La diferente respuesta de distintos tipos de

acero a este fenómeno subraya la necesidad de identificar los materiales más adecuados para cada aplicación.

Para ello se han de implementar los métodos de caracterización mecánica que resulten más adecuados en cada caso, lo que no resulta una tarea fácil. Por una parte, el uso de metodologías de ensayo que utilicen hidrógeno a presión resulta en muchos casos inabordable, debido al elevado coste de los equipos, por lo que resulta necesario buscar métodos de análisis alternativos que arrojen los mismos resultados, pero a un menor coste, como generar hidrógeno por métodos electroquímicos. Pero, para ello, será necesario analizar el tipo de electrolito y los parámetros electroquímicos más adecuados a cada caso. Por otro lado, hay que tener en cuenta la necesidad de reducir el tamaño de las probetas de ensayo, no sólo porque esto permitirá el análisis de infraestructuras en servicio sin necesidad de paradas, sino también porque el equipamiento necesario para su ensayo será mucho más sencillo, y, por tanto, más seguro y económico.

Ante estos desafíos, los ensayos miniatura, y en particular el Small Punch Test (SPT), se presentan como una alternativa prometedora. Este método permite reducir significativamente tanto el tiempo como la cantidad de material requerida para los ensayos, facilitando así una caracterización mecánica más eficiente en presencia de hidrógeno. Este ensayo, permite obtener las propiedades mecánicas a tracción e incluso estimar la tenacidad a la fractura en materiales metálicos, utilizando probetas de tan solo 10x10x0.5mm. El pequeño espesor de estas probetas, unido a una configuración de ensayo idónea para facilitar la entrada de hidrógeno en la zona más tensionada de las mismas, permite conseguir resultados de manera más rápida y eficiente, optimizando los recursos disponibles para la evaluación del comportamiento mecánico del acero.

Así, en este trabajo se lleva a cabo un exhaustivo análisis experimental del comportamiento en presencia de hidrógeno, generado por vía electroquímica, de diversos tipos de acero utilizando el ensayo SPT. Para ello se han utilizado dos tipos de electrolito (ácido y salino) manteniendo constantes el resto de los parámetros (densidad de corriente y velocidad de ensayo). Los resultados obtenidos permitirán categorizar los aceros en función de su respuesta a la fragilización por hidrógeno ante dos condiciones de servicio concretas.

2. MATERIALES Y PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

2.1. Materiales

Este estudio se centró en el análisis exhaustivo de una gama diversa de aceros, categorizados según su microestructura, con el objetivo de evaluar la influencia del hidrógeno en cada tipología. La Tabla 1 presenta las microestructuras examinadas, que incluyen aceros austeníticos, ferríticos, austenítico-ferríticos y martensíticos revenidos. Los materiales seleccionados exhiben un amplio espectro de propiedades mecánicas, con límites elásticos (σ_{YS}) que oscilan entre 223 y 1023

MPa, resistencias a la tracción (σ_{UT}) que varían entre 537 y 1120 MPa y alargamientos (A) entre el 12 y 63%.

Tabla 1. Microestructura y propiedades mecánicas de los aceros analizados.

Materiales	Microestr.	σ_{YS} (MPa)	σ_{UT} (MPa)	A (%)
316L	Austenita	223	588	63
AM 316L		518	677	-
904L		266	602	46
AISI 430	Ferrita	401	537	18.9
Dúplex 2205	Austenita + Ferrita	701	868	26.1
R5	Martensita revenida	920	1015	12
AF1BR		550	724	21.1
CrMo700		622	712	22.6
CrMo550		1023	1113	14
H8		790	857	21
CrMoV-BM		597	710	20.2
CrMoV-WM		1019	1120	16.9

2.2. Ensayo Small Punch Test (SPT)

Para la realización de los ensayos SPT, se emplearon al menos tres probetas con dimensiones de 10x10 mm² y un espesor nominal de 0.5 mm para cada tipo de material y condición de ensayo. Los ensayos miniatura se realizaron utilizando un utillaje estándar, que cumple los requisitos de la norma UNE-EN 10371:2022 [4], en el que se aplicaron ligeras modificaciones para la realización de ensayos en ambiente de hidrógeno *in-situ* generado electroquímicamente. Como puede verse en la Figura 1, el dispositivo SPT se utiliza invertido, es decir, la matriz que aloja la probeta se encuentra en la parte superior, mientras que el punzón se sitúa en la parte inferior. De este modo, la matriz también actúa como depósito del electrolito, que, por gravedad, siempre se encuentra en contacto con la cara de la probeta sometida a tracción, lo que facilita la entrada de hidrógeno al interior del material en el curso del ensayo. En ese alojamiento también se encuentra el contraelectrodo de platino que cierra el circuito eléctrico. Cabe señalar que tanto la matriz como el punzón, así como todos los materiales de fijación en contacto con el hidrógeno son cerámicos, lo que concentra el flujo de hidrógeno exclusivamente en la probeta de ensayo.

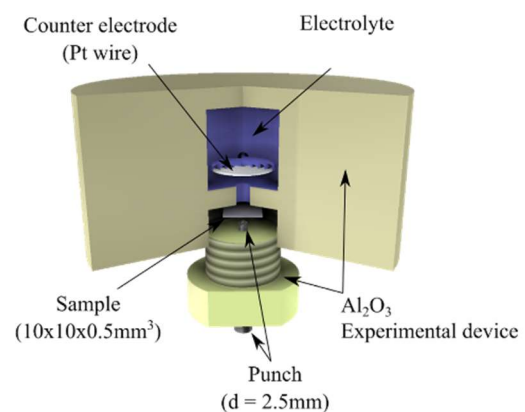


Figura 1. Esquema del dispositivo SPT utilizado [5].

El dispositivo SPT se acopla en una máquina “Instron” de 5 kN de capacidad de carga y el desplazamiento del punzón se mide utilizando un extensómetro tipo COD.

Para generar el flujo de hidrógeno se utilizaron dos electrolitos distintos: un medio ácido compuesto por 1M $\text{H}_2\text{SO}_4 + 0.25\text{g/l}$ de As_2O_3 , y un medio salino con una concentración del 3.5% NaCl. El resto de los parámetros de ensayo se mantuvieron constantes, utilizándose una densidad de corriente de 0.5mA/cm^2 y una velocidad de ensayo de 0.02 mm/min . La elección de ambos parámetros se basó en estudios previos, que indicaban, por una parte, que esa densidad de corriente era capaz de introducir en uno de los aceros analizados la misma cantidad de hidrógeno que tras su exposición a hidrógeno gas a una presión de 180 bares y una temperatura de 40°C [6], y por otra [5], que el uso de una velocidad de ensayo más lenta que 0.02mm/min , no producía un incremento significativo de la fragilización en los aceros.

Las curvas carga-desplazamiento de los ensayos SPT permiten obtener una serie de valores de carga (P_y , P_m) y de desplazamiento (d_m) que, mediante la aplicación de las correlaciones correspondientes, permiten calcular los valores del límite elástico (σ_{ys} , ecuación 1), resistencia a la tracción (σ_{ut} , ecuación 2), alargamiento (A , ecuación 3) e, incluso, la tenacidad a la fractura del material (J_{IC}), la cual se relaciona con el área encerrada bajo la curva hasta el punto de carga máxima (W_m , ecuación 4), así como con la deformación biaxial equivalente (ε_{qf} , ecuación 5).

$$\sigma_{ys} = \alpha \cdot \frac{P_y}{t^2} \quad (1) \quad \sigma_{ut} = \beta \cdot \frac{P_m}{t \cdot d_m} \quad (2) \quad A (\%) = \gamma \cdot \frac{d_m}{t} \quad (3)$$

$$J_{IC} = \kappa \cdot \frac{W_m}{t^2} \quad (4) \quad \varepsilon_{qf} = \ln \left(\frac{t}{t_f} \right) \quad (5)$$

donde t y t_f son, respectivamente, los espesores inicial y final de la probeta, y los coeficientes α , β , γ , y κ son constantes que dependen de la geometría de la probeta y del dispositivo de ensayo empleados [7].

Para cuantificar el efecto del hidrógeno en las propiedades mecánicas de los aceros analizados, se utilizó el Índice de Fragilización por Hidrógeno, HEI , que compara el valor de un cierto parámetro obtenido al aire, X_{Air} , con el obtenido en presencia de hidrógeno, X_H , mediante la ecuación (6):

$$HEI (\%) = \frac{(X_{Air} - X_H)}{X_{Air}} \cdot 100 \quad (6)$$

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La Figura 2 presenta las curvas carga-desplazamiento representativas del comportamiento de los distintos materiales mediante ensayos SPT, realizados tanto al aire (curvas negras) como en ambientes electroquímicos de hidrógeno ácido (curvas rojas) y salino (curvas azules). Por su parte, la tabla 2 recoge los valores medios de los distintos parámetros SPT asociados a las propiedades mecánicas de tracción y fractura de los ensayos realizados al aire, así como los valores del índice de fragilización correspondiente a cada parámetro en los ensayos realizados en ambiente de hidrógeno.

Como puede observarse tanto en las curvas como en la tabla 2, los parámetros P_y/t^2 y $P_m/t \cdot d_m$, relacionados con el límite elástico (ecuación 1) y la resistencia a la tracción (ecuación 2), apenas muestran variaciones significativas ante la exposición a hidrógeno electroquímico, excepto en los aceros martensíticos con resistencias superiores a 1000 MPa (R5, CrMo550 y CrMoV-WM), en los que se observa una ligera disminución en la resistencia a la tracción. En contraste, los parámetros relacionados con el alargamiento, d_m/t (ecuación 3), y con la tenacidad a la fractura, W_m/t^2 y ε_{qf} (ecuaciones 4 y 5), presentan una mayor sensibilidad a la presencia de hidrógeno, mostrando índices de fragilización de distinta magnitud en función del material analizado.

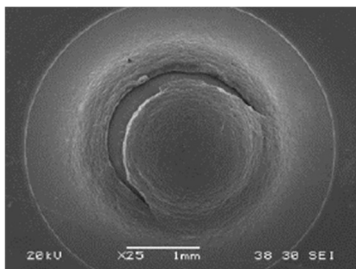
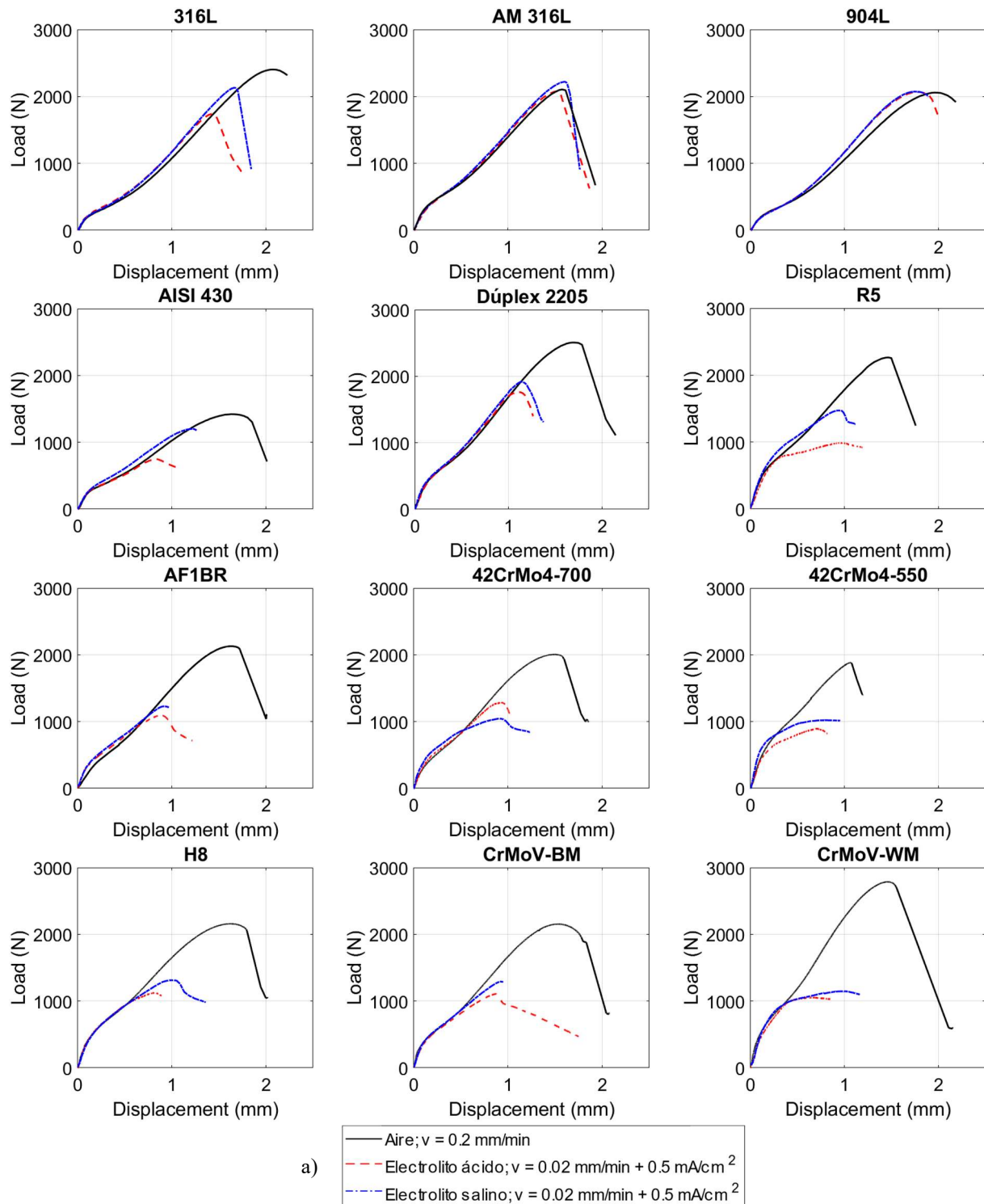
La sensibilidad al hidrógeno también se ve reflejada en las superficies de fractura. En el caso de los ensayos al aire y en los que no ha habido fragilización, los aceros exhiben un comportamiento dúctil característico, observándose la típica rotura en forma de “sonrisa” (Figura 2.b). Sin embargo, cuando el fenómeno de fragilización está presente (Figuras 2.c y 2.d), la forma de rotura cambia radicalmente, apreciándose claramente la presencia de grietas secundarias creciendo en dirección radial, y que recuerdan la rotura en forma de “estrella” típica de un comportamiento frágil en el ensayo SPT.

Analizando los resultados por familia de materiales, se observa que los aceros inoxidables austeníticos presentan la menor susceptibilidad al fenómeno de fragilización. En particular, el acero superaustenítico 904L [8], y el AM 316L, fabricado mediante técnicas aditivas, que se han mostrado completamente inmunes al fenómeno, independientemente del electrolito empleado.

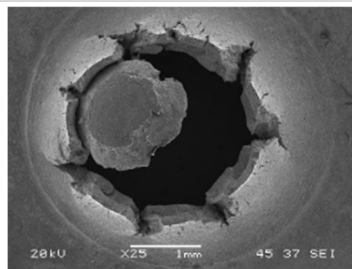
Los aceros ferríticos, sin embargo, ya muestran fragilización, sobre todo cuando se emplea un electrolito ácido, con HEIs que depende del porcentaje de ferrita en los mismos. Así el AISI 430 con un 100% de ferrita, muestra mayores índices de fragilización que el Dúplex 2205 con una microestructura 50% ferítica + 50% austenítica.

Finalmente, la familia de aceros que presenta la mayor sensibilidad a la fragilización por hidrógeno es la de los aceros martensíticos. Estos materiales exhiben HEIs elevados, incluso en presencia de electrolitos salinos, los cuales son considerablemente menos agresivos que los ácidos.

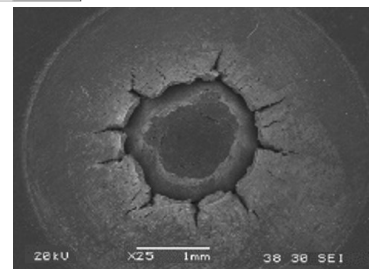
La sensibilidad a la fragilización por hidrógeno de las distintas familias de acero, así como la influencia del electrolito utilizado, puede apreciarse mucho mejor en la Figura 3, que recoge los HEIs basados en la energía de fractura de los distintos aceros para los dos electrolitos utilizados.



b)



c)



d)

Figura 2. a) Curvas SPT de los aceros analizados tanto al aire como en ambiente de hidrógeno y superficies de fractura del CrMoV-BM: b) Al aire, c) Electrolito ácido y d) Electrolito salino.

Material	P_y/t^2			$P_m/t \cdot d_m$			d_m/t			W_m/t^2			ε_{qf}		
	Aire	HEI (%)		Aire	HEI (%)		Aire	HEI (%)		Aire	HEI (%)		Aire	HEI (%)	
		Ác.	Sal.		Ác.	Sal.		Ác.	Sal.		Ác.	Sal.		Ác.	Sal.
316L	995	0	0	2124	0	0	4.51	32	21	10029	51	33	0.60	43	39
AM 316L	1582	0	0	2458	0	0	3.42	6	0	7051	7	0	0.58	0	0
904L	1056	0	0	1970	0	0	4.18	9	9	8427	11	11	0.07	0	0
AISI 430	1232	0	0	1703	0	0	3.42	48	27	5455	71	40	0.79	75	54
Dúplex 2205	1895	0	0	2751	0	0	3.68	41	31	9598	62	47	0.47	55	38
R5	2462	0	0	3180	35	11	3.03	38	33	8376	94	58	0.58	87	62
AF1BR	1692	0	0	2359	1	3	3.60	44	39	8315	68	66	1.06	71	69
CrMo700	1668	0	0	2466	1	2	3.35	40	48	7462	64	65	1.08	59	46
CrMo550	3226	28	10	3539	40	15	2.14	20	35	4890	86	70	0.39	88	84
H8	1890	0	0	2531	0	0	3.41	51	48	8677	66	60	0.98	70	59
CrMoV-BM	1771	5	1	2456	7	1	3.54	31	41	8414	70	63	1.23	75	73
CrMoV-WM	2683	0	0	3705	9	21	3.46	61	50	11917	95	88	0.77	79	77

Tabla 2. Parámetros SPT e Índices de Fragilización por Hidrógeno de los aceros analizados.

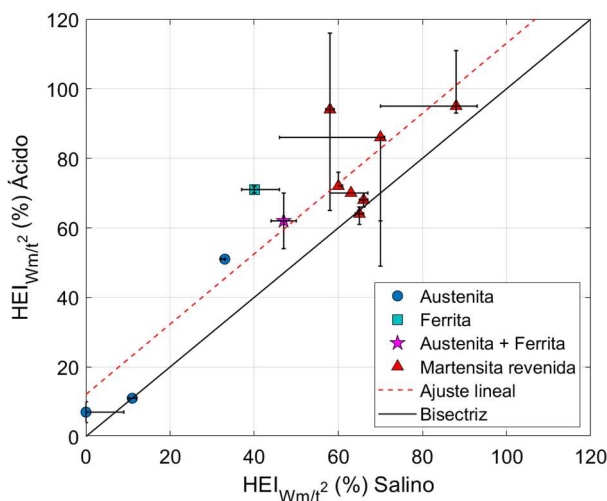
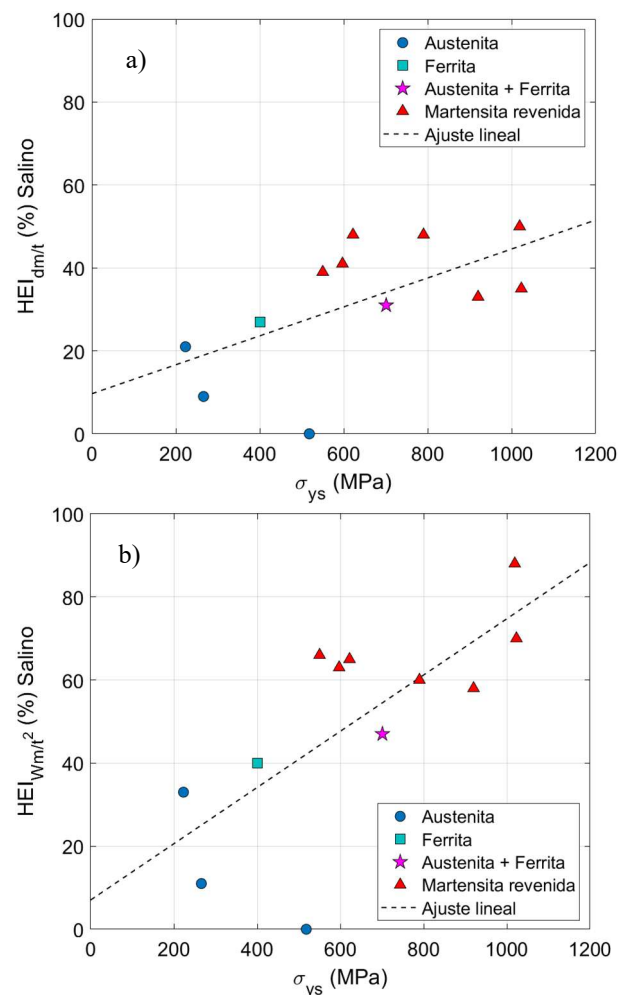


Figura 3. Comparativa de las fragilizaciones obtenidas utilizando electrolito ácido y salino.

Como puede observarse, el uso de un electrolito ácido, con un menor Ph y una mayor reactividad, se traduce en un incremento de la cantidad de hidrógeno que entra en el material lo que supone índices de fragilización de alrededor de un 15% más elevados cuando se utiliza el electrolito ácido. No obstante, considerando que el electrolito salino no sólo es capaz de captar perfectamente el fenómeno sino que se trata de un medio totalmente inocuo para el operador, se aconseja claramente su uso en estos ensayos frente al ácido.

Basándonos en esta percepción, en la Figura 4 se recogen los valores de los índices de fragilización correspondientes a los parámetros d_m/t (Figura 4.a), W_m/t^2 (Figura 4.b) y ε_{qf} (Figura 4.c), obtenidos con el electrolito salino, frente al límite elástico de los aceros analizados.



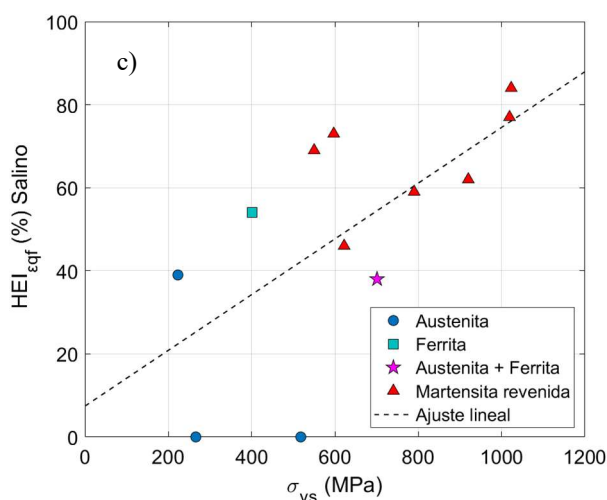


Figura 4. HEIs para: a) d_m/t , b) W_m/t^2 , c) ε_{qf} .

Como puede apreciarse, y de modo completamente similar a cuando se utilizan ensayos de fragilización convencionales (ensayos de tracción o de fractura) [9,10], sea cual sea el parámetro SPT utilizado en el cálculo del índice de fragilización, la susceptibilidad al hidrógeno crece con el valor del límite elástico del acero, si bien esta tendencia no puede aseverarse en todos los casos. Este es el caso de los aceros inoxidable austeníticos, donde el método de fabricación utilizado (AM 316L) o el uso de un acero más estable (904L) pueden producir la mejora conjunta tanto de la resistencia como del comportamiento frente al hidrógeno de los aceros. Lo mismo ocurre con los aceros inoxidable ferríticos (AISI 430), en los que la introducción de una segunda fase austenítica (Dúplex 2205), mejora de manera sensible su comportamiento. Así mismo, ligeras diferencias en cuanto a composiciones y métodos de fabricación explican el mejor comportamiento de algunos aceros martensíticos (R5, H8, CrMoV-BM) frente al resto.

4. CONCLUSIONES

Tras evaluar la susceptibilidad a la fragilización por hidrógeno de 12 aceros estructurales mediante ensayos SPT, realizados *in-situ* con electrolitos ácido y salino, se ha llegado a las siguientes conclusiones:

- El ensayo SPT resulta una herramienta potente, segura y fiable en el análisis del fenómeno de fragilización por hidrógeno de distintas familias de aceros.
- Los parámetros de ensayo que mejor reflejan el fenómeno de fragilización son los relacionados con el desplazamiento en carga máxima, la energía de fractura y la deformación biaxial equivalente.
- Aunque el uso de un electrolito ácido eleva los índices de fragilización en un 15% respecto al salino, por seguridad se recomienda el uso de este último como fuente de hidrógeno.

- Aunque la tendencia general es que el HEI aumente con la resistencia del acero, esta tendencia puede modificarse, variando tanto la composición química como los métodos de fabricación utilizados.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer la financiación recibida del Ministerio de Economía, Industria y Competitividad a través del proyecto PID2021-124768OB-C22 y a los Servicios Científico-Técnicos de la Universidad de Oviedo por el uso del MEB.

REFERENCIAS

- [1] R. Delaporte-Mathurin et al., "Parametric study of hydrogenic inventory in the ITER divertor based on machine learning," *Sci Rep*, vol. 10, no. 1, Dec. 2020, doi: 10.1038/s41598-020-74844-w.
- [2] G. Álvarez et al., "Hydrogen embrittlement of structural steels: Effect of the displacement rate on the fracture toughness of high-pressure hydrogen pre-charged samples," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 44, no. 29, pp. 15634–15643, Jun. 2019, doi: 10.1016/j.ijhydene.2019.03.279.
- [3] D. Wang et al., "Investigation of hydrogen embrittlement behavior in X65 pipeline steel under different hydrogen charging conditions," *Materials Science and Engineering: A*, vol. 860, Dec. 2022, doi: 10.1016/j.msea.2022.144262.
- [4] "UNE-EN 10371:2022; Small punch test method".
- [5] G. Álvarez et al., "Study of the influence of current density and displacement rate on hydrogen embrittlement using small punch tests," *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, vol. 125, Jun. 2023, doi: 10.1016/j.tafmec.2023.103838.
- [6] V. Arniella, "Comportamiento mecánico de aceros estructurales bajo carga electroquímica de hidrógeno in-situ para aplicaciones energéticas," Tesis Doctoral. Universidad de Oviedo. 2024.
- [7] T. E. García et al., "Estimation of the mechanical properties of metallic materials by means of the small punch test," *J Alloys Compd*, vol. 582, pp. 708–717, Jan. 2014, doi: 10.1016/j.jallcom.2013.08.009.
- [8] J. Michalska et al., "Hydrogen damage in superaustenitic 904L stainless steels," in *Journal of Materials Engineering and Performance*, Springer New York LLC, 2014, pp. 2760–2765. doi: 10.1007/s11665-014-1044-2.
- [9] V. Arniella, et al., "Hydrogen embrittlement of 2205 duplex stainless steel in in-situ tensile tests," *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, vol. 124, Apr. 2023, doi: 10.1016/j.tafmec.2023.103794.
- [10] V. Arniella et al., "Influence of the direction of ferrite-austenite banding on hydrogen embrittlement of 2205 duplex stainless steel," *Mater Charact*, vol. 215, Sep. 2024, doi: 10.1016/j.matchar.2024.114143.

ANÁLISIS DE LA FRAGILIZACIÓN POR HIDRÓGENO DE ACEROS ESTRUCTURALES MEDIANTE SPT: CARGA ELECTROQUÍMICA VERSUS HIDRÓGENO A PRESIÓN

S. Sampayo*, S. Otero, M. M. Llera, G. Álvarez, C. Rodríguez

SIMUMECAMAT Research Group. Universidad de Oviedo
Edificio Departamental Oeste. 7.1.10. Campus Universitario, 33203 Gijón, Asturias-España

* Persona de contacto: UO299393@uniovi.es

RESUMEN

El empleo del hidrógeno como vector energético es un campo de estudio de gran importancia en el marco de la lucha contra el cambio climático. Es conocido que el hidrógeno produce un efecto de fragilización en aceros, lo que hace necesario el estudio de su efecto en los materiales y uniones utilizados para la fabricación de los equipos destinados a su almacenamiento y transporte. El "Small Punch Test" (SPT) es una técnica de ensayo que permite evaluar materiales utilizando probetas de tamaño reducido, facilitando el estudio de materiales con poca disponibilidad, como zonas específicas de una soldadura o componentes en servicio. Además, este ensayo ha demostrado una gran eficiencia en el estudio de la fragilización por hidrógeno de aceros mediante carga de hidrógeno in-situ utilizando técnicas electroquímicas. No obstante, si el material debe trabajar conteniendo o transportando hidrógeno a presión, los ensayos deberían realizarse mediante carga de hidrógeno a presión, o en caso de utilizarse carga electroquímica, definir los parámetros de ensayo que proporcionan resultados semejantes a los obtenidos bajo presión de hidrógeno.

Con este objetivo, en primer lugar, se analizaron cuatro aceros estructurales con propiedades y microestructuras diferentes mediante ensayos de Small Punch en presencia de hidrógeno gas a 100 bares de presión, observando los efectos de la fragilización por hidrógeno. En segundo lugar, se compararon los resultados con estudios previos realizados sobre los mismos materiales con hidrógeno electroquímico con una densidad de corriente de 0.5 mA/cm².

PALABRAS CLAVE: Small Punch Test, fragilización por hidrógeno, ensayos in-situ, aceros estructurales

ABSTRACT

The use of hydrogen as an energy carrier is a field of great importance in the fight against climate change. It is known that hydrogen causes embrittlement in steels, which makes it necessary to study its effect on the materials and joints used for the manufacture of equipment intended for its storage and transport. The "Small Punch Test" (SPT) is a testing technique that allows the evaluation of materials using small-sized specimens, facilitating the study of materials with limited availability, such as specific areas of a weld or components in service. Furthermore, this test has proven to be highly effective in studying hydrogen embrittlement in steels by applying in-situ hydrogen charging using electrochemical techniques. However, if the material must work by containing or transporting hydrogen at pressure, tests should be conducted under hydrogen pressure, or if using electrochemical charging, the testing parameters should be defined to provide results similar to those obtained under hydrogen pressure.

With this objective, first, four structural steels with different properties and microstructures were analyzed using Small Punch tests in a hydrogen gas environment at 100 bar pressure, observing the effects of hydrogen embrittlement. Secondly, the results were compared with previous studies conducted on the same materials using electrochemical hydrogen with a current density of 0.5 mA/cm².

KEYWORDS: Small Punch Test, hydrogen embrittlement, in-situ tests, structural steels

1. INTRODUCCIÓN

El uso del hidrógeno como vector energético se posiciona como uno de los principales candidatos para impulsar el proceso de descarbonización. Sin embargo, para garantizar la integridad y la seguridad de las estructuras

que lo almacenan y transportan, es fundamental conocer el efecto de la interacción de este ambiente con los materiales que las conforman. Desde hace décadas se conoce el fenómeno de fragilización que el hidrógeno produce en los materiales metálicos, disminuyendo en gran medida sus propiedades mecánicas.

La caracterización mecánica de estos materiales en presencia de hidrógeno mediante ensayos convencionales requiere de instalaciones complejas y de elevado coste, además de grandes cantidades de material para el mecanizado de las muestras a ensayar. Es por ello, que actualmente se están buscando diferentes metodologías de ensayo para evaluar la fragilización por hidrógeno sin que esto conlleve un riesgo o un alto coste. Algunos grupos de investigación han optado por el uso del ensayo miniatura de punzonado, o Small Punch Test (SPT) para solucionar dicha problemática [1,2]. Este ensayo solo requiere de una pequeña muestra de 10x10x0.5 mm, lo que permite el estudio de materiales de los que existe poca cantidad disponible, como estructuras en servicio o zonas específicas de las soldaduras. Por otro lado, existen diferentes métodos para generar una atmósfera de hidrógeno durante el ensayo mecánico: electroquímica o gaseosa. Desde el punto de vista de sencillez y coste, el ensayo electroquímico es el idóneo, sin embargo, aún no está definido el procedimiento experimental óptimo para poder simular condiciones reales de servicio. La carga de hidrógeno puede realizarse previamente a la realización del ensayo mecánico (denominadas cargas ex-situ), o durante el ensayo (técnicas conocidas como in-situ), siendo la primera menos representativa de las condiciones reales de servicio e inadecuada para aceros con coeficientes de difusión elevados [3].

Con el fin de poder simular estas condiciones de servicio, la condición más representativa es la utilización de hidrógeno gas en un ensayo mecánico in-situ. En este aspecto, el SPT presenta ventajas considerables al reducir considerablemente el volumen de hidrógeno a utilizar, lo cual se traduce en una reducción de costes y aumento de la seguridad durante la realización de los ensayos.

Los parámetros empleados en un ensayo SPT en presencia de hidrógeno pueden alterar los resultados. Autores han demostrado la influencia de la velocidad de ensayo en los resultados, siendo los más lentos más dañinos para el material [1]. Además, el empleo de diferentes presiones puede afectar a la fragilización.

Por tanto, el objetivo del presente estudio es evaluar el efecto de la fragilización por hidrógeno en diferentes familias de acero con propiedades mecánicas y microestructuras muy disimilares entre ellas. Para ello se utilizará un dispositivo SPT con hidrógeno gas a presión durante el ensayo mecánico. Además, también se llevará a cabo una comparación entre los ensayos realizados mediante procedimientos electroquímicos y los del presente trabajo con el fin de ver las diferencias entre ambas técnicas y buscar una posible correlación entre metodologías.

2. MATERIALES Y PROCEDIMIENTOS

2.1 Materiales

Se han seleccionado cuatro aceros con diferentes microestructuras, límites elásticos (σ_{ys}), resistencias a tracción (σ_{ut}) y alargamientos (A) (Tabla 1). Por un lado, un acero inoxidable superaustenítico, laminado en caliente y que presenta un bajo límite elástico y gran ductilidad. Aumentando ligeramente el límite elástico, se escogieron aceros ya estudiados previamente por el grupo de investigación en ambientes ricos en hidrógeno: un acero estructural S355 con microestructura ferrito-perlítica [4] y un acero CrMo con martensita revenida [5]. Además de aceros obtenidos mediante métodos convencionales de fabricación, se incluyó el material de aporte de una soldadura de CrMoV, la cual presenta un comportamiento frágil y también ha sido analizada en estudios previos [6].

Como se puede observar se han seleccionado aceros con propiedades muy diferentes entre ellas, lo cual permitirá el estudio de un gran rango de aceros y su comportamiento frente al hidrógeno.

2.2 Procedimiento experimental

Para los ensayos SPT se han utilizado probetas de 10x10x0.5 mm. El dispositivo utilizado, que responde a los requisitos de la norma UNE-EN 10371:2022 [7], dispone de una matriz inferior con un orificio de 4 mm de diámetro y la carga se aplica mediante un punzón semiesférico de 2.5 mm de diámetro. Para introducir el hidrógeno gas (99.9999 %H₂) a presión, este dispositivo ha sido modificado siguiendo la configuración empleada por Shin et al. [2] y que se esquematiza en la Figura 1. En esta configuración, la probeta se coloca en la matriz inferior y se empotra con la matriz superior como en el ensayo convencional. En este caso, y aprovechando el orificio inferior, se introduce el gas a presión, el cual se encontrará en contacto únicamente con la cara de la probeta sometida a tracción al aplicar la carga con el punzón. Con el fin de evitar fugas, el dispositivo dispone de una junta tipo “O-ring” entre la probeta y la matriz. Asimismo, para asegurar la presión en el interior del dispositivo se dispone de un manómetro y una válvula de descarga regulada a la presión objeto de estudio (100 bares), siendo el límite la presión de la botella de hidrógeno (200 bares).

Con el fin de garantizar la pureza del hidrógeno gas que se utiliza durante el ensayo, se realizan 5 purgas utilizando nitrógeno gas y 3 cargas de hidrógeno. Además, y al objeto de analizar el efecto de utilizar un cierto tiempo de precarga de hidrógeno en el comportamiento del material, algunas probetas se

Tabla 1. Microestructura y propiedades de los aceros seleccionados

Material	Microestructura	Coeficiente de difusión	Propiedades mecánicas		
			σ_{ys} (MPa)	σ_{ut} (MPa)	A (%)
904L	Austenita	-	281	613	46
S355	Ferrita + perlita	1.30E-09	386	472	32
CrMo700	Martensita revenida	2.90E-10	622	710	22
CrMoV-WM	Martensita+bainitas revenidas	1.25E-11	1019	1120	9

expusieron a dicho ambiente durante un tiempo antes de comenzar el ensayo mecánico propiamente dicho.

Al igual que en los ensayos convencionales, el dispositivo se coloca en una máquina universal de ensayos MTS equipada con una célula de carga con una capacidad de 5 kN y la medida del desplazamiento del punzón se realiza empleando un extensómetro tipo COD.

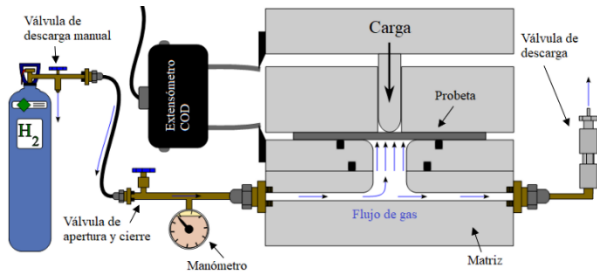


Figura 1. Configuración de los ensayos SPT en ambiente de hidrógeno gas a presión

Durante la realización de este ensayo, se recogen las curvas SPT (Figura 2), que relacionan la carga aplicada frente al desplazamiento del punzón. Esta curva, cuando el comportamiento del material es lo suficientemente dúctil (aceros estructurales) consta de varias zonas características, indicadas en la Figura 2 a través de la curva a trazo negro. La zona I corresponde a la flexión elástica del material. La zona II describe la extensión progresiva de la flexión plástica a toda la muestra. A partir de cierto punto, la flexión plástica da paso a un comportamiento de membrana que predomina en la mayor parte de la curva, fase que corresponde a la zona III. Al acercarse a la carga máxima, la pendiente de la curva comienza a disminuir a medida que se desarrollan los micromecanismos de fallo (estrechamiento y agrietamiento interno), dando lugar a la zona IV, donde primero se produce el estrechamiento y luego una grieta visible, lo que lleva a una disminución de la carga hasta el fallo total de la muestra.

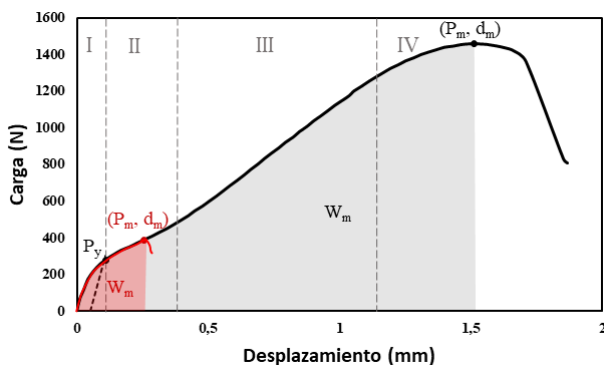


Figura 2. Curvas SPT características: a) negra: comportamiento dúctil, b) roja: comportamiento frágil

De las curvas SPT se extraen una serie de valores de carga (P_y , P_m) y de desplazamiento (d_m) que, tras aplicar las correlaciones correspondientes, nos proporcionan los valores del límite elástico, σ_{ys} (Ecuación 1), la resistencia

a la tracción, σ_{ut} (Ecuación 2), el alargamiento, A , (Ecuación 3) e, incluso la tenacidad a la fractura del material, J_{IC} , relacionada con el área encerrada bajo la curva, W_m , (Ecuación 4). En estas expresiones, t es el espesor inicial de las probetas y α, β, γ y κ son constantes que dependen de la geometría de la probeta y dispositivo de ensayo utilizados [7,8].

$$\sigma_{ys} = \alpha \cdot \frac{P_y}{t^2} \quad (1) \quad \sigma_{ut} = \beta \cdot \frac{P_m}{t \cdot d_m} \quad (2)$$

$$A(\%) = \gamma \cdot \frac{d_m}{t} \quad (3) \quad J_{IC} = \kappa \cdot \frac{W_m}{t^2} \quad (4)$$

Estas propiedades pueden verse mermadas por la presencia de hidrógeno. Cuando el comportamiento del material es mucho más frágil, la curva SPT se acorta, pudiendo producirse la rotura a valores de carga y desplazamiento mucho menores, e incluso, si la fragilización es muy elevada, la rotura puede sobrevenir de forma prematura en la zona II, tal y como se describe en la Figura 2 a través de la curva a trazo rojo.

Señalar que, normalmente, los valores de P_m , d_m y W_m se toman en la carga máxima, pero en el caso de roturas frágiles, estos valores se toman en el punto donde la curva fragilizada se separa de la representativa del comportamiento dúctil, que sería el momento en el que se produce la rotura. El valor de P_y , se ha obtenido como la intersección entre la curva SPT y la recta que define la zona elástica inicial desplazada un valor igual a un décimo del espesor de la probeta, $t/10$ ($P_{y_{t/10}}$).

Independientemente del parámetro analizado, el efecto fragilizador del hidrógeno se cuantificará mediante el denominado Índice de Fragilización por Hidrógeno (IFH), que se obtiene aplicando la Ecuación 5 y que compara el valor de un cierto parámetro con y sin presencia de hidrógeno durante el ensayo. Debido a la presión ejercida por el gas durante el ensayo y su posible influencia en la curva (al actuar en sentido contrario a la ejercida por el punzón), en lugar de comparar las curvas en hidrógeno con las obtenidas al aire, se las compara con las obtenidas utilizando un gas inerte, en este caso nitrógeno, actuando a la misma presión. Por tanto, X_{N_2} , es la propiedad que queramos comparar obtenida en el ensayo realizado en presencia de nitrógeno y X_H en presencia de hidrógeno. El valor de IFH variará entre 0 (ausencia de fragilización) y 100 (fragilización total).

$$IFH (\%) = \frac{X_{N_2} - X_H}{X_{N_2}} \times 100 \quad (5)$$

Los ensayos en presencia de nitrógeno se realizaron utilizando una velocidad de desplazamiento del punzón de 0.2 mm/min, mientras que para los realizados en hidrógeno se utilizó una velocidad de ensayo 10 veces más lenta ($v=0.02$ mm/min). Esta decisión se tomó en base a estudios anteriores [1], al objeto de dar más tiempo al hidrógeno para su difusión.

Otro de los parámetros SPT que puede proporcionar una gran información sobre el fenómeno de fragilización es

la deformación equivalente, ε_{qf} (Ecuación 6), por lo que una vez concluidos los ensayos, se procedió a la medida del espesor final de las probetas en la zona de rotura, t_f .

$$\varepsilon_{qf} = \ln\left(\frac{t}{t_f}\right) \quad (6)$$

Finalmente, todas las superficies de fractura fueron sometidas a un completo análisis fractográfico para lo que se utiliza un microscopio electrónico de barrido (SEM JEOL-JSM5600).

3. RESULTADOS

En la Figura 3 se muestran, a efectos comparativos, las curvas SPT representativas de los distintos tipos de acero ensayados tanto en presencia de un gas inerte (curva azul) como en presencia de hidrógeno a presión (curva naranja).

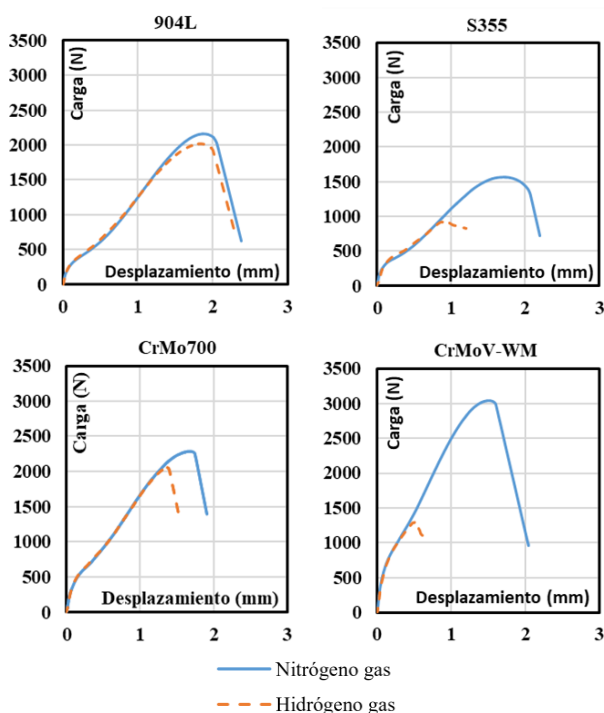


Figura 3. Curvas SPT a) 904L; b) S355; c) CrMo700; d) CrMoV-WM

Como ya es conocido por la comunidad científica a partir de ensayos convencionales, los aceros inoxidable austeníticos son los menos afectados por el fenómeno, sobre todo cuando se utilizan superausteníticos (904L). En los otros aceros estudiados se pueden apreciar reducciones de cargas y desplazamientos máximos, destacando especialmente la pérdida de propiedades en el Weld metal de CrMoV.

A partir de las curvas se obtuvieron los distintos parámetros SPT relacionados con las propiedades mecánicas a tracción y a fractura por medio de las ecuaciones (1) a (4). La Tabla 2 recoge los valores medios de dichos parámetros obtenidos en presencia del

gas inerte (N_2), así como los índices de fragilización presentados por cada parámetro cuando el ensayo se realiza en presencia de hidrógeno. Como puede observarse, y tal y como sucede en los ensayos de tracción, los valores del límite elástico (relacionado con P_y/t^2) y de la resistencia a la tracción (relacionada con $P_m/t \cdot d_m$) no se ven afectados por la presencia de hidrógeno, lo que no ocurre con los relacionados con el alargamiento (d_m/t) y la tenacidad a la fractura (W_m/t^2) con caídas que, si bien son limitadas en el caso del acero superaustenítico 904L y del CrMo700, llegan a ser muy elevadas en los otros dos aceros, llegándose a índices de fragilización que superan el 60% en ambos aceros cuando el parámetro analizado es la energía de fractura.

Tabla 2. Parámetros SPT e Índices de Fragilización por Hidrógeno para las distintas familias de acero

Material		904L	S355	CrMo700	CrMoV-WM
$\frac{P_y}{t^2}$	N_2	1112	1214	1707	2695
	IF%	0	0	0	0
$\frac{P_m}{t \cdot d_m}$	N_2	2112	1650	2351	3640
	IF%	0	0	0	0
d_m/t	N_2	4.10	3.79	3.90	3.37
	IF%	2	44	20	62
$\frac{W_m}{t^2}$	N_2	8945	6448	9239	11623
	IF%	5	76	30	82

Lo mismo ocurre cuando el parámetro utilizado es la deformación biaxial equivalente. La Tabla 3 muestra los valores de dicho parámetro calculados para cada material en presencia de nitrógeno e hidrógeno, así como los Índices de Fragilización obtenidos. Se aprecian resultados muy similares a los obtenidos empleando la energía de fractura normalizada (W_m/t^2).

Tabla 3. Deformación equivalente (ε_{qf}) y su Índice de Fragilización por Hidrógeno para cada material

Material	$\varepsilon_{qf} (N_2)$	$\varepsilon_{qf} (H_2)$	IFH (%)
904L	1.086	0.962	11
S355	1.395	0.274	80
CrMo700	0.766	0.519	32
CrMoV-WM	0.752	0.140	81

Por su parte, la Figura 4 muestra tanto el aspecto general como los micromecanismos de fractura exhibidos por los distintos materiales ensayados tanto en presencia de nitrógeno (N_2) como de hidrógeno (H_2) gas a presión.

Como puede observarse, bajo la acción de un gas inerte (figura 4, izquierda) todos los materiales muestran las típicas roturas dúctiles en forma de “sonrisa”, caracterizadas por la aparición de una grieta circunferencial en la zona de máxima deformación plástica, si bien la menor ductilidad CrMoV-WM, se refleja en la aparición de grietas secundarias que crecen en sentido radial. No obstante, incluso en este caso, el micromecanismo de fractura característico es el representativo de un comportamiento dúctil: iniciación, crecimiento y coalescencia de microhuecos (CMV).

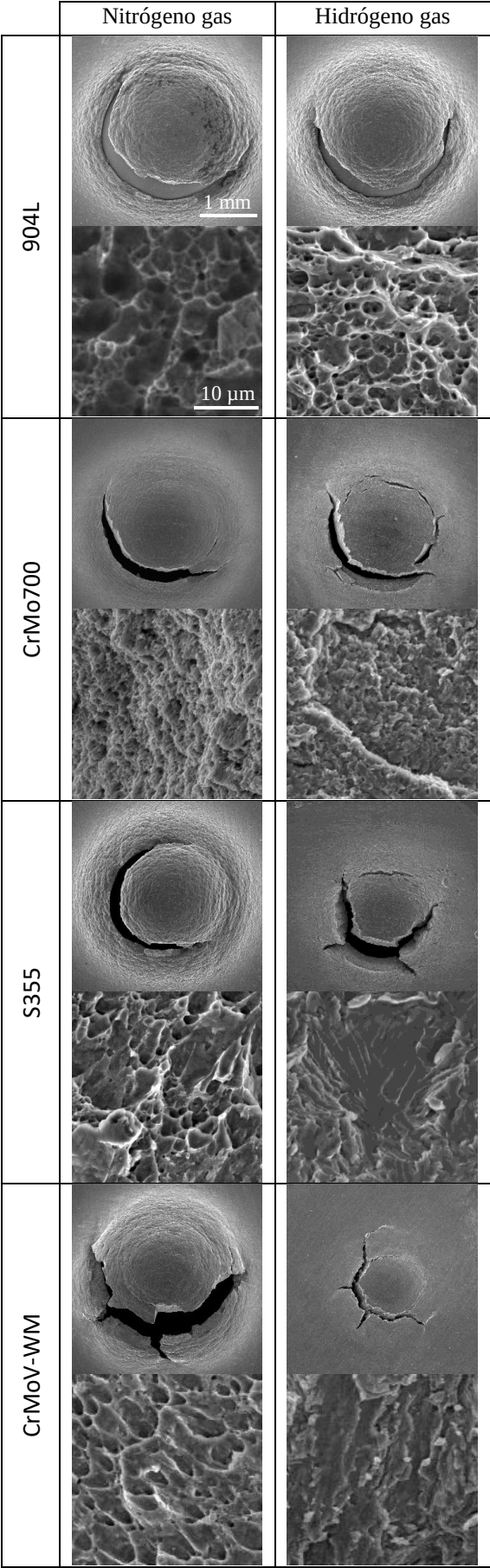


Figura 4. Superficies y micromecanismos de fractura

Cuando los materiales son ensayados en hidrógeno (Figura 4, derecha), el aspecto de las roturas, así como el tipo de micromecanismo de fractura cambia, excepto en el caso del acero superaustenítico 904L. El resto de los aceros, muestran unas superficies de rotura más fragilizadas, con la presencia de grietas radiales y una mucho menor deformación plástica en el momento de la rotura. Además, los aceros S355 y el CrMoV-WM muestran micromecanismos de fractura totalmente frágiles (clivaje) en todo el espesor de la probeta ensayada. En el caso del acero CrMo700, este micromecanismo de fractura frágil también está presente, pero sólo afecta a la mitad del espesor de la probeta más próximo a la superficie en contacto con el hidrógeno, como puede apreciarse en la Figura 5.

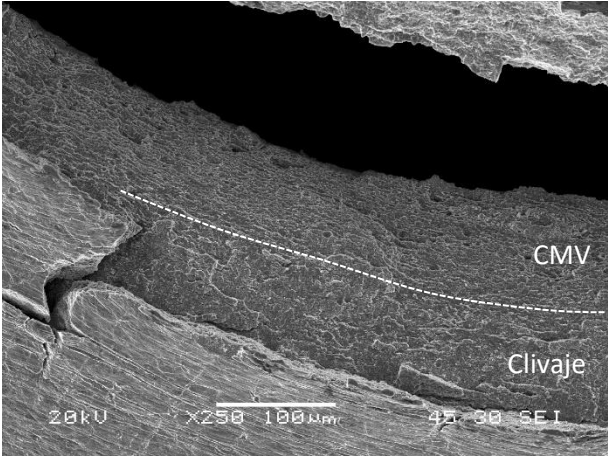


Figura 5. Superficie de fractura del CrMo700 en H₂

Por su parte, el efecto del uso de una precarga de hidrógeno de 30 minutos se analizó en todos los materiales, excepto en el 904L. Señalar que, al menos con ese tiempo de precarga, ninguno de los aceros exhibió una mayor fragilización.

4. DISCUSIÓN

Como ha quedado de manifiesto a través de los resultados obtenidos, el ensayo SPT es capaz de captar el fenómeno de fragilización por hidrógeno en la misma medida que lo haría un ensayo de tracción. De hecho, al igual que en los ensayos de tracción realizados en ambiente de hidrógeno [4], los parámetros relacionados con el límite elástico y la resistencia a la tracción apenas se ven afectados por el fenómeno de fragilización, por lo que es interesante centrarse en los parámetros que, estando más relacionados con la deformación (d_m/t , ϵ_{qf}) o con la energía de fractura (W_m/t^2), reflejan el fenómeno en toda su magnitud.

La variación de estos mismos parámetros ya ha sido evaluada con éxito en ensayos SPT utilizando un ambiente electroquímico de hidrógeno [1], por lo que en la Figura 6 se muestran, comparados, los IFH correspondientes a la energía de fractura (W_m/t^2) obtenidos utilizando hidrógeno a presión y ambientes electroquímicos salinos (3.5% NaOH) y ácidos (1M

$\text{H}_2\text{SO}_4 + 0.25\text{g/l As}_2\text{O}_3$) con una densidad de corriente de 0.5mA/cm^2 . Como puede apreciarse, los resultados obtenidos en los diferentes ambientes son comparables para todos los aceros, excepto para el CrMo700, que en presencia de hidrógeno a una presión de 100 bares muestra una fragilización apreciablemente menor que en los ambientes electroquímicos analizados.

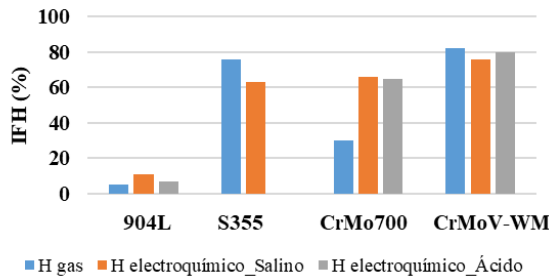


Figura 6. IFH para W_m/t^2 obtenidos en presencia de hidrógeno gas e hidrógeno electroquímico

La explicación a estos resultados podría encontrarse en los coeficientes de difusión de los distintos materiales. Así, en el caso del 904L, con un coeficiente de difusión extremadamente lento, el hidrógeno no habría tenido tiempo a difundir (y, por tanto, a fragilizar) apenas en el curso de los ensayos, independientemente del tipo de ambiente utilizado. Justo el comportamiento contrario tendría el CrMoV-WM, cuyo coeficiente de difusión es el más elevado, por lo que el hidrógeno introducido por cualquiera de los medios produce la máxima fragilización. El acero S355 muestra un coeficiente de difusión intermedio, por lo que posiblemente en el ambiente salino utilizado no llegase a recoger el mismo nivel de fragilización que el hidrógeno a presión. En el CrMo700, sin embargo, las condiciones de hidrógeno a presión utilizadas no llegarían a introducir la misma cantidad de hidrógeno que los ambientes electroquímicos, cuyas densidades fueron elegidas, precisamente, para simular las condiciones de una presión de hidrógeno mucho mayor (180 bares).

5. CONCLUSIONES

Tras caracterizar 4 aceros mediante ensayos SPT en ambiente de hidrógeno gas a una presión de 100 bares, se ha llegado a las siguientes conclusiones:

- El ensayo SPT permite identificar y cuantificar el fenómeno de fragilización por hidrógeno de modo similar al que lo hace un ensayo de tracción o fractura, reduciendo tiempo y costes, además de permitir el análisis en aquellos casos en el que la cantidad de material disponible sea muy pequeña.
- Como en los ensayos de tracción, los parámetros SPT relacionados con el límite elástico y la resistencia a la tracción apenas se ven afectados por la fragilización, por lo que los parámetros más adecuados para el análisis son los relacionados con el alargamiento y con la energía de fractura.
- No es necesario utilizar un periodo de precarga antes de realizar los ensayos SPT.

- La velocidad de ensayo utilizada parece ser lo suficientemente lenta para observar el fenómeno de fragilización en los aceros de mayor coeficiente de difusión
- Es necesario estudiar la influencia de velocidades más lentas o periodos de precarga más elevados en el caso del acero superaustenítico.
- Los resultados obtenidos son comparables con los correspondientes a ambientes acuosos en algunos casos, en otros habría que ajustar los parámetros electroquímicos.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer la financiación recibida del Ministerio de Economía, Industria y Competitividad a través del proyecto MCINN-22-TED2021-130306B-I00 (2022-2025) y a los Servicios Científico-Técnicos de la Universidad de Oviedo por el uso del MEB.

REFERENCIAS

- [1] Álvarez, G., Arniella, V., Belzunce, F. J., & Rodríguez, C. (2023). Study of the influence of current density and displacement rate on hydrogen embrittlement using small punch tests. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 125(103838), 103838.
- [2] Shin, H-S et al. (2019). Establishment of an in-situ small punch test method for characterizing hydrogen embrittlement behaviors under hydrogen gas environments and new influencing factor. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(41), 23472–23483.
- [3] Wang, D. et al. (2022). Investigation of hydrogen embrittlement behavior in X65 pipeline steel under different hydrogen charging conditions. *Materials Science & Engineering. A, Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing*, 860(144262), 144262.
- [4] Álvarez, et al. (2019). Hydrogen embrittlement of structural steels: Effect of the displacement rate on the fracture toughness of high-pressure hydrogen pre-charged samples. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(29), 15634–15643.
- [5] Zafra, A., et al. (2021). Fracture toughness of coarse-grain heat affected zone of quenched and tempered CrMo steels with internal hydrogen: Fracture micromechanisms. *Engineering Fracture Mechanics*, 241(107433), 107433.
- [6] Álvarez, G., et al. (2020). SPT analysis of hydrogen embrittlement in CrMoV welds. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 110(102813), 102813.
- [7] Asociación Española de Normalización. (2022). UNE-EN 10371:2022 Materiales metálicos. Método de ensayo miniatura de punzonado.
- [8] García T.E. et al (2014). Estimation of the mechanical properties of metallic materials by means of the small punch test. *Journal of Alloys and Compounds*, 582, 708–717.

MODELO PARA LA ESTIMACIÓN DE LA TENSIÓN UMBRAL EN AMBIENTE AGRESIVO MEDIANTE ENSAYOS SMALL PUNCH EN BASE A LA TÉCNICA DE CARGA POR ESCALONES

A. Fernández¹, B. Arroyo^{1,2*}, L. Andrea¹, J.A. Álvarez¹, F.Gutiérrez-Solana¹

¹ Departamento de Ciencia e Ing. del Terreno y de los Materiales, Universidad de Cantabria (LADICIM),

² Departamento de Ing. Geográfica y Técnicas de Expresión Gráfica, Universidad de Cantabria,
E.T.S. de Ing. de Caminos, Canales y Puertos, Av./Los Castros 44, 39005 Santander, España

* Persona de contacto: arroyob@unican.es

RESUMEN

Este trabajo sintetiza una metodología para la estimación de la tensión umbral en ambiente agresivo mediante ensayos Small Punch (SPT). Se emplean cuatro aceros de uso industrial: dos de media resistencia y dos de alta resistencia. Estos son fragilizados por hidrógeno generado bajo condiciones de polarización catódica en ambiente ácido, estudiándose 3 niveles de agresividad mediante distinta intensidad eléctrica en un electrolito ácido con base de disolución 1N de H₂SO₄ en H₂O. Para cada escenario material-ambiente, se evalúa la relación de la tensión umbral, obtenida mediante la norma ASTM F1624 basada en cargas por escalones incrementales, con la carga umbral SPT obtenida mediante la propuesta de técnica escalonada aplicada al ensayo SPT. Todo ello para validar un modelo para la estimación de la tensión umbral a partir de carga umbral SPT, basado en la aportación a la misma de una componente elástica y otra plástica. Con ello se puede determinar un coeficiente de ajuste de la parte plástica, dependiente de la dureza del material, desprendiéndose su cuasi-independencia con el ambiente; la parte elástica resulta únicamente dependiente del límite elástico. La aplicación de este modelo otorga estimaciones de la tensión umbral con errores contenidos en el 10% respecto al valor normativo.

PALABRAS CLAVE: Tensión umbral, Small Punch, Ambiente agresivo, Fragilización por hidrógeno.

ABSTRACT

This work summarizes a methodology for estimating threshold stress in an aggressive environment using Small Punch Testing (SPT). Four industrial steels are used: two medium-strength and two high-strength. These steels are embrittled by hydrogen generated under cathodic polarization conditions in an acidic environment, studying three levels of aggressiveness using different electrical intensities in an acid electrolyte based on a 1N H₂SO₄ solution in H₂O. For each material-environment scenario, the relationship between the threshold stress, obtained using the ASTM F1624 standard based on incremental step loading, and the SPT threshold load obtained through the proposed stepwise technique applied to the SPT test is evaluated. All this is done to validate a model for estimating threshold stress from the SPT threshold load, based on the contribution of an elastic and a plastic component. This allows determining an adjustment coefficient for the plastic part, dependent on the material's hardness, thus revealing its quasi-independence from the environment. The elastic component is solely dependent on the yield strength. Application of this model provides threshold stress estimates with errors within 10% of the standard value.

KEYWORDS: Threshold stress, Small Punch, Aggressive environment, Hydrogen embrittlement.

1. INTRODUCCIÓN

Las propiedades mecánicas de los aceros de alta resistencia y baja aleación los han convertido en materiales muy atractivos e interesantes para industrias exigentes, como son la aeroespacial, automoción u oil&gas, aumentando continuamente su gama de aplicaciones. Su principal desventaja, de gran importancia en muchas de estas aplicaciones, sin embargo, es su susceptibilidad a fenómenos de afección por el ambiente, tales como la corrosión bajo tensión y la fragilización por hidrógeno principalmente, las cuales son relativamente frecuentes en estas aplicaciones industriales. Algunos ejemplos bien conocidos son el transporte de gas, donde el H₂S está presente, o las aplicaciones en alta mar con sistemas de protección, donde se produce una polarización catódica, promoviendo la afección por hidrógeno del acero. Un

problema derivado de ello es que los ensayos normalizados utilizados para caracterizar materiales en entornos agresivos [1,2] requieren un cierto número de muestras y una velocidad de deformación lenta, con el fin de obtener la tensión umbral, lo que supone una cierta cantidad de material y largos periodos de tiempo, además de la variabilidad intrínseca de estos métodos, por lo que suelen necesitarse de 10 a 12 probetas, lo que puede suponer más de 10.000 h por ensayo [1,2].

Para paliar este problema de tiempo, surgió la metodología alternativa presentada en la norma ASTM F1624 [3]. Consiste en la aplicación de determinadas secuencias de cargas constantes que se incrementan escalonadamente hasta que se produce el fallo de la probeta, provocado por la acción combinada del ambiente agresivo y la sollicitación lenta causada por los incrementos de carga. Con este método, la tensión

umbral, σ_{th} , puede determinarse en pocos días, ensayando un mínimo de tres probetas uniaxiales.

Con respecto a la escasez de material, hay situaciones en las que no es posible obtener probetas de acuerdo con las normas convencionales, como componentes en servicio, uniones soldadas, áreas locales, geometrías complejas, pequeños espesores, etc. Para estas situaciones, el ensayo Small Punch test (SPT) se ha posicionado como una alternativa [4] en la última década, y está actualmente normalizado por EN 10371 [5] y ASTM E3205 [6], pero ninguna de ellas considera la caracterización en ambientes agresivos.

Diversos autores han demostrado que la técnica de ensayo Small Punch puede emplearse en escenarios ambientales adversos recientemente. En trabajos recientes [7], se ha presentado una propuesta preliminar para estimar la carga umbral en ambientes agresivos, basada en una adaptación de la metodología ASTM F1624 a los ensayos Small Punch. Sin embargo, esta propuesta fue optimizada en [8] acotando los tiempos de escalones necesarios, pero aún necesita extenderse a rangos de dureza superiores.

El presente trabajo amplía y valida la metodología incremental de pasos SPT propuesta a todos los rangos de dureza de aceros superiores a 33 HRC (hasta 60 HRC). Profundiza en el modelo que estima la tensión umbral a partir de la carga umbral SPT, presentado en [7], incorporando la optimización de los tiempos de paso de [8]. El último avance conseguido en este trabajo es la calibración de este modelo, demostrando que permite obtener la tensión umbral basado (únicamente) en ensayos SPT, con una dispersión experimental limitada (inferior al 10%), y basado en una parte elástica que depende de la carga SPT de transición de elástico a plástico y una parte plástica regida por un coeficiente dependiente de la dureza del material, que se calibra.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

2.1 Materiales

En esta investigación se han utilizado cuatro aceros. Por un lado, un acero laminado X80 [9], comúnmente utilizado en el transporte de gas y petróleo a baja temperatura, con una dureza de 35 HRC, y un acero S420 soldable tratado termomecánicamente [10] de 33 HRC, utilizado en recipientes a presión, centrales eléctricas y estructuras offshore. Por otro lado, dos aceros de herramienta comerciales Uddeholm Arne de 50 HRC y 60 HRC, endurecidos mediante temple y revenido. Los dos primeros aceros tienen una microestructura ferrítica-perlítica, con tamaños de grano 5-15 μm para el X80 y 5-25 μm para el S420, mientras que los dos últimos aceros tienen una microestructura martensítica, con tamaños de grano que oscilan entre 5 y 10 μm en ambos casos. En la Tabla 1 se presentan las composiciones químicas de los cuatro aceros, obtenidas mediante espectrometría de emisión de chispa, y sus propiedades mecánicas están recogidas en la Tabla 2, que se obtuvieron a partir de probetas de tracción cilíndricas de $\phi 10$ mm.

Tabla 1. Composición química de los cuatro aceros analizados (% en peso)

	X80	S420	50 HRC	60 HRC
C	0,070	0,080	0,947	0,951
Si	0,180	0,280	0,310	0,300
S	<0,005	0,001	<0,035	<0,035
P	<0,005	0,012	<0,005	<0,005
Mn	1,830	1,440	1,093	1,013
Ni	0,030	0,030	-	-
Cr	-	0,030	0,614	0,599
Mo	0,150	0,003	-	-
Cu	0,020	0,015	-	-
Al	0,030	0,026	-	-
V	-	0,005	0,113	0,109
Ti	-	0,015	-	-
Nb	0,030	0,031	-	-
W	-	-	0,598	0,611

Tabla 2. Características mecánicas de los cuatro aceros analizados

	E (GPa)	σ_y (MPa)	σ_u (MPa)	e_u (%)
X80	209,9	621,3	692,9	29,6
S420	206,4	447,7	547,1	21,7
50 HRC	216,6	1810,7	1935,9	3,1
60 HRC	190,8	929,8	1995,5	1,9

2.2 Ambientes agresivos empleados

Con el fin de obtener una caracterización adecuada del material en condiciones de Fisuración inducida por Hidrógeno (FIH) [11], en este estudio se utiliza un entorno de hidrógeno simulado, conseguido mediante una polarización catódica de las probetas en un electrolito ácido [12]. Para conseguir diferentes niveles de absorción de hidrógeno, y por tanto simular diferentes niveles de agresividad del ambiente, la intensidad de la corriente eléctrica aplicada durante la polarización catódica [13] se fijó en 1, 5 y 10 mA/cm². El electrolito utilizado fue una solución de H₂SO₄ 1 N en agua destilada, conteniendo 10 mg de As₂O₃, preparada según el método de Pressouyre [14] y con 10 gotas de CS₂ por litro, estando el pH final entre 0,65 y 0,80. La probeta funciona como electrodo, el platino como contraelectrodo y un electrodo de calomelano saturado como electrodo de referencia. Los ensayos se realizan a temperatura ambiente (20 $\pm$ 2 °C), con agitación continua del agua para eliminar las burbujas de hidrógeno de la superficie de la muestra y, así, evitar depósitos locales de corrosión [1]; esto se consiguió soplando aire a través de un tubo colocado en el fondo de la célula electrolítica a 6 bares de presión para que el líquido se moviera.

2.3 Estimación tensión umbral según ASTM F1624 [3]

El objetivo de estos ensayos es determinar la carga umbral (P_{th}) y la correspondiente tensión umbral (σ_{th}), siguiendo la norma ASTM F1624 [3]. Para ello, se mecanizaron probetas cilíndricas de tracción [15] con un diámetro de 6 mm en el fuste, mientras que la zona a ensayar se sumergía completamente en la solución. Debe prestarse especial atención a la ubicación de la probeta en la célula electrolítica, asegurando el aislamiento eléctrico de la probeta y manteniendo la estanqueidad de la célula. Antes de iniciar la carga escalonada, las probetas se expusieron previamente al mismo ambiente de fragilización durante 24 h para asegurar una correcta distribución del hidrógeno [14]. En función de la dureza del acero, el protocolo de carga escalonada a aplicar se define en la Tabla 3, mientras que el montaje experimental se muestra en la Figura 1.



Figura 1. Vista general justo después del fallo de la probeta (arriba) y esquema (abajo) del montaje experimental para los perfiles de carga escalonada ASTM F1624.

La norma ASTM F1624 [3] indica el siguiente procedimiento a seguir para determinar el umbral, como se muestra en la Figura 2: en una primera instancia, se realiza un ensayo de tracción según ASTM E8 [15] para obtener la PFFL (Carga de Fractura Rápida). A continuación, se define el protocolo con 20 escalones de PFFL/20 como valor de carga a incrementar en cada uno; la Tabla 3 presenta la duración de los escalones en función de la dureza del acero según ASTM F1624). Se aplican subsecuentemente el número requerido de escalones hasta que se alcanza la rotura de la probeta a un valor de carga P_{th-1} . Las siguientes secuencias de escalones son diseñadas también con 20 escalones de incremento 1/20 de la carga de rotura en la secuencia anterior incrementada en un 10%; de su aplicación se obtienen los valores de carga umbral para los subsiguientes escalones P_{th-2} , P_{th-3} , P_{th-n} , respectivamente. Esto se repite, con un mínimo de 3 secuencias, hasta determinar la carga umbral final como aquella en que la diferencia con la de la secuencia de escalones anterior sea inferior al 5%, es decir de la carga correspondiente a un escalón.

Tabla 3. Secuencias de carga escalonada según ASTM F1624 [3]

Dureza (HRC)	Escalón	Carga de escalón	Tiempo de escalón (h)	Código [3]
33 < 45	1–10 11–20	5% de PFFL	2 4	(10/5/2,4)
45 < 55	1–10 11–20	5% de PFFL	1 2	(10/5/1,2)
≥ 55	1–20	5% de PFFL	1	(10/5/1)

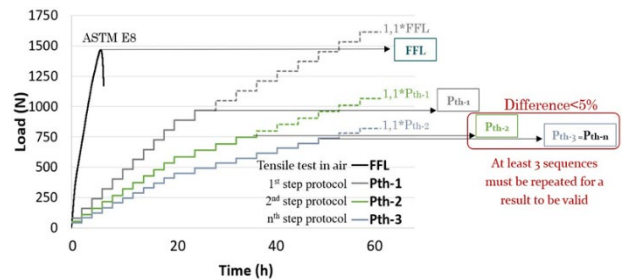


Figura 2. Esquema de la metodología ASTM-F1624 para un acero de $33 \leq HRC < 45$.

2.4 Principales conceptos del ensayo Small Punch

El SPT es un ensayo casi no destructivo, fue desarrollado por primera vez en la década de 1980, y en la actualidad se ha convertido en una alternativa mundial para la estimación de propiedades mecánicas cuando no es posible obtener probetas que se ajusten a las normas habituales; se han publicado normas tanto europeas [5] como americanas [6], que cubren la estimación de propiedades de tracción, fluencia y fractura.

El SPT consiste en punzonar una probeta plana (de 0,5 mm de espesor nominal y menos de 1 cm² de sección transversal), deformándola hasta su rotura. La figura 3 muestra el dispositivo utilizado para la realización de los ensayos en este trabajo, según la norma europea [5].

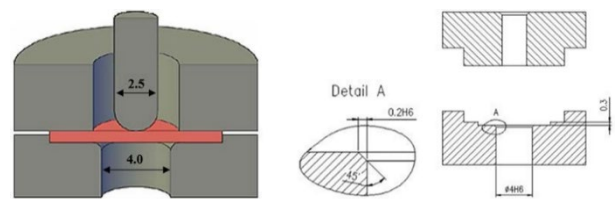


Figura 3. Útil del ensayo Small Punch empleado en este trabajo (izquierda), y medidas recomendadas por la norma europea [5], en mm (derecha).

Durante el ensayo, la fuerza y el desplazamiento del punzón se registran continuamente, obteniéndose una curva como la que se presenta en la Figura 4; la fractura tiene forma semicircular (tipo sonrisa) en los escenarios dúctiles, o multirradial hacia el centro (tipo estrella) en los frágiles [5]. La curva puede dividirse en cuatro regiones principales: I (placa elástica a flexión), II (placa a flexión con plastificación), III (comportamiento como membrana) y IV (inestabilidad y fallo). Pueden señalarse dos parámetros principales:

- P_y : carga de tránsito elástoplástico, marca el comienzo de los efectos plásticos en la probeta; se identifica con el primer cambio de convexidad en la curva.
- $P_{m\acute{a}x}$: carga máxima alcanzada durante el ensayo, tras la cual la muestra colapsa. La energía por debajo de la curva de ensayo, E_{SP} , se define hasta esta carga.

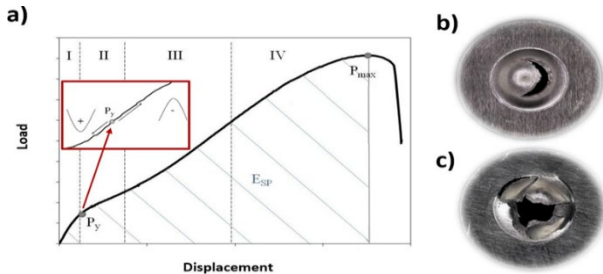


Figura 4. (a) Esquema de la curva carga-desplazamiento SPT; (b) probeta rota, escenario dúctil; (c) probeta rota, escenario frágil.

2.5 Aplicación de la metodología de la norma ASTM F1624 a SPT

El objetivo de la investigación llevada a cabo en este trabajo, es aplicar la técnica de carga incremental escalonada a SPT de la forma más estricta posible, asumiendo las adaptaciones necesarias.

Las probetas SPT son placas cuadradas de $10 \times 10 \text{ mm}^2$ con un espesor de $0,5 \pm 0,01 \text{ mm}$, según [5] y como se validó en [17]. Por lo tanto, hubo que realizar algunas modificaciones en función de las particularidades del Small Punch:

- PFFL-SPT se obtiene en este caso a partir de un ensayo SPT al aire según [5]; este ensayo también se utiliza para derivar la carga elástico-plástica, P_y , como primer punto de inflexión de la curva carga-desplazamiento obtenida, tal y como se describe en [7];
- Dado que el tiempo de difusión es proporcional al cuadrado del espesor [18], las probetas SPT deben estar previamente sumergidas en el ambiente durante menos tiempo que el que tardan las probetas convencionales. Según bibliografía [7,8], el tiempo más adecuado es 2h.
- Por una razón similar, según [8], los tiempos de escalón óptimos, que combinan una afección ambiental completa con el menor tiempo posible, se demostraron fenomenológicamente iguales a una sexta parte de las duraciones indicadas en la norma ASTM F1624 [8] para cada rango de dureza como presenta la Tabla 4.

Tabla 4. Escalones de carga empleados en la propuesta SPT

Dureza	Escalón	Carga de escalón	Tiempo de escalón (min)
$33 \leq \text{HRC} < 45$	1-10 11-20	5% of PFFL-SPT	20 40
$45 \leq \text{HRC} < 55$	1-10 11-20	5% of PFFL-SPT	10 20
≥ 55	1-20	5% of PFFL-SPT	10

El dispositivo empleado para los ensayos es una célula electrolítica en la que la probeta SPT se empotra en dos matrices y se punzona por la acción de la carga aplicada sobre ella, mientras está completamente sumergida en la solución durante todo el ensayo (véase la figura 5).

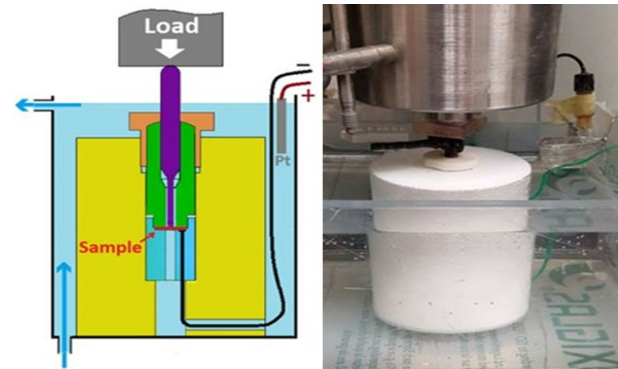


Figura 5. Esquema (izquierda) y montaje (derecha) del dispositivo para ensayos SPT.

2.6 Estimación del umbral de tensión (σ_{th}) basado en el umbral de carga SPT (P_{th-SPT})

Basándose en la proporcionalidad en la reducción de la tensión umbral (probetas uniaxiales) y la reducción de la carga umbral SPT, junto con los hallazgos mostrados en la literatura, los autores presentaron en [7] un modelo para estimar σ_{th} basado en P_{th-SPT} . La tensión umbral, σ_{th} , derivada del SPT se calcula como la suma de dos términos: uno elástico (σ_{el-SPT}), no afectado por el ambiente, y otro plástico (σ_{pl-SPT}), asistido por fenómenos del ambiente, que tiende a proporcionar la mayor contribución al valor final.

$$\sigma_{th-SPT} = \sigma_{el-SPT} + \sigma_{pl-SPT} \quad (1)$$

La componente elástica puede obtenerse a partir de la carga de transición de elástico a plástico, P_y , que define el inicio de los fenómenos plásticos; se deriva del ensayo SPT en aire, que según [5] se emplea para determinar el PFFL (como se menciona en el apartado 2.3). A continuación, la parte elástica se calcula, basándose en [19], como la tensión máxima en la cara más sometida a tensión de una placa circular de espesor " h_0 " encastrada en todo el perímetro y sometida a una carga vertical centrada " P_y ", como se muestra en la Ecuación (2):

$$\sigma_{el-SPT} = \frac{3}{2 \cdot \pi \cdot h_0^2} \cdot P_y \quad (2)$$

La componente plástica sigue el enfoque habitual en las correlaciones SPT para determinar parámetros de tracción como el límite elástico o la resistencia a la tracción [5,19], consistente en normalizar la carga por " h_0^2 " y emplear un coeficiente de correlación. Sin embargo, en este caso, como se ha demostrado en trabajos anteriores [7], sólo la parte plástica de la carga umbral SPT ($P_{th-SPT} - P_y$) contribuye a su cálculo (puesto que P_y ya se ha incluido en la elástica), resultando la siguiente expresión:

$$\sigma_{pl-SPT} = \frac{\alpha}{h_0^2} \cdot (P_{th-SPT} - P_y) \quad (3)$$

donde “ α ” es un coeficiente de correlación adimensional, las cargas se introducen en newtons y “ h_0 ” en milímetros. Esto conduce a:

$$\sigma_{th-SPT} = \sigma_{el-SPT} + \sigma_{pl-SPT} = \frac{3}{2 \cdot \pi \cdot h_0^2} \cdot P_y + \frac{\alpha}{h_0^2} \cdot (P_{th-SPT} - P_y) \quad (4)$$

3. RESULTADOS

En este apartado, se recogen en la Figura 6 todos los resultados obtenidos de las probetas ensayadas tanto mediante ensayos ASTM F1624 [3] con probetas cilíndricas uniaxiales como mediante ensayos SPT según la propuesta planteada. En ella, se presentan todas las diferentes combinaciones de material y ambiente y los valores de carga umbral obtenidos con el método SPT propuesto y sus correspondientes contrapartidas de tensión umbral según ASTM F1624 [3].

En el eje vertical, la tensión umbral derivada para cada uno de los 12 escenarios estudiados (4 materiales $\times$ 3 entornos) aplicando la norma ASTM F1624 se representa en un gráfico de dispersión X-Y, en relación con su carga umbral SPT homóloga obtenida por la metodología propuesta, que se muestra en el eje X. Es decir, σ_{th} se representa gráficamente frente a su correspondiente P_{th-SPT} de la Tabla 5, donde se encuentra cierta correlación entre los dos parámetros umbrales (carga SPT y tensión F1624), indicando cierta dependencia entre ellos. La correlación propuesta sólo es válida para las geometrías de probeta, punzón y herramientas SPT empleadas en este trabajo, que son las recomendadas por la norma europea. Aunque se admiten pequeñas variaciones en el espesor de la probeta SPT porque la expresión propuesta lo corrige, debe tenerse en cuenta que debe utilizarse un espesor lo más próximo posible a 0,50 mm, y en este trabajo se ha empleado un espesor de probeta contenido en el rango $0,50 \pm 0,01$ mm en todos los casos.

A partir de los trabajos previos ya mencionados de los autores [7], en los que se explica detalladamente el siguiente modelo, y puesto que la tensión umbral obtenida por ambos métodos debe ser igual

$$\sigma_{th-ASTM} = \sigma_{th-SPT} = \sigma_{el-SPT} + \sigma_{pl-SPT} \rightarrow \sigma_{pl-SPT} = \sigma_{th-ASTM} - \sigma_{el-SPT} \quad (5)$$

E igualando los componentes plásticos de las ecuaciones (3) y (5)

$$\sigma_{th-ASTM} - \sigma_{el-SPT} = \frac{\alpha}{h_0^2} \cdot (P_{th-SPT} - P_y) \rightarrow \sigma_{pl-SPT} = \alpha \cdot \frac{(P_{th-SPT} - P_y)}{h_0^2} \quad (6)$$

En este componente plástico, existe un coeficiente α que debe calibrarse. Esto se realiza para cada uno de los materiales, ya que no hay razón para pensar que α será un valor constante, teniendo muy probablemente una dependencia del material y/o del entorno. Como resultado de ello, en todos los casos se puede establecer una relación lineal que pasa por el origen con un

coeficiente de correlación (R^2) adecuado, lo que significa que existe una cuasi-independencia del medio agresivo; α se puede calcular directamente como la pendiente de la recta resultante para cada material, tal y como se puede observar en la Tabla 5, que presenta los valores obtenidos, que son distintos para cada material, donde se aprecia la dependencia del parámetro α con la dureza del material (HRC), que muestra buenas tendencias. Hay que señalar que, como la metodología ASTM F1624 sólo es válida para aceros de dureza superior a 33 HRC, la propuesta de SPT ha sido validada en el mismo rango, por lo que sólo es válida para esas situaciones. La razón es que son los aceros de media y alta resistencia los que principalmente sufren problemas medioambientales, por lo que la metodología del escalón sólo se ha estudiado en esos casos por una razón práctica.

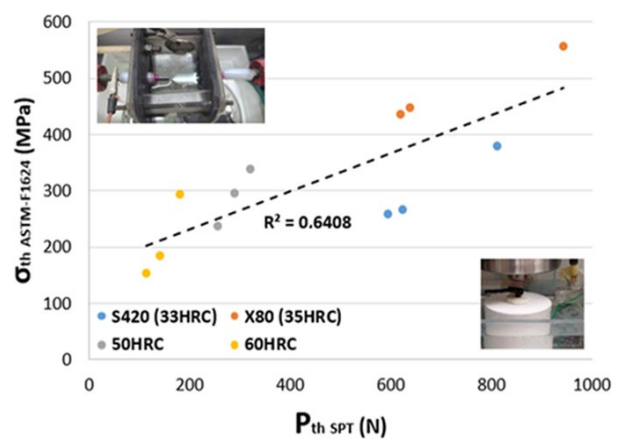


Figura 6. Correlación encontrada entre la carga umbral SPT y el valor de tensión ASTM F1624 en los distintos materiales, tensiones y ambientes estudiados.

Tabla 5. Valor del coeficiente α obtenido con el modelo de ajuste en los materiales y condiciones estudiados

Material	Dureza (HRC)	α
S420	33	0,0753
X80	35	0,0933
50 HRC	50	0,2331
60 HRC	60	0,3585

4. DISCUSIÓN

A partir del análisis de los resultados presentados, el coeficiente α no parece depender del ambiente. Sin embargo, α mantiene una clara dependencia de la dureza del material en el rango de materiales y ambientes cubiertos en esta investigación, como se ha mostrado en la Tabla 5. Aplicando la dependencia antes expuesta del coeficiente α en la expresión (4), los valores de tensión umbral pueden estimarse fácilmente a partir de las cargas umbral SPT obtenidas en los ensayos Small Punch. La Figura 7 muestra la comparación entre los valores umbrales obtenidos a partir de probetas de tracción convencionales y los obtenidos a partir del SPT. Puede apreciarse que los valores están siempre contenidos dentro de una desviación de $\pm 10\%$, como es habitual en las estimaciones SPT.

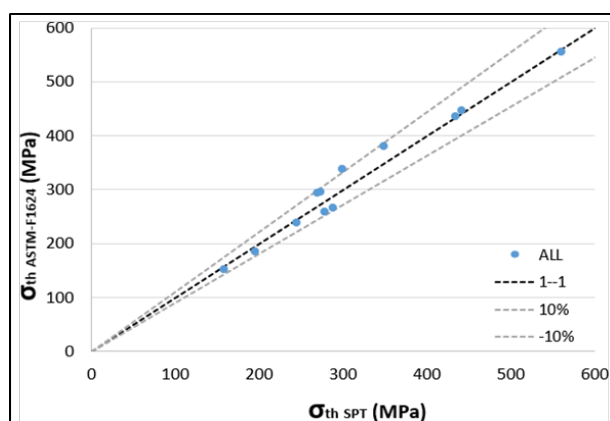


Figura 7. Propuesta de estimación de la tensión umbral basada en ensayos SPT.

5. CONCLUSIONES

Este artículo proporciona una validación exhaustiva del modelo previamente propuesto por los autores, que permite estimar la tensión umbral definida por la norma ASTM F1624 a partir de los resultados de los ensayos Small Punch. El modelo consiste en una correlación compuesta por una parte elástica y otra plástica, y reduce significativamente los requisitos de tiempo y material de los ensayos convencionales. La validación proporciona una metodología sólida para estimar la tensión umbral en aceros de resistencia media y alta con una dureza comprendida entre 33 y 60 HRC.

Se han empleado cuatro materiales y tres niveles de agresividad, validando los tiempos de escalones definidos como óptimos por los autores en trabajos previos, todo ello con el fin de calibrar el modelo para los rangos $33 \leq HRC < 45$, $45 \leq HRC < 55$ y $HRC \geq 55$. Dado el corto tiempo de los escalones, si su optimización no es lo primordial, o no se conoce la dureza con precisión, podrían unificarse los tiempos de 20 y 40 minutos para los escalones 1-10 y 11-20 respectivamente en cualquier acero siempre que tenga dureza igual o superior a 33 HRC.

Se ha comprobado que la parte elástica sólo depende de la carga SPT de transición de elástico a plástico (P_y), mientras que la parte plástica se rige por un coeficiente dependiente de la dureza del material. Se ha comprobado que este coeficiente es, en la práctica, independiente del medio agresivo, por lo que las dependencias reales de la metodología proceden únicamente del material en función de su dureza (mediante el coeficiente calibrado α).

Los trabajos futuros deberían ampliar la metodología propuesta a otros entornos y/o materiales, con el fin de hacer la metodología propuesta más robusta si cabe.

REFERENCIAS

[1] ISO 7539, Parts 1 to 9; Corrosion of Metals and Alloys. ISO: Geneva, Switzerland, 2011.
 [2] ASTM E1681-03; Test Method for Determining Threshold Stress Intensity Factor for Environment Assisted Cracking of Metallic Materials. ASTM international: West Conshohocken, PA, USA, 2013.

[3] ASTM F1624-18; Standard Test Method for Measurement of Hydrogen Embrittlement Threshold in Steel by the Incremental Step Loading Technique. ASTM International: West Conshohocken, PA, USA, 2018.
 [4] Zhu, X.; Peng, J.; Su, W.; Miao, X.; Ni, W.; Zhang, Q.; Zhang, R. Mechanical properties and fracture mechanism of CuCrZr alloy and pure Cu at high temperatures by small punch test. J. Nucl. Mater. 2024, 601, 155334.
 [5] EN 10371:2021 E; Metallic Materials—Small Punch Test Method. European Standard, ICS 77.040.10. ICS: Marikina City, Philippines, 2021.
 [6] ASTM E3205-20; Standard Test Method for Small Punch Testing of Metallic Materials. ASTM International: West Conshohocken, PA, USA, 2020.
 [7] Arroyo, B.; Andrea, L.; Gutiérrez-Solana, F.; Álvarez, J.A.; González, P. Threshold stress estimation in hydrogen induced cracking by Small Punch tests based on the application of the incremental step loading technique. Theor. Appl. Fract. Mech. 2020, 110, 102839.
 [8] Andrea, L.; Arroyo, B.; Álvarez, J.A.; Gutiérrez-Solana, F.; Cicero, F.; Guilbert, E. Optimization of Step Times for ASTM F1624 Methodology Applied to Small Punch Tests in Aggressive Environments. Met. Index. J. 2024, 14, 863.
 [9] Specification API 5LD; Specification for CRA Clad or Lined Steel Pipe. American Petroleum Institute: Washington, DC, USA, 2009.
 [10] BS EN 10225:2009; Weldable Structural Steels for Fixed Offshore Structures Technical Delivery Conditions. British Standards Institution: London, UK, 2009.
 [11] Hamilton, J.M. The challenges of deep-water artic development. Int. J. Offshore Polar Eng. 2011, 21, 241–247.
 [12] Wei, R.P. Hydrogen Effects in Metals. In Thompson; Bernstein, A.W., Ed.; AIME: New York, NY, USA, 1981; pp. 677–690.
 [13] Álvarez, J.A.; Gutiérrez-Solana, F. An elastic-plastic fracture mechanics based methodology to characterize cracking behaviour and its applications to environmental assisted processes. Nucl. Eng. Des. 1998, 188, 185–202.
 [14] Bernstein, J.M.; Pressouyre, G.M. Role of traps in the microstructural control of hydrogen embrittlement of steels. Noyes Publ. 1988, 74.
 [15] ASTM E-8; Standard Test Methods for Tension Testing of Metallic Materials. ASTM Standards; ASTM International: West Conshohocken, PA, USA, 2004.
 [16] Arroyo, B.; Álvarez, J.A.; Gutiérrez-Solana, F.; Lacalle, R.; González, P. Rate effects on the estimation of fracture toughness by small punch tests in hydrogen embrittlement. J. Strain Anal. 2019, 54, 390–400.
 [17] García, T.E.; Rodríguez, C.; Belzunce, F.J.; Peñuelas, I.; Arroyo, B. Development of a methodology to study the hydrogen embrittlement of steels by means of the small punch test. Mater. Sci. Eng. A 2015, 626, 342–351.
 [18] Wang, Z.; Liu, H.; Watanabe, Y.; Shoji, T.; Zhong, X.; Li, Z.; Lozano-Perez, S. Diffusible hydrogen facilitated stress corrosion cracking in 316 stainless steel using in-situ gaseous hydrogen charging in simulated PWR environment. Scr. Mater. 2025, 225, 116390.
 [19] Timoshenko, S.; Woinowsky-Krieger, S. Theory of Plates and Shells. McGraw Hill: New York, NY, USA, 1950.

ANÁLISIS DE FALLOS DE EJES PRINCIPALES DE AEROGENERADORES

M. Sánchez^{1*}, J. Gascón¹

¹ 1TECNALIA, Basque Research and Technology Alliance (BRTA), Mikeletegi Pasealekua 2, 20009 Donostia-San Sebastián, Gipuzkoa, Spain

* Persona de contacto: marcos.sanchez@tecnalia.com

RESUMEN

La fiabilidad y durabilidad de los aerogeneradores dependen en gran medida de la integridad estructural de sus ejes principales. Este estudio recopila y analiza los resultados de múltiples investigaciones sobre fallos en ejes principales fabricados en acero 34CrNiMo6 según la norma EN 10083. A través del análisis de causa raíz de diversos casos, se identificaron mecanismos recurrentes de fallo como fatiga, fretting y sobrecarga, destacando la interacción entre factores de diseño, mecanizado y condiciones de servicio. Entre las principales causas del fallo se incluyen tensiones elevadas asociadas a concentradores de tensiones (e.g., radios de acuerdo) y ajustes insuficientes en el acoplamiento eje-rodamiento, que generan patologías de contacto. Por otro lado, se identificó cómo los defectos de fabricación, rugosidades excesivas y desviaciones dimensionales, aumentan la susceptibilidad a daños por fretting y disminuyen la resistencia a fatiga. En algunos casos, la microestructura del material, particularmente la presencia de fases ferríticas o defectos en recubrimientos contribuyó a la nucleación y propagación de grietas. Dado que la rotura de los ejes principales no sólo implica elevados costes de reparación y de parada, sino también riesgos significativos para la seguridad de los trabajadores, se destaca la importancia de implementar sistemas de mantenimiento predictivo. Estos sistemas permiten convivir con las fisuras garantizando la productividad de los equipos con ausencia de riesgos de cara a la seguridad de las personas con la ventaja un aprovechamiento máximo de los componentes.

PALABRAS CLAVE: análisis de fallo; fatiga; fretting; eje principal; mantenimiento predictivo

ABSTRACT

The reliability and durability of wind turbines largely depend on the structural integrity of their main shafts. This study compiles and analyzes the results of multiple investigations on failures in main shafts made of 34CrNiMo6 steel according to the EN 10083 standard. Through root cause analysis of various cases, recurring failure mechanisms such as fatigue, fretting, and overload were identified, highlighting the interaction between design factors, machining, and service conditions. Among the main causes of failure are high stresses associated with stress concentrators (e.g., fillet radii) and insufficient adjustments in the shaft-bearing coupling, which generate contact pathologies. On the other hand, it was identified how manufacturing defects, excessive roughness, and dimensional deviations increase susceptibility to fretting damage and decrease fatigue resistance. In some cases, the material's microstructure, particularly the presence of ferritic phases or coating defects, contributed to the nucleation and propagation of cracks. Since the failure of main shafts not only involves high repair and downtime costs but also significant risks to worker safety, the importance of implementing predictive maintenance systems is highlighted. These systems allow for the coexistence with cracks, ensuring the productivity of the equipment without risks to the safety of people, with the advantage of maximizing component utilization.

KEYWORDS: failure analysis; fatigue; fretting; main shaft; predictive maintenance

1. INTRODUCCIÓN

La energía eólica ha experimentado un crecimiento exponencial en las últimas décadas, consolidándose como una fuente clave en la transición energética global [1]. En Europa, la capacidad de generación eólica aumentó un 573% entre 2005 y 2023 [2], siendo España uno de los países pioneros en su adopción. Sin embargo, esta expansión temprana implica que una parte significativa del parque eólico está envejeciendo. Para

2020, se estimó que la mitad de los aerogeneradores en operación superarían los 15 años de servicio [3], lo que plantea un desafío crítico en términos de mantenimiento y extensión de la vida útil.

El eje principal, también llamado eje de baja velocidad, es un componente fundamental del aerogenerador (ver Figura 1). Su fallo puede generar un efecto cascada que afecte a otros elementos clave, como la multiplicadora, con costos de reparación que pueden alcanzar los 0,5 M€.

En algunos casos, la falla del eje puede derivar en el colapso del rotor, con riesgos tanto estructurales como para la seguridad del personal.

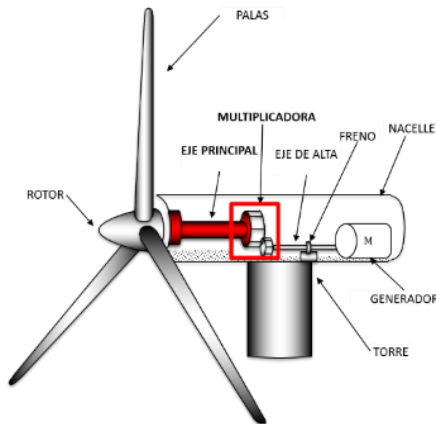


Figura 1. Esquema básico de un aerogenerador y sus partes principales [1].

Para mitigar estos riesgos, se llevan a cabo inspecciones con equipos de ultrasonidos de manera manual en la testa del eje. Sin embargo, estas inspecciones presentan limitaciones como la detención del aerogenerador, lo que implica pérdidas económicas y no permite un monitoreo continuo del crecimiento de grietas. Además, las inspecciones tradicionales suelen realizarse solo en aerogeneradores con historial de fallos, lo que puede llevar a detecciones tardías y fallos inesperados. Como resultado, en la práctica, la explotación del eje se limita aproximadamente al 50% de su vida útil real.

En los últimos años, han surgido distintos enfoques para automatizar la detección de grietas en estos ejes. Se han explorado tecnologías basadas en emisión acústica, termografía [4] y ultrasonidos con barrido mecánico en la superficie del eje [5]. También se han desarrollado sistemas fijos de transductores ultrasónicos en la testa del eje [6]. Sin embargo, la mayoría de estos sistemas se enfocan exclusivamente en la detección de grietas, sin proporcionar una estimación de la vida útil remanente (Remaining Useful Life, RUL) del eje, lo que limita su aplicabilidad en estrategias de mantenimiento predictivo.

Una de las principales dificultades para trasladar las inspecciones manuales a un sistema de monitoreo estructural (Structural Health Monitoring, SHM) radica en la falta de movimiento de los transductores, lo que requiere estrategias avanzadas para cubrir toda la sección transversal del eje. Técnicas tomográficas con electrónica multicanal han sido propuestas [7-9], pero su alto costo limita su viabilidad en parques eólicos antiguos.

Este trabajo presenta un análisis detallado de fallos en ejes principales de aerogeneradores, recopilando casos reales y evaluando los principales mecanismos de fallo.

A partir de esta revisión, se analiza la aplicabilidad del mantenimiento predictivo basado en ultrasonidos, previamente propuesto en [10], en distintos modelos de ejes principales.

Dicha metodología de inspección no solo detecta la presencia de grietas, sino que también evalúa la RUL del eje, clasificando su estado en función de tramos relevantes de vida útil. Esta metodología se basa en análisis de causa raíz (Root Cause Analysis, RCA) [11] de los fallos en ejes principales, complementado con un sistema de detección ultrasónica de bajo costo que se acopla a la testa del eje y permite el monitoreo continuo del estado del componente. La combinación de estas herramientas ofrece un enfoque innovador para optimizar la planificación del mantenimiento, reducir los costos operativos y extender la vida operativa de los aerogeneradores.

2. ANÁLISIS DE FALLO

Tecnalia tiene una amplia experiencia en el análisis de fallo de componentes de aerogeneradores. En este trabajo, se han recopilado 13 casos de fallos en ejes principales de aerogeneradores, como se muestra en la Tabla 1. El primer paso para identificar la causa raíz del fallo es analizar cómo ocurrió y luego esclarecer su origen. En este sentido, se llevaron a cabo los siguientes análisis:

1. Inspección visual
2. Análisis metalográfico
3. Análisis microfractográfico
4. Evaluación dimensional
5. Ensayos mecánicos
6. Análisis químico
7. Evaluación de las condiciones de servicio

Se han analizado distintos tipos de ejes: ocho corresponden al modelo G5X, uno al modelo BONUS 600, uno al modelo GE 750, dos al modelo AE 46 y un último al modelo G8X. A partir del análisis de las zonas de rotura, se identifican las siguientes regiones críticas:

- Asiento del rodamiento delantero.
- Asiendo del rodamiento trasero.
- Conexión del eje con la multiplicadora (específica del G5X).

Tabla 1. Relación de casos analizados y zona de rotura.

CASO	TIPO EJE	ZONA ROTURA
A	G5X	Rodamiento delantero
B	G5X	Rodamiento delantero
C	G5X	Conexión con multiplicadora

D	G5X	Conexión con multiplicadora, cambio sección interna
E	G5X	Conexión con multiplicadora, cambio sección interna
F	G5X	Conector al buje
G	G5X	Rodamiento trasero
H	BONUS 600	Conexión con multiplicadora, reparada con retrofit
I	GE 750	Rodamiento delantero
J	AE 46	Rodamiento delantero
K	G5X	Rodamiento delantero
L	G8X	Rodamiento trasero
M	AE 46	Rodamiento delantero

2.1. Mecanismo de fallo

El análisis de las fracturas, llevado a cabo con inspección visual, análisis metalográfico y análisis microfractográfico, permitió determinar los principales mecanismos de fallo en ejes principales. La Tabla 2 muestra los mecanismos predominantes. En general, independientemente del tipo de eje, los fallos involucran una patología de fretting, seguido de un proceso de fatiga y una rotura final por sobrecarga.

El fretting es una patología de esfuerzos de contacto que ocurre cuando dos elementos en contacto experimentan movimientos oscilatorios del orden de decenas de micras. La Figura 2 muestra un daño característico por fretting en la superficie del eje. Este fenómeno genera microfisuras debido a las elevadas tensiones que se generan debido a la combinación de fricción y oxidación, lo que promueve la actuación de procesos de fatiga debido a la eliminación de la fase de nucleación reduciendo así la vida útil del componente.

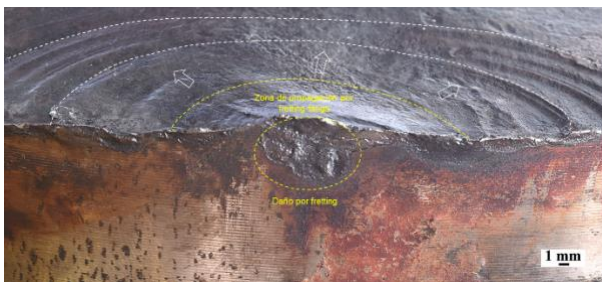


Figura 2. Daño por fretting a partir del cual se genera una grieta ligeramente angulada.

A diferencia de otros ejes, los modelos G5X presentan un cambio de sección interno en la conexión con la multiplicadora, lo que puede generar concentraciones de tensión en la zona de transición. En varios de los casos analizados, el origen del fallo estuvo relacionado con este

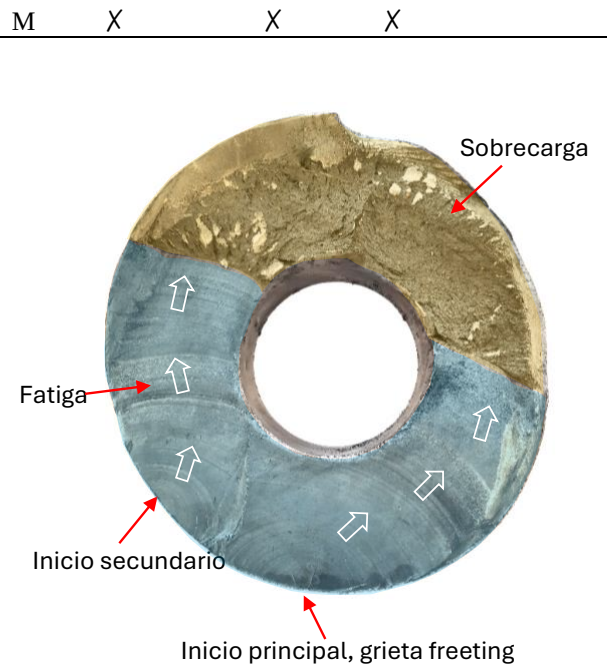
cambio de sección, lo que redujo el proceso de fallo a fatiga seguida de rotura por sobrecarga.

Por ello, y teniendo en cuenta que la rotura en el cambio de sección es particular del modelo G5X, el proceso típico de fallo en los ejes principales se desarrolla en tres fases (como se muestra en el ejemplo de la Figura 3):

- Fase 1: Proceso de fretting localizado en el asiento del rodamiento. Como consecuencia de este mecanismo, se generan múltiples daños en la superficie del eje en forma de deformaciones, oxidaciones y grietas (ver Figura 2). El análisis metalográfico revela microfisuras y zonas de desgaste prematuro en estas áreas.
- Fase 2: Proceso de fatiga, caracterizada por una textura suave combinada con marcas de playa que surgieron de marcas Ratchet, localizadas tanto en puntos individuales como múltiples ubicados en la periferia. El plano transversal en el que se localiza la fatiga confirma que se desarrolla principalmente bajo esfuerzos de flexión. El análisis SEM revela estrías propias del mecanismo de fatiga.
- Fase 3: La fase de rotura final se produce mediante un mecanismo de rotura por sobrecarga, que se caracteriza por una textura rugosa. Esta fase final puede dividirse en dos tipos:
 - Sobrecarga frágil, caracterizada por una superficie brillante con presencia de marcas direccionales (con forma de chevron) que se produjeron en el momento en que se alcanzó el tamaño crítico de la grieta.
 - Sobrecarga dúctil, donde la textura es mate y con labios de salida en planos a 45°.

Tabla 2. Principales mecanismos de fallo encontrados.

CASO	FRETTING	FATIGA	SOBRECARGA	
			FRÁGIL	DÚCTIL
A	X	X		X
B	X	X		X
C	X	X	X	
D		X		X
E		X		X
F		X		
G		X		X
H		X	X	
I	X	X	X	
J	X	X	X	
K	X	X		X
L	X	X	X	



2.2 Análisis del material

El material más empleado en la fabricación de ejes principales es el 34CrNiMo6, seleccionado por su alta resistencia mecánica, tenacidad y capacidad para soportar cargas dinámicas. Sus principales propiedades químicas y mecánicas se presentan en las Tablas 3 y 4, respectivamente.

Los análisis químicos confirman que la composición del material cumple con los requisitos de la norma EN 10083-3, asegurando su uniformidad y calidad metalúrgica. Asimismo, los ensayos mecánicos han validado su resistencia a la fatiga, con un límite de fatiga aproximado de 450 MPa (asumiendo la mitad de la UTS del material). Adicionalmente, los estudios metalográficos revelan una microestructura martensítica con bainita revenida, propio de un material que ha estado sujeto a un tratamiento de temple y revenido.

Tabla 3. Composición química del acero 34CrNiMo6 s/EN 10083-3 (% peso).

C	S	Si	Mn
0.30-0.38	<0.035	<0.40	0.50-0.80
P	Cr	Ni	Mo
<0.025	1.30-1.70	1.30-1.70	0.15-0.30

Tabla 4. Propiedades mecánicas del acero 34CrNiMo6 s/EN 10083-3. YS: límite elástico. UTS: tensión última. A: alargamiento tras la rotura. Z: reducción de área. CV: energía Charpy.

YS	UTS	A	Z	CV
[Mpa]	[Mpa]	[%]	[%]	[J]
>600	850-950	>13	>55	> 45

2.3. Análisis de la causa raíz

Los ejes principales están sometidos a varias condiciones: cargas de flexión cíclicas vinculadas al peso del rotor, presión del viento, peso de la multiplicadora, y cargas de contacto en el asiento del rodamiento. Como resultado, el proceso de fallo presenta una fatiga y una sobrecarga, que suele ir precedida por un mecanismo de fretting.

En los casos donde la fatiga se originó en un daño por fretting, se analizaron distintos parámetros que pueden afectar al mismo (dimensionamiento, dureza, material, rugosidad, tensiones), determinando que las principales causas raíz del fallo fueron un apriete insuficiente entre eje y rodamiento, que puede ir acompañado de unas tensiones de servicio elevadas.

La evaluación de las tensiones de servicio, generalmente obtenidas a partir del conteo de estrías de fatiga, se llevó a cabo utilizando el criterio de Goodman y los coeficientes de Marin. Este análisis permitió comparar las tensiones admisibles a fatiga en función de las condiciones de carga reales de los ejes, considerando factores de carga, superficie, tamaño, temperatura, concentrador de tensiones, etc. Los resultados indicaron que, en varios casos, las tensiones de servicio se acercaban o incluso sobrepasaban las máximas admisibles.

Cuando la fatiga no se debió a fuerzas de contacto, se identificaron otras causas raíz. Entre ellas estarían defectos en el mecanizado, que generan concentraciones de tensión en la superficie del eje, facilitando la iniciación de grietas. Otro tipo de defecto estaría relacionado con los recubrimientos, se observó como la falta de adherencia en tratamientos superficiales, como los empleados en procesos de recuperación, puede acelerar la nucleación de grietas. Asimismo, procesos de fabricación inadecuados, como tratamientos térmicos mal controlados, pueden inducir microfisuras internas que comprometen la resistencia a fatiga del material.

3. MANTENIMIENTO PREDICTIVO

El diseño que habitualmente presentan los ejes principales de los aerogeneradores los hace susceptibles de desarrollar fisuras de fatiga a partir de los daños por fretting. En este sentido, la mayor parte de ellos tiene un

cierto riesgo de desarrollar fisuras, con consecuencias catastróficas como el desplome del rotor, lo que implica unos costes de reparación y de parada muy significativos, así como un riesgo para el personal de mantenimiento.

En los casos donde un mantenimiento preventivo es irrealizable, ya sea debido a su complejidad o a que supondría un coste inasumible, la implementación de un mantenimiento predictivo bien manual o bien mediante equipos embarcados autónomos [10] supondría una solución óptima.

El mantenimiento predictivo basado en ultrasonidos ha sido previamente desarrollado y validado como una alternativa a las inspecciones manuales. En este trabajo, se evalúa su aplicabilidad en distintos tipos de ejes principales de aerogeneradores, considerando los mecanismos de fallo identificados en la Sección 2. Estos análisis de fallos han demostrado que los principales mecanismos de daño en los ejes incluyen el fretting, la fatiga y la rotura por sobrecarga. Estas patologías, especialmente en zonas críticas como el asiento del rodamiento y la conexión con la multiplicadora, generan grietas que, sin un monitoreo adecuado, pueden evolucionar hasta provocar fallos estructurales irreparables. La fatiga por flexión es el factor más relevante en la planificación del mantenimiento predictivo, ya que su control permite maximizar la vida útil del componente y evitar fallos inesperados.

Las metodologías tradicionales, como la inspección por ultrasonidos manual, han sido útiles para la detección de grietas, pero presentan limitaciones significativas. Estas inspecciones requieren la detención del aerogenerador, lo que implica pérdidas en la producción energética y costos adicionales de mantenimiento.

Para abordar estas limitaciones, se desarrolló un sistema autónomo basado en ultrasonidos denominado LEO (Life Extension in eOlics), que permite la evaluación continua del estado del eje sin necesidad de interrumpir su operación. LEO emplea un array anular de transductores ultrasónicos fijados en la testa del eje, que, en combinación con algoritmos avanzados de procesamiento de señales, permite detectar y caracterizar grietas desde una profundidad de alrededor de 5mm hasta 100mm, lo que supone un aprovechamiento del 96% de la vida útil del eje, muy superior al 50% esperable con inspecciones manuales y con un coste muy inferior.

La Figura 4 ilustra la evolución del tamaño de la grieta para un tipo de aerogenerador concreto donde las fisuras de fretting suelen alcanzar una profundidad de 1.5mm. En ese momento la fatiga por flexión toma el relevo llevando la grieta hasta los 160mm de profundidad, momento en el que se produce el fallo catastrófico. El umbral de detección por ultrasonidos se halla en el entorno de 3mm de profundidad, por lo que, de cara a

realizar el mantenimiento predictivo en base a inspecciones manuales estas se periodifican en base a tercios de la vida controlable, que es el tiempo necesario para pasar desde el umbral hasta el tamaño de grieta máximo admisible.

Este planteamiento supone que, en ausencia de indicaciones, se repitan inspecciones cada 4 meses. Una vez se detectan grietas se procede al cálculo de la vida remanente y, en función de ella, se replantea la agenda de inspecciones. En el caso más desfavorable se permite la operación de los ejes con fisuras de 5mm de profundidad, cuya existencia implica el consumo del 50% de la vida remanente.

En el caso de los equipos LEO la operatividad de los aerogeneradores está garantizada hasta un tamaño máximo de 100mm de profundidad, momento en el que, si bien la vida remanente sería de tan sólo 4%, la integridad estaría cubierta con un coeficiente de seguridad superior a 2.

El control del crecimiento de las grietas se gestiona a través de tres etapas de operación del sistema:

- Primera etapa: Detección de la iniciación de una grieta, emitiendo la alerta correspondiente a una “Grieta Inicial”.
- Segunda etapa: Cuando la grieta detectada se relaciona con 1–2 meses de vida útil restante (RUL), se emite una nueva alerta indicando que la grieta es “No Peligrosa”.
- Tercera etapa: Se activa la alerta final cuando el tamaño de la grieta detectada equivale al consumo del 96% de la RUL, indicando que el fallo es inminente.

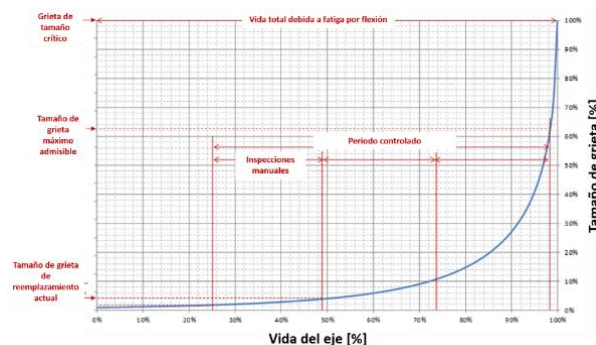


Figura 4. Relación entre el tamaño de grieta y la vida del eje (calculada con valores de tensiones 50% por encima de los nominales).

LEO supera las limitaciones de las inspecciones manuales en términos de rendimiento, fiabilidad y seguridad, como se muestra en la comparativa en la Figura 5. Su eficiencia ha sido validada en condiciones operativas reales, la Figura 6 muestra el dispositivo colocado en un eje en servicio. El sistema fue capaz de detectar grietas “invisibles” en inspecciones manuales

gracias a su monitoreo continuo, eliminando la influencia de zonas de compresión que afectan la detección tradicional. Otro aspecto relevante es que las mediciones de calibración del sistema automático se realizan justo antes de la inspección ultrasónica, eliminando errores asociados a condiciones ambientales diferentes, como temperatura o humedad, que afectan la precisión en inspecciones manuales.

En conclusión, este sistema de mantenimiento predictivo representa un avance significativo en la gestión de la integridad estructural de los aerogeneradores. No sólo mejora la capacidad de detección de fallos, sino que también permite una toma de decisiones más informada, optimizando la planificación de sustituciones y reduciendo los tiempos de inactividad. De este modo, se mitigan los efectos de los mecanismos de fallo descritos en la sección anterior, logrando una mayor fiabilidad y sostenibilidad en la operación de los aerogeneradores.

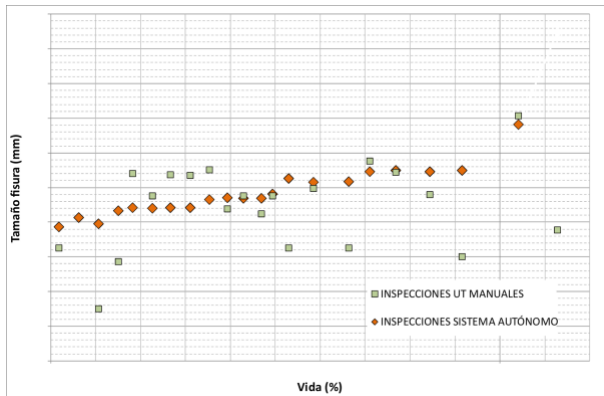


Figura 5. Comparación de la longitud de las grietas medidas en un eje con inspecciones manuales y autónomas. Se aprecia una menor dispersión de valores por la inspección automática. (Se ha omitido la información de los ejes X e Y por motivos de confidencialidad).



Figura 6. Equipo LEO instalado en uno de los aerogeneradores.

4. CONCLUSIONES

Este trabajo ha analizado los fallos en ejes principales de aerogeneradores y evaluado la aplicabilidad del sistema

de monitoreo ultrasónico previamente desarrollado. Se ha confirmado que los principales mecanismos de degradación—fretting, fatiga y sobrecarga—se repiten en distintos modelos de ejes, lo que sugiere que la estrategia de mantenimiento predictivo podría extenderse más allá de su aplicación original en un tipo de aerogeneradores concreto.

En conclusión, integrar el análisis de fallos con monitoreo continuo mediante ultrasonidos representa una estrategia prometedora para optimizar la vida útil de los ejes principales en aerogeneradores, reducir costos de mantenimiento y mejorar la fiabilidad operativa en diferentes configuraciones de diseño

AGRADECIMIENTOS

El desarrollo de esta investigación está financiado por empresas privadas, así como por el programa de fondos EMAITEK del Gobierno Vasco.

REFERENCIAS

- [1] G. W. E. Council, "GLOBAL WIND STATISTICS 2023," ed, 2023.
- [2] W. Europe, "Wind in power 2017," ed: February, 2023.
- [3] Asociación Empresarial Eólica. II Jornada Internacional sobre Extensión de Vida de Parques Eólicos. Oct. 2018.
- [4] F. P. García Márquez, A. M. Tobias, J. M. Pinar Pérez, and M. Papaalias, "Condition monitoring of wind turbines: Techniques and methods," Renewable Energy, vol. 46, pp. 169-178, 2012/10/01/ 2012.
- [5] JP H10 206396 A (Railway Technical Res Inst) 7 August 1998
- [6] B. Birkemose, K. E. Poulsen, "Main shaft for a wind turbine."EP2 626 558B1, 2013
- [7] M. Tabatabaeipour, J. Hettler, S. Delrue, and K. Van Den Abeele, "Reconstruction algorithm for probabilistic inspection of damage (RAPID) in composites," in 11th European Conference on Non-Destructive Testing (ECNDT 2014), 2014.
- [8] D. Wang, W. Zhang, X. Wang, and B. Sun, "Lamb-wave-based tomographic imaging techniques for hole-edge corrosion monitoring in plate structures," Materials, vol. 9, no. 11, p. 916, 2016.
- [9] M. Dziendzikowski, A. Kurnyta, K. Dragan, S. Klysz, and A. Leski, "In situ Barely Visible Impact Damage detection and localization for composite structures using surface mounted and embedded PZT transducers: A comparative study," Mechanical Systems and Signal Processing, vol. 78, pp. 91-106, 2016.
- [10] N. Galarza-Urigoitia, B. Rubio-García, J. Gascón-Álvarez, G. Aznar-Lapuente, J. Olite-Biurrun, A. López-Germán, J. Rubio-Botía, Predictive maintenance of wind turbine low-speed shafts based on an autonomous ultrasonic system, Eng Fail Anal 103 (2019) 481–504. <https://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2019.04.048>.

- [11] M. A. Barsalou, Root cause analysis: A step-by-step guide to using the right tool at the right time. CRC Press, 2014.
- [12] G. S.Kino, Acoustic waves: devices, imaging, and analog signal processingPrentice-Hall Signal Processing Series. Englewood Cliffs, Prentice-Hall, 1987.
- [13] Rolek, P., Bruni, S., & Carboni, M. (2016). Condition monitoring of railway axles based on low frequency vibrations. International Journal of Fatigue, 86, 88-97.

