

Grau en Matemàtiques

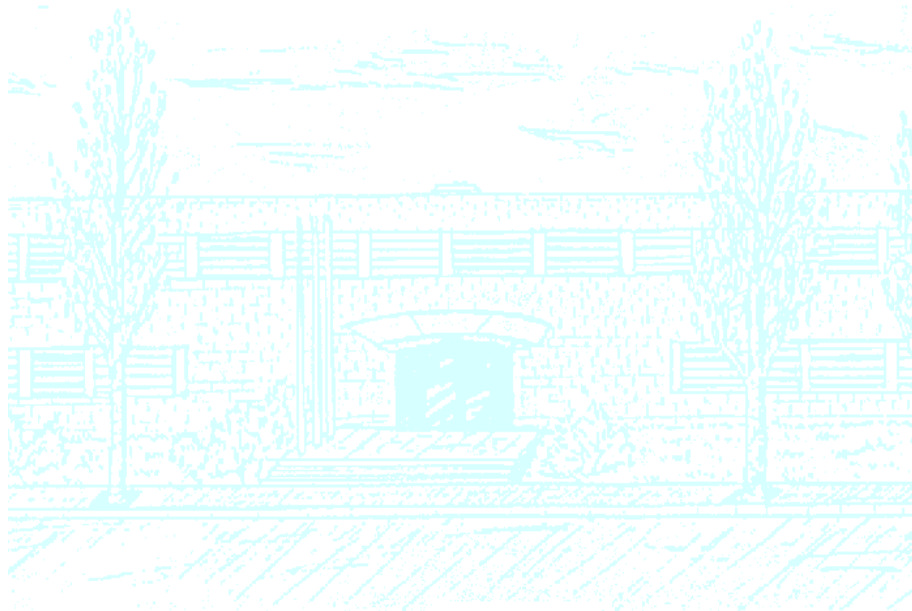
Títol: Models computacionals de fractura fràgil

Autor: Adrià Pons Puntí

Director: Sonia Fernández-Méndez, Alba Muixí Ballonga

Departament: Departament d'Enginyeria Civil i Ambiental

Convocatòria: 2018-2019



Universitat Politècnica de Catalunya
Facultat de Matemàtiques i Estadística

Grau en Matemàtiques
Treball de Fi de Grau

Models computacionals de fractura fràgil

Adrià Pons Puntí

Supervisat per Sonia Fernández-Méndez & Alba Muixí Ballonga

Gener 2019

Agraïments

Per dur a terme aquest treball he tingut el suport d'algunes persones, sense les quals aquest no hauria estat possible. És per això que m'agradaria agrair:

- A tota la meva família, en especial als meus pares i al meu germà, el suport i els consells que m'han donat a l'hora realitzar aquest treball.
- Als meus amics, principalment a en David, l'Adrián, la Júlia, la Diana, la Marta, la Nora i en Gerard, tots els suggeriments que m'han fet i el fet d'haver estat sempre al meu costat donant-me suport fins a l'últim moment.
- Per últim, però no menys important, a les directores del treball, la Sonia Fernández i l'Alba Muixí, totes les hores que han dedicat a explicar-me conceptes i ajudar-me a seguir avançant. Sense la seva ajuda res d'aquest treball hauria estat possible.

Resum

L'estudi de la propagació de fractures en diferents materials és un camp en augment en els últims anys. Ja sigui per tal d'estudiar el comportament d'alguns materials davant de diferents esforços o per preveure com evolucionarà un crack al llarg del temps, la necessitat d'aquests estudis és cada cop més present i rellevant. En aquest projecte s'estudiaran dos dels models més utilitzats en aquest àmbit: el Phase-Field i el Gradient-Damage. Prèviament a cada un dels models, s'introduiran diverses equacions necessàries per entendre'n la modelització, seguit de simulacions numèriques. Per a cada model, s'explicarà com s'arriba al sistema d'equacions a resoldre, com solucionar-lo i es mostraran exemples numèrics que ajuden a determinar la dependència de la solució en cada un dels paràmetres materials pels dos models. A la part final del treball es compararan ambdós models per intentar reproduir els resultats d'un amb l'altre.

Paraules clau

Mètodes Numèrics, EDPs, Phase-Field, Gradient-Damage, Fractura, Crack, Elasticitat Lineal

Índex

1	Introducció	2
1.1	Models Discontinus	2
1.2	Models Continus	4
1.3	Estructura del Treball	5
2	Equació d'Elasticitat Lineal	6
3	Model de Phase-Field	10
3.1	Equació d'Elasticitat Lineal amb Dany	11
3.2	Equació de Dany	13
3.3	Model Phase-Field	15
3.4	Resultats	16
4	Model de Gradient-Damage	19
4.1	Equació d'Equilibri	20
4.2	Equació de Difusió	22
4.3	Model Gradient-Damage	23
4.4	Resultats	24
5	Comparativa entre els dos models	30
6	Conclusions	33
A	Forma Feble de l'Equació d'Elasticitat Lineal	35
B	Com s'utilitza Clonetroop	36

1. Introducció

El camp de la mecànica de fractures ha passat en els últims anys a ser un tema de gran interès dins el món de l'enginyeria per a entendre i poder predir el comportament de diversos materials al ser sotmesos a diferents esforços, com forces de tracció i compressió. El propòsit principal d'aquest camp és l'estudi de les fractures que sorgeixen en aquests materials, més concretament com aquests s'originen i es propaguen al llarg del temps.

Per modelitzar aquestes fractures (també anomenades *cracks*) existeixen dos grans enfocaments principals: les descripcions discontinues o contínues dels cracks. Els models discontinus descriuen el crack a través de camps de desplaçament discontinu, mentre que els continus el representen com una banda (o regió) danyada que ha perdut la seva capacitat de càrrega¹. A la Figura 1 es pot veure un exemple de representació geomètrica d'un crack basat en cadascun d'aquests enfocaments.

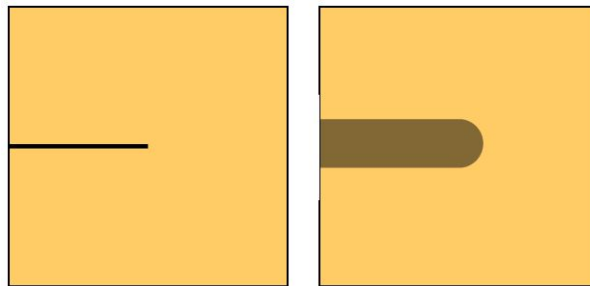


Figura 1: A l'esquerra, crack representat amb un model discontinu.
A la dreta, crack "suavitzat" generat a partir d'un model continu.
Figura extreta de [2].

1.1 Models Discontinus

Se suposa un cos amb un crack lliure de tracció sobre un domini Ω i sota la hipòtesi de petites deformacions. Sigui \mathbf{u} el camp de desplaçaments i $\boldsymbol{\sigma}$ el tensor d'estrès de Cauchy. Aleshores, es pot veure que l'equilibri de moment lineal i les condicions de contorn són:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} = \mathbf{0} & \text{a } \Omega \\ \mathbf{u} = \mathbf{u}_D & \text{a } \Gamma_D \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t}_N & \text{a } \Gamma_N \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} & \text{a } \Gamma_C^+ \cup \Gamma_C^- \end{cases} \quad (1)$$

On \mathbf{f} són les forces del cos, \mathbf{n} el vector normal exterior i \mathbf{u}_D i \mathbf{t}_N els desplaçaments i traccions de la vora, respectivament. Γ_D i Γ_N són les vores de Dirichlet i Neumann, que satisfan $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ i $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$. Γ_C^+ i Γ_C^- representen les dues cares del crack, tal i com es pot veure a la figura següent.

¹Capacitat d'un material de continuar essent deformat.

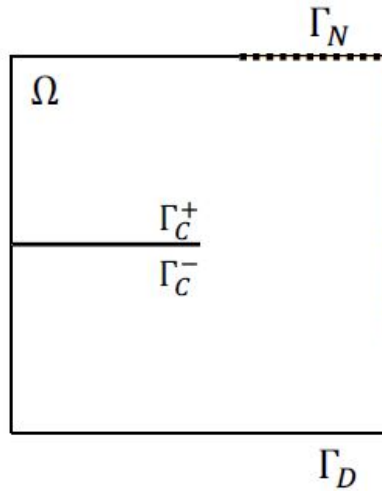


Figura 2: Peça amb un crack de model discontinu.
Figura extreta de [2].

La relació entre σ i \mathbf{u} ve donada per la següent equació constitutiva:

$$\sigma = \mathcal{C} : \varepsilon, \quad \text{on } \varepsilon = \nabla^s \mathbf{u}$$

\mathcal{C} és un tensor de 4t ordre que depèn del primer i segon paràmetre de Lamé², λ i μ . El sistema format per totes aquestes equacions es pot solucionar ara per trobar els desplaçaments, les deformacions i les tensions.

Tot i que aquest tipus de models són usats per la seva simplicitat presenten una dificultat: la discontinuïtat que es genera al voltant del crack. Si s'intenta solucionar el model mitjançant el Finite Element Method (FEM) hi ha el problema que la malla necessita adaptar-se al crack. Com que aquest va evolucionant en el temps es necessita que la malla també ho faci, és a dir, és necessari fer un remallat a cada pas de temps. Aquest fet fa que sigui computacionalment ineficient i afecta a la precisió del resultat. A més, es necessita una malla molt fina a la punta del crack per tal de poder capturar bé la singularitat de la solució. Un exemple de com seria una malla amb aquest tipus de mètode es pot veure a la Figura 3.

Per tal d'evitar aquest tipus de dificultat existeix una modificació de FEM que defineix una estratègia per solucionar el problema amb una malla que no necessita ser adaptada a la geometria del crack. Aquest mètode anomenat eXtended Finite Element Method (X-FEM), però, no entra dins el pla d'estudi d'aquest treball, així que no se'n comentaran més aspectes.

²Dues constants elàstiques que caracteritzen completament el comportament elàstic lineal d'un sòlid isòtrop en petites deformacions.

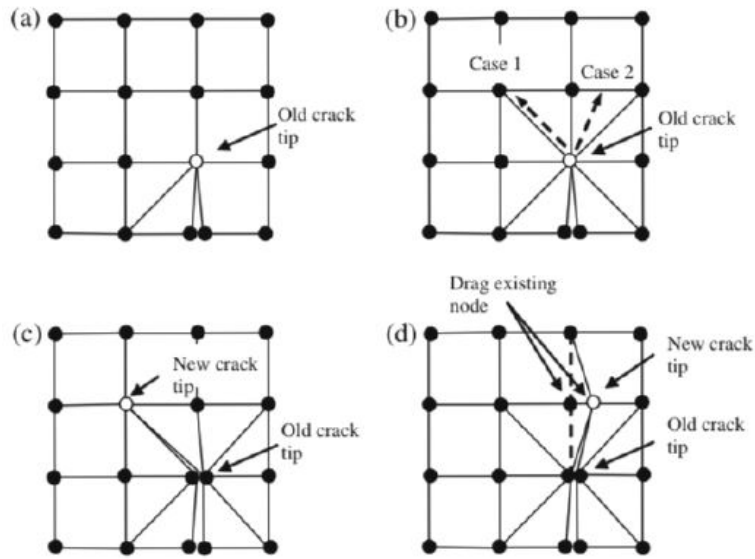


Figura 3: Propagació del crack amb un mètode discontinu (dos possibles casos). Figura extreta de [2].

1.2 Models Continus

Com s'ha explicat abans, els models continus representen el crack com una banda danyada que ha perdut la seva capacitat de càrrega. Aquest fet fa que la malla no hagi d'estar estrictament adaptada al crack i, per tant, no es necessita un remallat a cada iteració o pas de temps. Aquest models sí que utilitzen, però, una malla més fina als llocs pels quals es creu que es propagarà el crack per tal d'aproximar bé la solució.

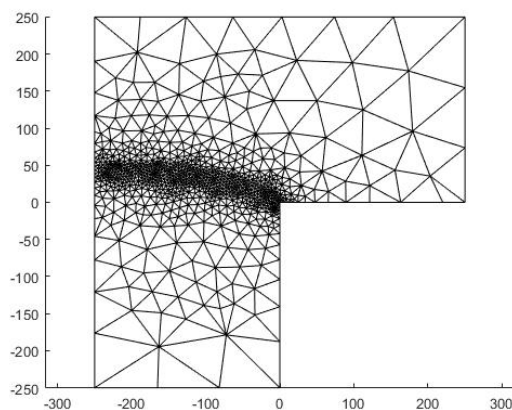


Figura 4: Malla refinada per on es creu que avançarà el crack.

Els dos models que s'estudiaran en aquest treball pertanyen a aquesta categoria: el Model de Phase-Field i el Model de Gradient-Damage. L'estudi de les similituds i diferències entre aquests dos models és interessant, degut a que tenen una estructura bastant similar, tot i que parteixen de punts de vista diferents.

1.3 Estructura del Treball

L'objectiu principal del present treball és el de comparar els models de Phase-Field i Gradient-Damage. En primer lloc s'explicarà cadascun d'ells, juntament amb diversos exemples per a cada cas. Un cop entesos, es procedirà a fer una comparació dels resultats. Per tal de facilitar la comprensió al lector, prèviament a l'explicació de cadascun dels models s'introduiran les equacions que en formen part, juntament amb diversos resultats numèrics i tests de convergència. En tots els casos, així com amb els dos models, es considerarà $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$.

Tots els mètodes i rutines d'aquest treball s'han programat en Matlab. A més, per tal de poder realitzar dins un interval raonable de temps totes les computacions necessàries, s'han enviat molts dels càlculs a Clonetroop, un cluster per càlcul científic en sèrie i en paral·lel que es troba al Laboratori de Càlcul Numèric de la UPC. A l'apèndix B d'aquest treball hi ha una breu explicació de com s'utilitza Clonetroop i un exemple de com s'hi envia un càlcul.

2. Equació d'Elasticitat Lineal

L'equació d'elasticitat lineal té la forma següent:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b} = 0 \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \end{cases} \quad \text{(Equació Constitutiva)} \quad (2)$$

on \mathbf{b} són les forces externes del sistema i \mathbf{C} és un tensor de 4t ordre que depèn de paràmetres materials. $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})$ és la matriu de petites deformacions, que en el cas 2D ve donada de la següent manera:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \nabla^s \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_x}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) & \frac{\partial u_y}{\partial y} \end{bmatrix}$$

on u_x i u_y indiquen les components x i y del desplaçament, respectivament.

Nota. Per a simplificar els càlculs, s'utilitzarà la Notació de Mandel, que permet escriure els tensors com a vectors. Funciona de la següent manera:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} \end{bmatrix} \longrightarrow \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{xy} \end{bmatrix}$$

D'aquesta manera, l'equació constitutiva de (2) es pot reescriure (fent abús de notació) sota la hipòtesi de deformació plana com

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}$$

amb

$$\mathbf{C} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \cdot \begin{bmatrix} (1-\nu) & \nu & 0 \\ \nu & (1-\nu) & 0 \\ 0 & 0 & (1-2\nu) \end{bmatrix}$$

on ν és el Coeficient de Poisson³ i E és el Mòdul de Young⁴.

³En una barra de secció uniforme sotmesa a una tensió longitudinal, quocient entre la contracció transversal i l'allargament.

⁴Relació entre la tracció a què es troba sotmès un cos i l'allargament que experimenta a causa d'aquesta tracció.

Partint de (2) i amb condicions de contorn

$$\begin{cases} \mathbf{u} = \mathbf{u}_D & \text{a } \Gamma_D \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{a } \Gamma_N \end{cases}$$

es pot deduir la forma feble del problema d'elasticitat lineal, seguint els passos explicats a l'apèndix A d'aquest treball.

El problema en forma feble consisteix, doncs, en trobar $\mathbf{u} \in [H^1(\Omega)]^2$ tal que $\mathbf{u} = \mathbf{u}_D$ a la frontera de Dirichlet, Γ_D , i tal que

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \, d\Omega = \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} \mathbf{b} \, d\Omega \quad \forall \mathbf{v} \in [H^1(\Omega)]^2 \text{ tal que } \mathbf{v} = 0 \text{ a } \Gamma_D \quad (3)$$

La solució \mathbf{u} s'aproxima ara com

$$\mathbf{u} = \sum_{i=1}^n \begin{bmatrix} (u_x)_i \\ (u_y)_i \end{bmatrix} N_i$$

amb unes funcions d'aproximació d'elements finits $\{N_i\}_{i=1}^n$. Substituint a la forma feble i prenent les funcions $\mathbf{v} \in \langle N_i \rangle$, s'obté un sistema lineal pels valors nodals de la forma $\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}$. En efecte, expressant

$$\mathbf{u}(x) = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & \cdots & \cdots & N_n & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & \cdots & \cdots & 0 & N_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (u_x)_1 \\ (u_y)_1 \\ \hline (u_x)_2 \\ (u_y)_2 \\ \hline \vdots \\ \hline (u_x)_n \\ (u_y)_n \end{bmatrix} =: [\mathbf{vecN}]\mathbf{U}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(x)) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(x) \\ u_2(x) \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} [\mathbf{vecN}]\mathbf{U} =$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial x} & 0 & \dots & \dots & \frac{\partial N_n}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \dots & \dots & 0 & \frac{\partial N_n}{\partial y} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\partial N_2}{\partial y} & \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\partial N_2}{\partial x} & \dots & \dots & \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\partial N_n}{\partial y} & \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\partial N_n}{\partial x} \end{bmatrix} \mathbf{U} =: [\mathbf{strainN}]\mathbf{U}$$

on \mathbf{U} és el vector de valors nodals. Prenent

$$\mathbf{v} = [\mathbf{vecN}]\mathbf{V}, \quad \varepsilon(\mathbf{v}) = [\mathbf{strainN}]\mathbf{V}$$

i substituint a la forma feble (3), s'obté

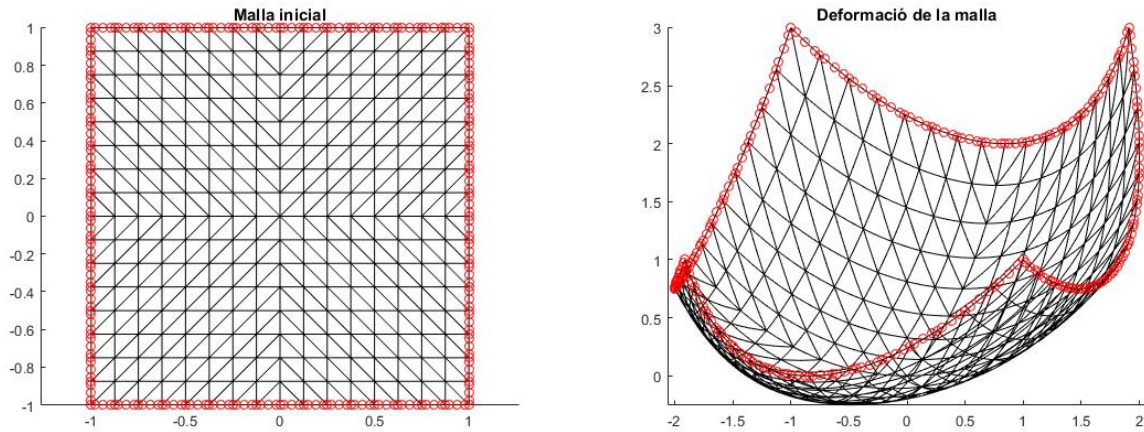
$$\mathbf{V}^T \left[\int_{\Omega} [\mathbf{strainN}]^T \mathbf{C} [\mathbf{strainN}] d\Omega \right] \mathbf{U} = \mathbf{V}^T \left[\int_{\Omega} \rho [\mathbf{vecN}]^T \mathbf{b} d\Omega \right], \quad \forall \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{2n}$$

D'on es tenen les expressions per a la matriu i el vector del sistema:

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} [\mathbf{strainN}]^T \mathbf{C} [\mathbf{strainN}] d\Omega \quad \mathbf{f} = \int_{\Omega} \rho [\mathbf{vecN}]^T \mathbf{b} d\Omega$$

Les condicions de contorn de Dirichlet s'imposen fixant els valors nodals corresponents.

El codi de Matlab proporcionat per l'Alba Muixí implementa el mètode considerat. Aquest utilitza una malla amb elements triangulars creada amb el programa EZ4U. Es calculen les matrius \mathbf{K} i \mathbf{f} utilitzant un element de referència triangular i ensamblatge de matrius elementals. Finalment, es resol el sistema $\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}$ tenint en compte les condicions de contorn de Dirichlet.



(a) Malla inicial quadrada amb elements triangulars.

(b) Malla deformada després d'aplicar-li elasticitat lineal.

Figura 5: Deformació d'una malla quadrada a partir de la solució analítica⁵

$$u_x = \sin(x + y), \quad u_y = x^2 + y^2 \text{ i grau 4.}$$

⁵ u_x i u_y indiquen les components x i y del desplaçament.

Per tal de familiaritzar-me amb el codi he elaborat una gràfica de convergència per diferents malles (i.e., diferents mides h dels elements) i diferents graus. Les forces \mathbf{b} s'han deduït per tal que la solució analítica sigui l'anterior, $u_x = \sin(x + y)$, $u_y = x^2 + y^2$. Tal i com es pot veure a continuació, les rectes tenen pendent aproximat $p + 1$, on p és el grau dels elements de la malla, fet que confirma la bona convergència en norma L_2 del mètode.

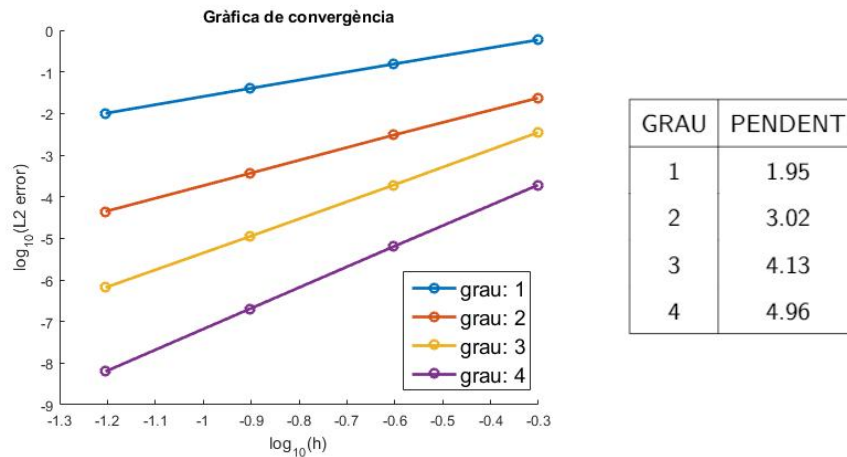


Figura 6: Gràfiques de convergència amb els pendents aproximats de les rectes.

3. Model de Phase-Field

El model de Phase-Field es basa en una formulació energètica, és a dir, que per a la modelització del problema s'assumeix que el crack es propaga a través del camí amb menys energia. Els cracks que s'hi generin es consideraran com bandes difuses que van avançant pel material.

Per modelitzar la transició entre els estats trencat i no-trencat del material s'introduirà la variable auxiliar d , anomenada variable Phase-Field. Aquesta varia entre els valors de 0 i 1, que indiquen el més baix i el més alt nivell de trencament del material respectivament, tal i com es pot veure a la Figura 7.

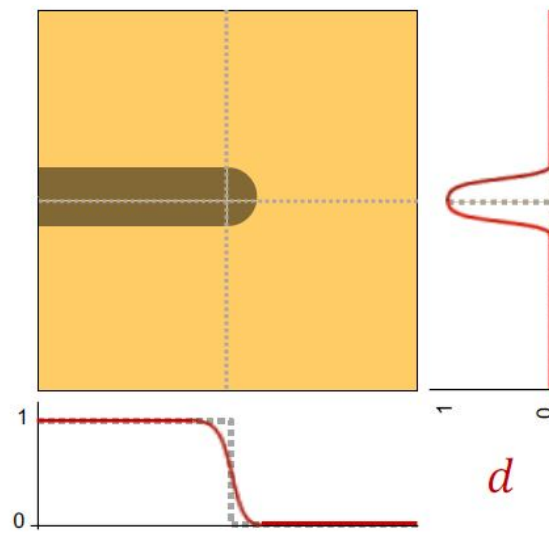


Figura 7: Variable Phase-Field que representa un crack sobre un peça $[0, 1] \times [0, 1]$.
Figura extreta de [2].

Segons la teoria de la fractura que es pot veure a [1], l'energia total d'un material en un domini Ω ve donada per

$$E(\mathbf{u}, d) = \int_{\Omega} (g(d) + \eta) \Psi_0(\varepsilon) dV + G_c \int_{\Omega} \left[\frac{d^2}{2l} + \frac{l}{2} |\nabla d|^2 \right] dV - \int_{\Gamma_N} \mathbf{t} \cdot \mathbf{u} ds, \quad (4)$$

on:

1. $\varepsilon(\mathbf{u})$ és el tensor de deformació.
2. G_c és la taxa d'alliberació d'energia crítica, un valor crític que, en assolir-se, permet a la fractura avançar.
3. Ψ_0 és la funció d'energia potencial deguda a la deformació de Ω .
4. l és una constant positiva que regula l'amplada de la fractura.

5. η és un paràmetre introduït per evitar una pèrdua de rigidesa total a les regions trencades. És un paràmetre purament numèric sense cap sentit físic, de l'ordre de 10^{-5} , per evitar sistemes singulars.
6. $g(d)$ modelitza la degradació de l'energia elàstica deguda al dany del material. Normalment, i en concret en el present treball, s'utilitza $g(d) = (1 - d)^2$.

Minimitzant (4), s'obté el següent sistema d'equacions no lineals acoblades, que se solucionarà per \mathbf{u} i d . El problema evolucionarà en augmentar el desplaçament o les càrregues imposades amb les condicions de contorn.

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}, d) = (1 - d)^2 \frac{\partial \Psi_0(\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \\ -l^2 \Delta d + d = \frac{2l}{G_c} (1 - d) \mathcal{H} \end{cases} \quad (\text{Equació Constitutiva}) \quad (5)$$

Per a poder seguir avançant en el model de Phase-Field, es necessita primer entendre dues equacions que s'utilitzaran per resoldre el sistema (5). Aquestes equacions es presenten a continuació.

3.1 Equació d'Elasticitat Lineal amb Dany

L'equació d'elasticitat lineal amb dany és una modificació de l'equació d'elasticitat lineal vista a la secció 2 d'aquest treball. Bàsicament, consisteix en afegir un terme d , que introdueix un dany en el material degut als efectes del desplaçament i pren valors a l'interval $[0, 1]$. S'afegeix com un terme multiplicant a l'equació constitutiva de la següent manera:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b} = 0 \\ \boldsymbol{\sigma} = (1 - d)^2 \mathcal{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \end{cases} \quad (\text{Equació Constitutiva}) \quad (6)$$

La forma feble de l'equació d'elasticitat lineal amb dany és molt similar a la d'elasticitat lineal. Simplement, s'hi afegeix el terme de dany multiplicant. Per tant, el problema en forma feble consisteix, doncs, en trobar $\mathbf{u} \in [H^1(\Omega)]^2$ tal que $\mathbf{u} = \mathbf{u}_D$ a la frontera de Dirichlet, Γ_D , i tal que

$$\int_{\Omega} (1 - d)^2 \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \cdot \mathcal{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \, d\Omega = \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} \mathbf{b} \, d\Omega \quad \forall \mathbf{v} \in [H^1(\Omega)]^2 \text{ tal que } \mathbf{v} = 0 \text{ a } \Gamma_D \quad (7)$$

Seguint els mateixos passos que per a l'equació d'elasticitat lineal s'obté la discretització per a aquesta equació, que és com la de l'equació anterior però afegint-hi el terme de dany multiplicant:

$$\mathbf{V}^T \left[\int_{\Omega} (1 - d)^2 [\mathbf{strainN}]^T \mathcal{C} [\mathbf{strainN}] \, d\Omega \right] \mathbf{U} = \mathbf{V}^T \left[\int_{\Omega} \rho [\mathbf{vecN}]^T \mathbf{b} \, d\Omega \right], \quad \forall \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{2n}$$

D'aquesta manera, la matriu i vector del sistema queden com abans, amb el terme de dany multiplicant:

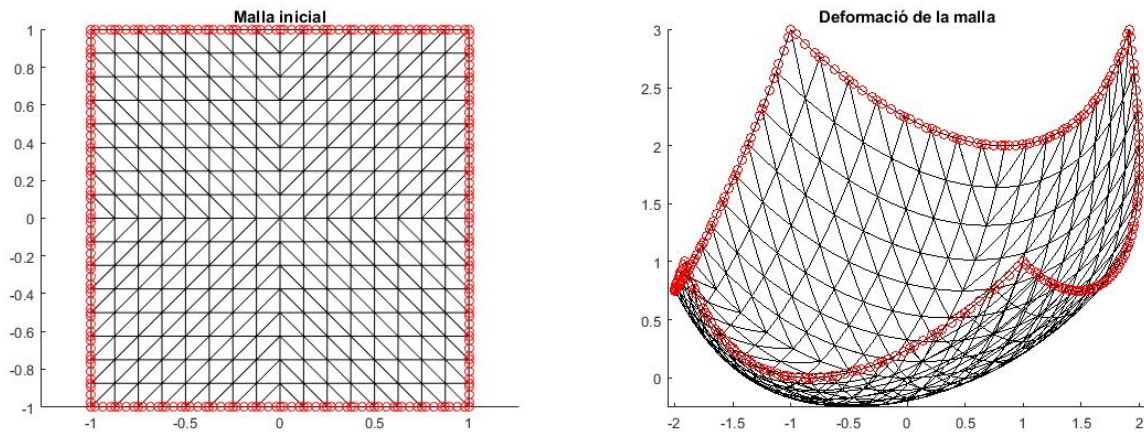
$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} [\mathbf{strainN}]^T \mathcal{C} [\mathbf{strainN}] (1 - d)^2 \, d\Omega \quad \mathbf{f} = \int_{\Omega} \rho [\mathbf{vecN}]^T \mathbf{b} \, d\Omega$$

Partint del codi de Matlab d'elasticitat lineal proporcionat per l'Alba Muixí, s'han fet una serie de canvis per tal d'incorporar el terme de dany. Aquest s'ha introduït dins el càlcul de les matrius elementals \mathbf{K}_e , a partir de la qual es calcula, mitjançant ensamblatge, la matriu de sistema \mathbf{K} . Per tal de fer-ho, el dany d ve donat en els punts d'integració de Gauss.

```

d = analyticalDamage(X,solution);
%Loop in elements
for i=1:nOfElements
    Te=T(i,:); %nodes in the element
    Xe=X(Te,:); %coordinates of the element nodes
    de = d(Te,:);
    [Ke,fe]=computeElementalMatrices(Xe,GaussWeights,N,Nxi,Neta,source,E,mu,rho,solution,de);
    Te2 = [Te, Te+nOfNodes];
    K(Te2,Te2)=K(Te2,Te2)+Ke; %assembly
    f(Te2) = f(Te2) + fe;
end
%
%Computation of elemental matrix and vector
function [Ke,fe]=computeElementalMatrices(Xe,GaussWeights,N,Nxi,Neta,source,E,mu,rho,solution,de)
nOfNodes = size(Xe,1);
Ke=zeros(2*nOfNodes);
fe=zeros(2*nOfNodes,1);
xe = Xe(:,1); ye = Xe(:,2); %x and y coordinates of the element nodes
dIP = N*de;
C = E/((1+nu)*(1-2*nu))*[1-nu, nu, 0; nu, 1-nu, 0; 0, 0, 1-2*nu];
dvolu = spdiags(GaussWeights.*detJ,0,nGauss,nGauss);
dvolu_d = spdiags(GaussWeights.*detJ.*((1-dIP).^2),0,nGauss,nGauss);
invJ11 = spdiags(J22./detJ,0,nGauss,nGauss);
invJ12 = spdiags(-J12./detJ,0,nGauss,nGauss);
invJ21 = spdiags(-J21./detJ,0,nGauss,nGauss);
invJ22 = spdiags(J11./detJ,0,nGauss,nGauss);
% xy-derivatives
Nx = invJ11*Nxi + invJ12*Neta;
Ny = invJ21*Nxi + invJ22*Neta;
Xg = N*Xe;
% fe = N*(dvolu*bodyForce(Xg,E,mu));
%Elemental matrices
Kxxe = Nx*(dvolu_d*Nx);
Kyye = Ny*(dvolu_d*Ny);
Kxye = Nx*(dvolu_d*Ny);
Kyx = Ny*(dvolu_d*Nx);
Ke=E/((1+nu)*(1-2*nu))*[(1-nu)*Kxxe+1/2*(1-2*nu)*Kyye,nu*Kxye+(1-2*nu)/2*Kyx;
nu*Kxye+(1-2*nu)/2*Kyx,(1-nu)*Kyye+1/2*(1-2*nu)*Kxxe];
b = source(N*Xe,E,mu,solution);
fe = rho*(N*(dvolu*b(:,1)); N*(dvolu*b(:,2)));
    
```

Figura 8: En vermell, canvis introduïts al codi de Matlab d'elasticitat lineal per tal d'introduir el dany d .



(a) Malla inicial quadrada amb elements triangulars. (b) Malla deformada després d'aplicar-li elasticitat lineal amb dany.

Figura 9: Deformació d'una malla quadrada a partir de la solució analítica $u_x = \sin(x + y)$, $u_y = x^2 + y^2$, dany analític $d = \frac{1}{2}(\sin(x + y) + 1)$ i grau 4.

D'igual manera que amb l'equació d'elasticitat lineal s'ha elaborat una gràfica de convergència per diferents malles i diferents graus. Per fer-ho, s'han hagut de deduir les forces \mathbf{b} per tal que la solució analítica fos la indicada (veure Figura 9). A continuació, s'hi mostra el resultat:

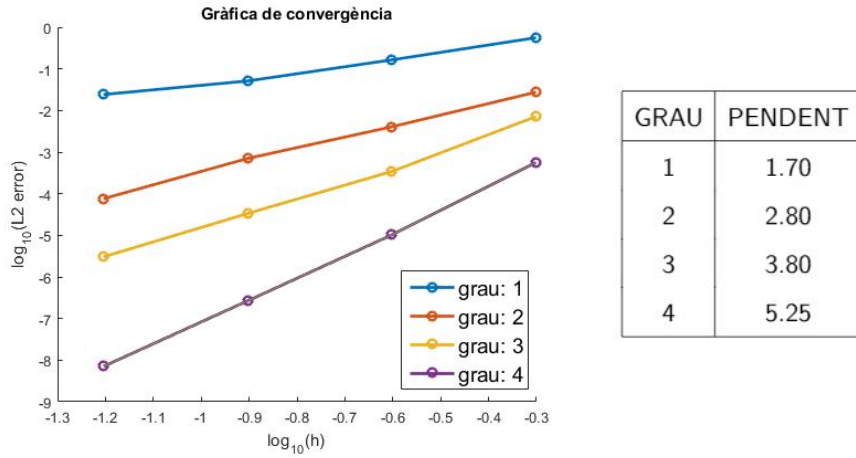


Figura 10: Gràfiques de convergència amb els pendents aproximats de les rectes.

3.2 Equació de Dany

L'equació que modelitza l'evolució del dany \mathbf{d} té la forma següent:

$$-I^2 \Delta \mathbf{d} + \mathbf{d} = \frac{2I}{G_c} (1 - \mathbf{d}) \mathcal{H} \quad (8)$$

on \mathcal{H} és un funció que depèn del desplaçament \mathbf{u} , donada per $\mathcal{H} = \max_{\tau \in [0, t]} \Psi_0$, on Ψ_0 és la funció d'energia potencial deguda a la deformació del domini Ω . L'equació es resol amb condicions de contorn de Neumann homogènies a tota la vora.

La forma feble de l'equació de dany és similar a la de l'equació de Laplace, amb alguns termes addicionals. El problema consisteix en trobar $\mathbf{d} \in H^1(\Omega)$ tal que

$$\int_{\Omega} \left(\frac{G_c}{I} + 2\mathcal{H} \right) \mathbf{d} \mathbf{v} \, d\Omega + \int_{\Omega} G_c I \nabla \mathbf{d} \nabla \mathbf{v} \, d\Omega = \int_{\Omega} 2\mathcal{H} \mathbf{v} \, d\Omega \quad \forall \mathbf{v} \in H^1(\Omega) \text{ tal que } \mathbf{v} = 0 \text{ a } \Gamma_D \quad (9)$$

De manera semblant a com hem fet amb les altres equacions, la solució d s'aproxima ara com $\mathbf{d} = \sum_{i=1}^n d_i N_i$, amb unes funcions d'aproximació d'elements finits $\{N_i\}_{i=1}^n$. De la mateixa manera que abans, substituint a la forma feble i prenent les funcions $v \in \langle N_i \rangle$ s'obté un sistema lineal pels valors nodals de la forma $\mathbf{K} \mathbf{d} = \mathbf{f}$. En efecte, s'obté

$$\sum_{i=1}^n \left[\int_{\Omega} \left(\frac{G_c}{I} + 2\mathcal{H} \right) N_i N_j + G_c I \nabla N_i \cdot \nabla N_j \, d\Omega \right] d_i = \int_{\Omega} 2\mathcal{H} N_j \, d\Omega$$

d'on la matriu i vector del sistema queden:

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} \left(\frac{G_c}{I} + 2\mathcal{H} \right) N_i N_j + G_c I \nabla N_i \cdot \nabla N_j \, d\Omega, \quad \mathbf{f} = \int_{\Omega} 2\mathcal{H} N_j \, d\Omega$$

A partir d'un codi de Laplace és senzill fer les modificacions necessàries per a que solucioni l'equació de dany. El codi utilitza, una vegada més, una malla quadrada amb elements triangulars creada amb el programa EZ4U. Es calculen les matrius \mathbf{K} i \mathbf{f} utilitzant un element de referència triangular i ensamblatge de matrius elementals, i finalment es resol el sistema $\mathbf{Kd} = \mathbf{f}$. Per construir el següent exemple s'ha pres la següent definició de \mathcal{H} :

$$\mathcal{H} = \begin{cases} 25 & \text{si } x < 0.5, 0.3 < y < 0.6 \\ 0 & \text{altrament} \end{cases} \quad (10)$$

La solució és l'esperada, doncs \mathcal{H} actua com a terme font en l'equació (que és de reacció-difusió).

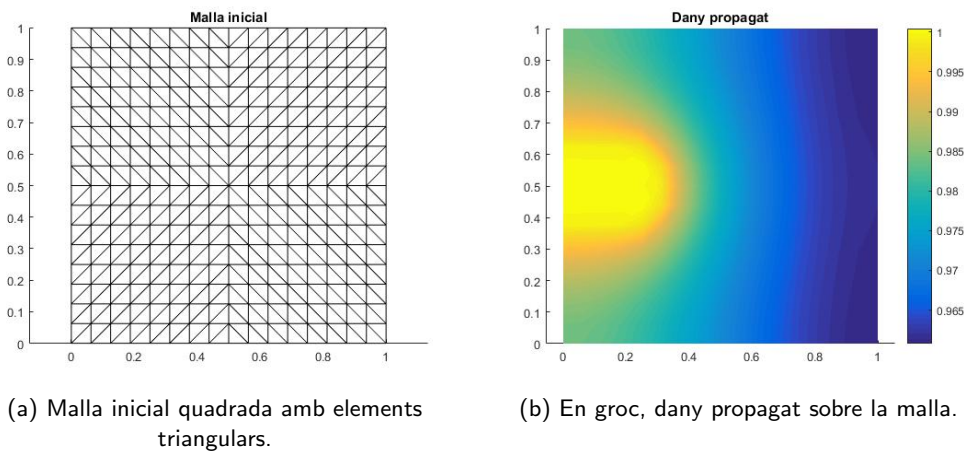


Figura 11: Dany propagat sobre una malla quadrada amb elements triangulars a partir de la \mathcal{H} analítica descrita prèviament.

Com amb les equacions anteriors, s'han fet gràfiques per a comprovar la convergència del mètode per a diferents malles i graus. El test s'ha dissenyat prenent \mathcal{H} tal que es compleixi (8) amb solució analítica $\mathbf{d} = \frac{1}{3}(\sin(3x + y) + 1)$ i condicions de contorn de Dirichlet a tota la vora del domini. Els resultats es mostren a continuació:

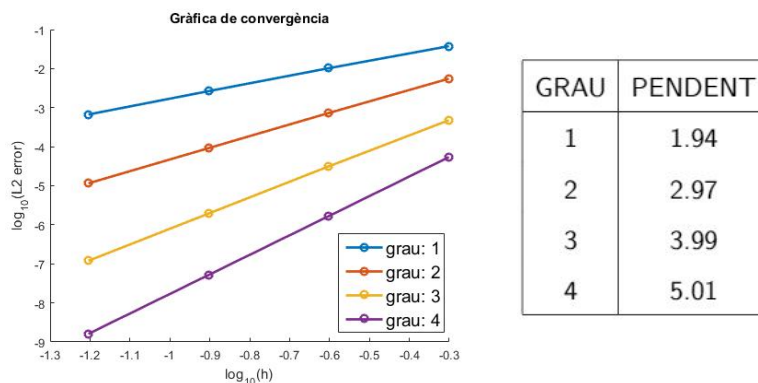


Figura 12: Gràfiques de convergència amb els pendents aproximats de les rectes.

3.3 Model Phase-Field

Sobre una peça d'un cert material es fa una discretització en Elements Finitis, en la qual s'aplica una força en uns certs nodes per provocar una ruptura. Numèricament, el que es considerarà són el que s'anomenen increments de càrrega, és a dir, uns increments molt petits de desplaçament de certs nodes de la peça. Un exemple podria ser la Figura 13, on es pot veure una peça en forma de L, discretitzada amb una malla d'elements triangulars. La peça es manté subjecte pels nodes marcats de la part inferior esquerra i se li aplica un desplaçament vertical cap a dalt en el node situat en el punt (220, 0). Com es pot observar, s'ha fet una discretització més fina en la zona de la peça per on es creu que es propagarà el crack.

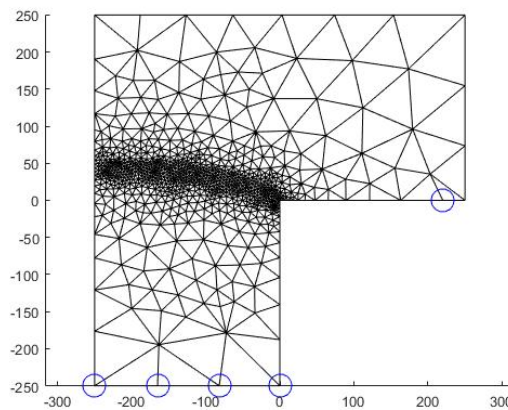


Figura 13: Exemple de peça discretitzada amb una malla d'elements triangulars.

Per a resoldre el problema es farà un bucle en increments de càrrega (cal que aquests siguin petits per tal de garantir la convergència de les solucions). Per a cadascun dels increments de càrrega n se solucionarà el sistema (5). Així, l'esquema a seguir serà el següent:

$$\left[\begin{array}{l}
 \text{Per a } n = 0, 1, \dots, N : \\
 \text{Busquem } \mathbf{u}^{n+1}, d^{n+1} \text{ tal que:} \\
 \left\{ \begin{array}{l}
 \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}^{n+1}, d^{n+1}) = 0 + \text{Equació Constitutiva} + \text{CC (que depenen de la càrrega } n) \\
 -l^2 \Delta d^{n+1} + d^{n+1} = \frac{2l}{G_c} (1 - d^{n+1}) \mathcal{H} + \text{CC de Neumann homogènies}
 \end{array} \right. \\
 \text{On } \mathcal{H} = \max_{\tau \in [0, t]} \Psi_0(\varepsilon)
 \end{array} \right.$$

Per a solucionar el sistema no lineal anterior es farà un bucle *Staggered*. Aquest bucle consisteix en solucionar la primera equació (amb l'equació constitutiva) per a una de les variables, \mathbf{u} , i utilitzar aquesta solució per a resoldre la segona equació per a l'altra variable, d . Es prendran com a condicions inicials $\mathbf{u}^0 = 0$ i $d^0 = 0$. L'esquema es mostra a continuació:

$$\begin{array}{l}
 \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}^n, d^n) = 0 \longrightarrow \mathbf{u}^{n+1} \\
 \mathcal{H}^{n+1} := \mathcal{H}(\mathbf{u}^{n+1}) \\
 -l^2 \Delta d^n + d^n = \frac{2l}{G_c} (1 - d^n) \mathcal{H}^{n+1} \longrightarrow d^{n+1}
 \end{array}$$

La primera equació és una equació d'elasticitat lineal amb dany, on $\mathbf{b} = 0$, mentre que la tercera equació és una equació de dany. La segona equació ens permet calcular \mathcal{H} als punts d'integració a partir de \mathbf{u} . Per fer-ho, simplement es fa el càlcul explicat a continuació:

$$\Psi_0(\varepsilon) = \frac{1}{2} \varepsilon : \mathbf{C} : \varepsilon$$

$$\mathcal{H} := \max_{0 \leq t \leq T} \Psi_0(\varepsilon)$$

3.4 Resultats

A partir dels codis de les equacions explicades és fàcil crear el programa principal pel model de Phase-Field. Per fer-ho, s'ha optat pels següents valors dels paràmetres materials: $E = 25.8423 \text{ kN/mm}^2$, $\nu = 0.18$. Per a la realització del bucle Staggered, s'ha optat per la següent condició d'acabament: `errorElasticitat < tol AND errorDany < tol`, on s'ha optat per $tol = 10^{-6}$. `errorElasticitat` i `errorDany` són les normes euclidianes entre les solucions de dues iteracions consecutives. S'ha escollit que els passos de càrrega fossin $5 \cdot 10^{-4} \text{ mm}$, començant aquests en $5 \cdot 10^{-4} \text{ mm}$ i avançant fins a 0.4 mm . Un cop configurats aquests paràmetres s'han realitzat diverses proves variant els paràmetres que defineixen el crack: G_c i l .

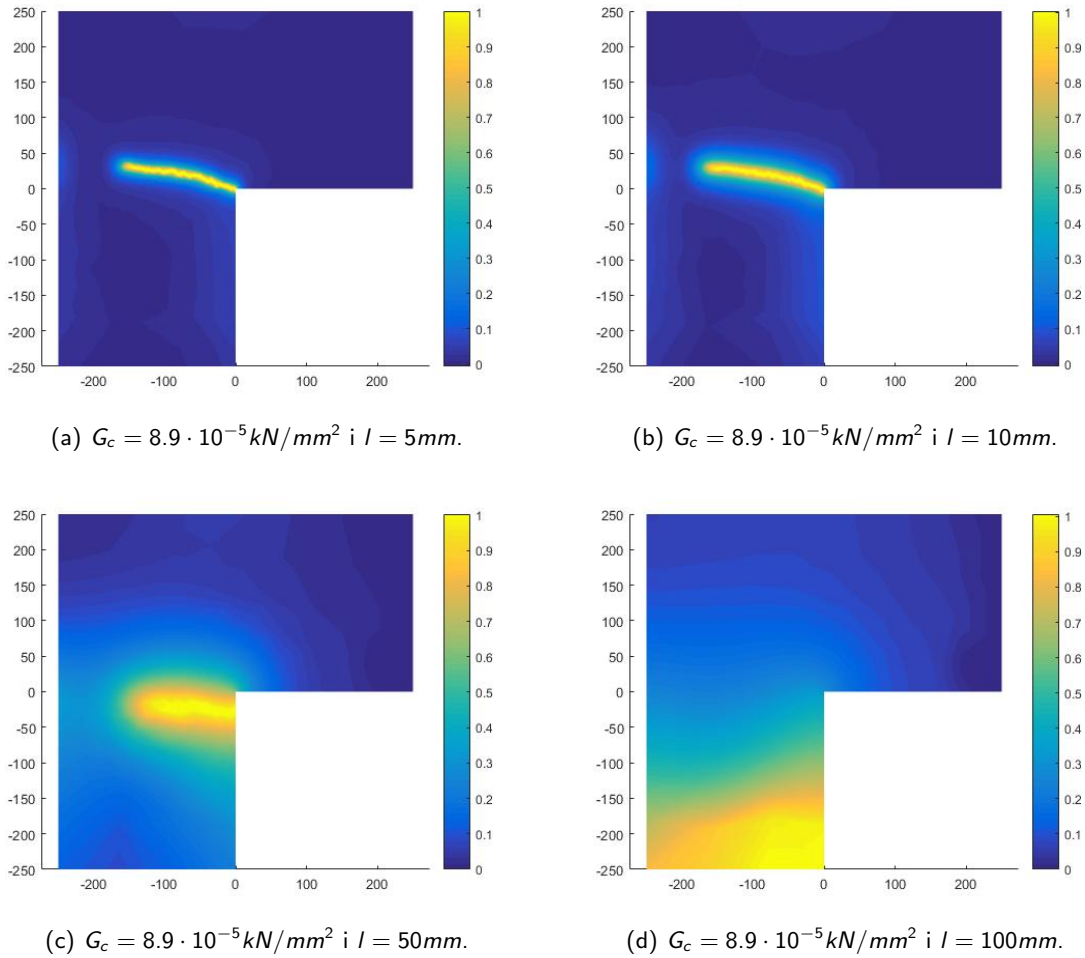


Figura 14: En groc, cracks generats amb el model de Phase-Field variant l .

Com es pot observar en els resultats de la Figura 14, el paràmetre l controla l'amplada del crack, però si aquest augmenta o disminueix molt les solucions que s'obtenen perden el sentit físic. Aquest fet és degut a que l és un dels termes que multipliquen al coeficient de difusió de l'equació de dany, és a dir, que en augmentar l augmenta la difusió. És per aquest motiu que per a valors de l molt grans la peça apareix molt més trencada, fins i tot en llocs on aparentment no ho hauria d'estar, com a la Figura 14 (d).

Per acabar d'entendre bé els resultats, per a cadascun dels casos anteriors s'han realitzat gràfiques Força - Desplaçament i #iteracions Staggered - Desplaçaments (veure Figura 15). La primera gràfica representa la força que s'hauria d'aplicar al material per tal d'aconseguir un cert desplaçament u . Com es veu, les corbes segueixen un comportament lineal fins que arriben a un cert punt (aproximadament 0.25mm), el punt on es produeix el trencament de la peça, i a partir d'allà decreixen. Aquest fet és comprensible, ja que quan el material s'ha trencat la força necessària per seguir produint un desplaçament és menor que quan aquest encara no havia patit cap dany.

La segona gràfica representa el nombre d'iteracions del bucle Staggered per a cada desplaçament imposat. Com es pot veure, fins que no s'arriba al punt de trencament, el nombre d'iteracions és molt baix. En assolir-se aquest punt es necessita un gran nombre d'iteracions per tal que el model convergeixi i després aquest torna a decaure, però no tant com quan la peça no estava trencada.

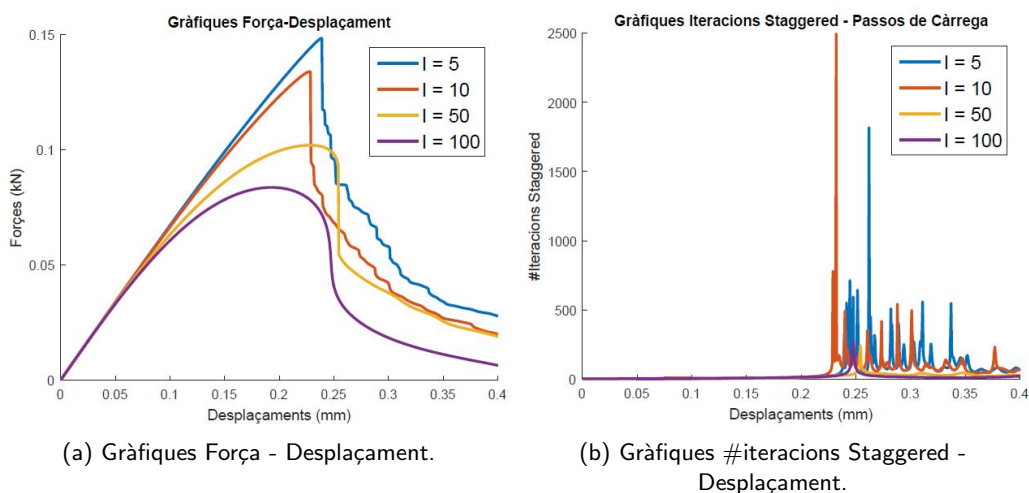


Figura 15: Gràfiques amb G_c constant i variant l .

El següent pas és deixar fixe l i variar G_c per veure com afecta al resultat final. Com es pot veure a la Figura 16, la variable G_c controla quant tarda en trencar-se la peça, tal i com s'esperava. Com més gran és aquesta variable, més tard es trenca la peça i, per tant, el resultat final es veu menys danyat. Pel contrari, com més petita és, més trencat es veu el resultat final.

D'igual manera que amb els exemples anteriors, s'han realitzat gràfiques Força - Desplaçament i #iteracions Staggered - Desplaçaments (veure Figura 17). Com es pot veure, per a $G_c = 8.9 \cdot 10^{-4} \text{kN/mm}^2$ la gràfica Força - Desplaçament és una recta, ja que el dany no ha arribat a prendre valor 1. Per la resta dels valors de G_c es pot veure que a mesura que aquest es disminueix, el trencament de la peça es produeix abans.

En quant a la gràfica #iteracions Staggered - Desplaçaments, podem veure com abans que es produeixi el dany el nombre d'iteracions Staggered és molt baix i hi ha un pic en el moment del trencament, tal i com s'ha vist a la Figura 15. En aquest cas, per a $G_c = 8.9 \cdot 10^{-4} \text{kN/mm}^2$ pràcticament no es distingeix cap corba, ja que al no produir-se trencament el nombre d'iteracions Staggered és tan baix que la corba és quasi una recta propera al zero. Per a la resta de valors de G_c , es pot veure que com més baix és aquest, més aviat es produeix el pic de les iteracions i, per tant, el trencament de la peça.

Models computacionals de fractura fràgil

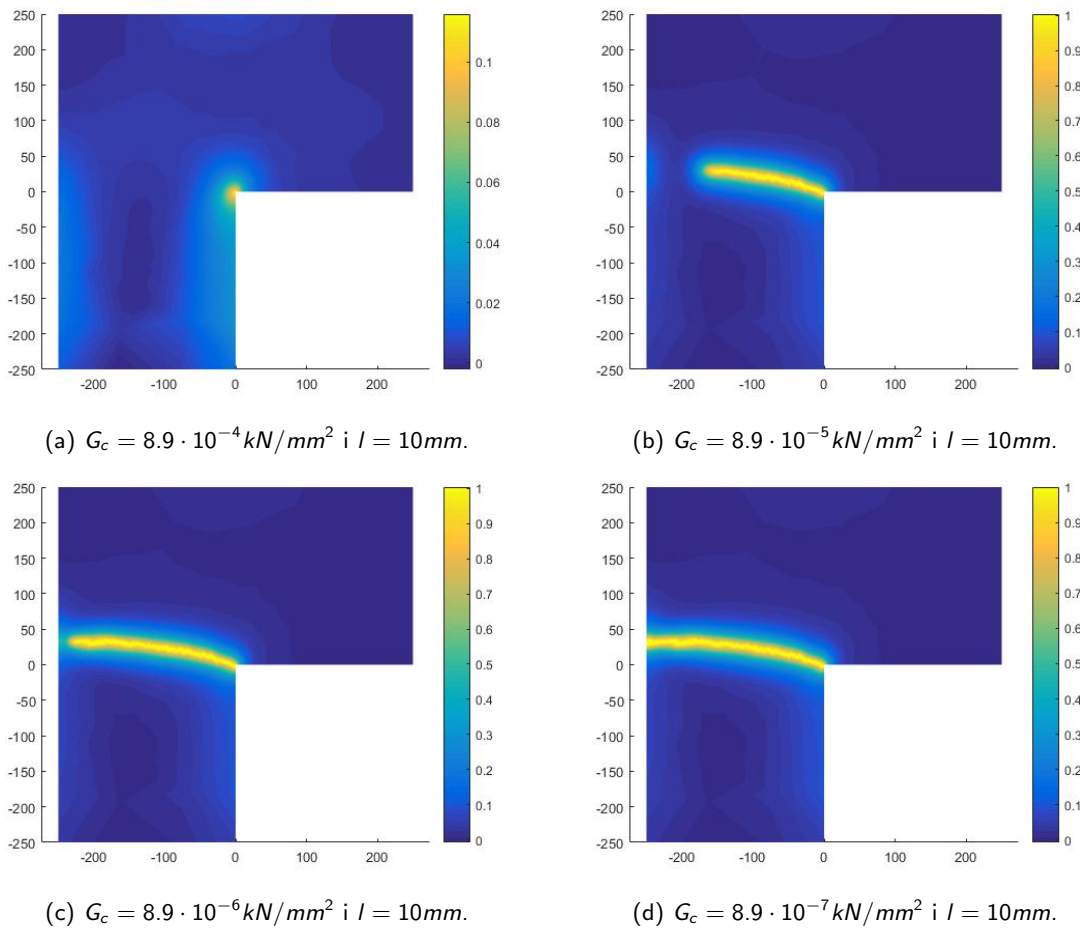


Figura 16: Cracks generats amb el model de Phase-Field variant G_c .

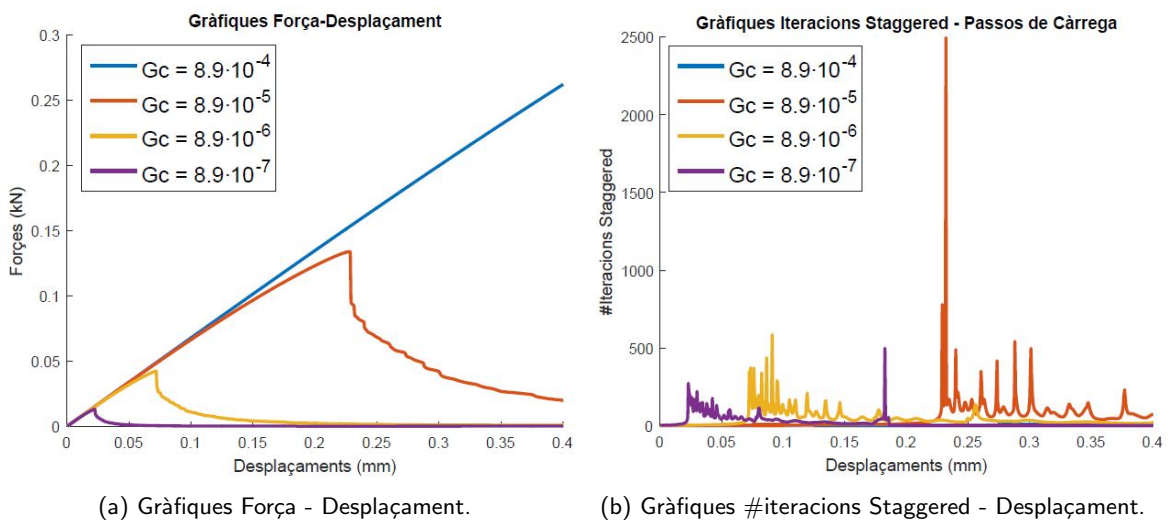


Figura 17: Gràfiques amb l constant i variant G_c .

4. Model de Gradient-Damage

De la mateixa manera que a Phase-Field, el model de Gradient-Damage també segueix una formulació energètica. La relació tensió-deformació per a aquesta formulació es deriva de l'aplicació del concepte de tensió efectiva al comportament lineal del material elàstic. Aquesta és

$$\boldsymbol{\sigma} = (1 - d)\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}$$

on $\boldsymbol{\sigma}$ és el tensor de tensió de Cauchy i $\boldsymbol{\varepsilon}$ el d'estrès lineal. \mathbf{C} és un tensor de 4t ordre. De manera similar a Phase-Field, s'introdueix la variable de dany d , que varia entre 0 i 1. Aquesta s'interpreta com un factor de reducció de rigidesa: quan val 0 el material conserva la màxima rigidesa, mentre que pel valor 1 la rigidesa ha desaparegut i el material no suporta més tensió, i.e., està trencat.

L'evolució del dany a la peça ve determinada per les deformacions. Per això, s'introdueix una variable κ , que representa la deformació més severa que ha experimentat el material des del principi de l'experiment i que actua com una espècie de frontera per sota de la qual no s'hi produeix dany. La variable de dany d és una funció d'aquesta variable històrica: $\mathbf{d} = \mathbf{d}(\kappa)$.

En el model convencional, la variable κ està relacionada amb una mesura de la deformació local, $\mathbf{e}(\boldsymbol{\varepsilon})$, per

$$\tilde{\mathbf{e}}(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} g(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{e}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) d\Omega \quad (11)$$

on \mathbf{x} és un punt material, $g(\boldsymbol{\xi})$ és una funció de pes i $\boldsymbol{\xi}$ és una variable d'integració. Utilitzant les següents relacions de Kuhn-Tucker

$$\dot{\kappa} \geq 0, \quad \tilde{\mathbf{e}} - \kappa \leq 0, \quad \dot{\kappa}(\tilde{\mathbf{e}} - \kappa) = 0$$

i un valor inicial κ_0 , es pot deduir (segons es pot veure a [3]-[4]) la forma diferencial de (11):

$$\tilde{\mathbf{e}} - l^2 \Delta \tilde{\mathbf{e}} = \mathbf{e}$$

Aquest model conté dues relacions específiques pel material: la definició de tensió $\mathbf{e}(\boldsymbol{\varepsilon})$ i la llei d'evolució del dany $\mathbf{d}(\kappa)$. Aquesta última determina la forma global de la corba d'estovament i el grau de fragilitat de la resposta. Hi ha moltes possibilitats per a la funció \mathbf{d} , però per a aquest treball s'ha decidit escollir la següent:

$$d_i(\kappa_i) = \begin{cases} 0 & \text{si } \kappa_i \leq \kappa_0 \\ 1 - \frac{\kappa_0}{\kappa_i} \left(1 - \alpha + \alpha \exp(-\beta(\kappa_i - \kappa_0)) \right) & \text{si } \kappa_i > \kappa_0 \end{cases}$$

on α i β són paràmetres materials. α controla la resistència residual del material i β controla la pendent "post-pic" de la branca d'estovament.

$$\lim_{\boldsymbol{\varepsilon} \rightarrow \infty} \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}) = (1 - \alpha)E\kappa_0, \quad \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}(\kappa_0) = -\beta E\kappa_0$$

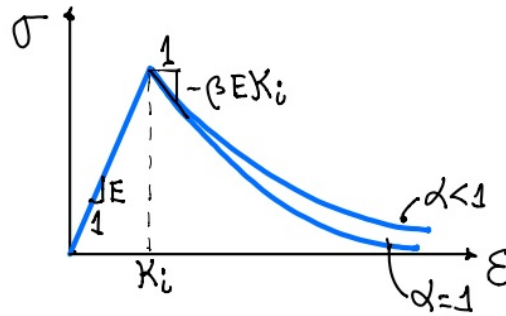


Figura 18: Exemple de corba d'estovament.
Figura extreta dels apunts del professor Antonio Rodríguez.

Aquesta definició de tensió mapeja l'estat de tensió tensorial en una variable escalar. Reflecteix els diferents efectes dels components de la tensió en el creixement del dany al ponderar aquestes components. Si les relacions constitutives es deriven dins el marc de la termodinàmica de processos irreversibles, l'evolució del dany generalment està relacionada amb la taxa d'alliberació d'energia associada a la variable

$$\mathbf{Y} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}$$

\mathbf{Y} depèn només del tensor de tensió $\boldsymbol{\varepsilon}$, per tant, pot considerar-se com una mesura de tensió equivalent que utilitza el mòdul elàstic per a ponderar les diferents components de la tensió. De fet, si es pren la tensió com a $\mathbf{e} = \mathbf{Y}$, la formulació del dany actual coincideix amb el model clàssic basat en la termodinàmica.

De manera similar que a Phase-Field, a continuació s'introduiran dues equacions necessàries per entendre la resolució del model.

4.1 Equació d'Equilibri

L'equació d'equilibri té la forma següent:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b} = 0 \\ \boldsymbol{\sigma} = (1 - d) \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \quad (\text{Equació Constitutiva}) \end{cases} \quad (12)$$

Com es pot observar, és molt similar a l'equació d'elasticitat lineal amb dany. L'única diferència que hi ha és el quadrat que desapareix en l'Equació Constitutiva.

Amb això, és clar que la forma feble per a aquest problema serà pràcticament igual a la d'elasticitat lineal amb dany. Simplement, es treu el quadrat del terme $(1 - d)$.

Per tant, el problema en forma feble consisteix, doncs, en trobar $\mathbf{u} \in [H^1(\Omega)]^2$ tal que $\mathbf{u} = \mathbf{u}_D$ a la frontera de Dirichlet, Γ_D , i tal que

$$\int_{\Omega} (1 - d) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \, d\Omega = \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} \mathbf{b} \, d\Omega \quad \forall \mathbf{v} \in [H^1(\Omega)]^2 \text{ tal que } \mathbf{v} = 0 \text{ a } \Gamma_D \quad (13)$$

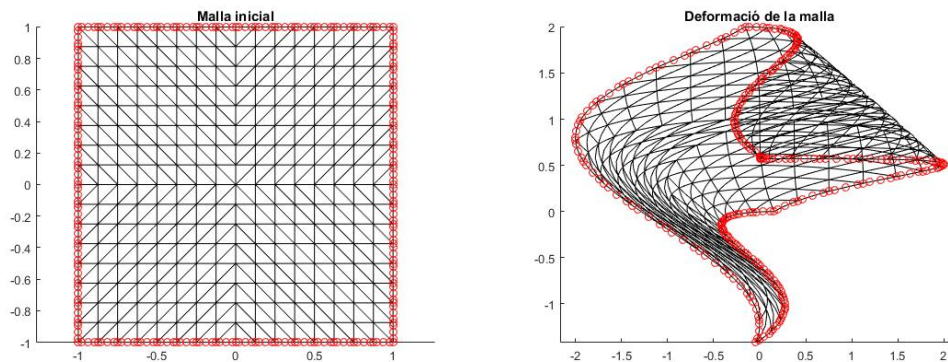
La discretització per a aquesta equació serà la mateixa que per a la d'elasticitat lineal amb dany, excepte per l'absència del quadrat:

$$\mathbf{V}^T \left[\int_{\Omega} (1-d) [\mathbf{strainN}]^T \mathbf{C} [\mathbf{strainN}] d\Omega \right] \mathbf{U} = \mathbf{V}^T \left[\int_{\Omega} \rho [\mathbf{vecN}]^T \mathbf{b} d\Omega \right], \quad \forall \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{2n}$$

D'aquesta manera, la matriu i vector del sistema queden:

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} [\mathbf{strainN}]^T \mathbf{C} [\mathbf{strainN}] (1-d) d\Omega \quad \mathbf{f} = \int_{\Omega} \rho [\mathbf{vecN}]^T \mathbf{b} d\Omega$$

Partint del codi de Matlab de l'equació d'elasticitat lineal amb dany usat a la primera part d'aquest treball és senzill modificar-lo per a resoldre l'equació d'equilibri que s'ha tractat en aquesta secció. Els resultats obtinguts es mostren a continuació.



(a) Malla inicial quadrada amb elements triangulars.

(b) Malla deformada després d'aplicar-li l'equació d'equilibri.

Figura 19: Deformació d'una malla quadrada a partir de la solució analítica $u_x = \sin(2x + 3y)$, $u_y = \cos(x + y)$, dany analític $d = \frac{1}{5}(\sin(x + y) + 1)$ i grau 4.

Per tal de comprovar que les modificacions realitzades a l'algoritme són correctes, s'han realitzat diversos tests amb gràfiques de convergència per a diferents malles. A continuació es mostra el resultat d'aquests tests amb la taula dels pendents.

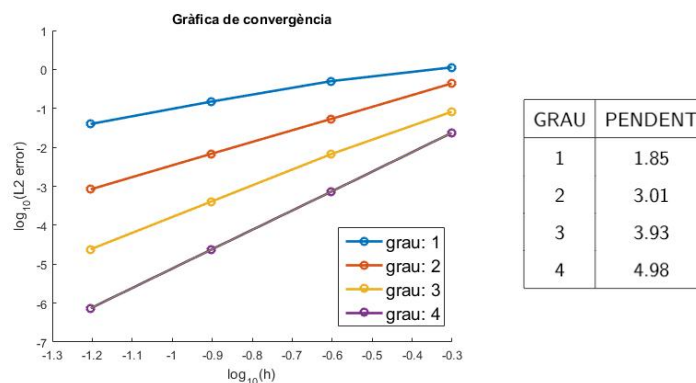


Figura 20: Gràfiques de convergència amb els pendents aproximats de les rectes.

4.2 Equació de Difusió

L'equació de difusió que es mostrarà a continuació és molt semblant a l'equació de dany de Phase-Field. Té la forma següent:

$$-l^2 \Delta \tilde{\mathbf{e}} + \tilde{\mathbf{e}} = \mathbf{e} \quad (14)$$

on l és el paràmetre que regula l'amplada de la fractura i e és una funció que depèn del desplaçament \mathbf{u} , donada per

$$\mathbf{e}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}$$

Modificant lleugerament la forma feble de l'equació de dany de Phase-Field obtenim la de l'equació de difusió de Gradient-Damage. Així, amb condicions de contorn de Neumann homogènies, el problema consisteix en trobar $\tilde{\mathbf{e}}(\mathbf{x}) \in H^1(\Omega)$ tal que

$$\int_{\Omega} \tilde{\mathbf{e}} \mathbf{v} \, d\Omega + \int_{\Omega} l^2 \nabla \tilde{\mathbf{e}} \nabla \mathbf{v} \, d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{e} \mathbf{v} \, d\Omega \quad \forall \mathbf{v} \in H^1(\Omega) \text{ tal que } \mathbf{v} = 0 \text{ a } \Gamma_D \quad (15)$$

La discretització per a l'equació de difusió serà, doncs, molt semblant a la de l'equació de dany de Phase-Field. En efecte, s'obté

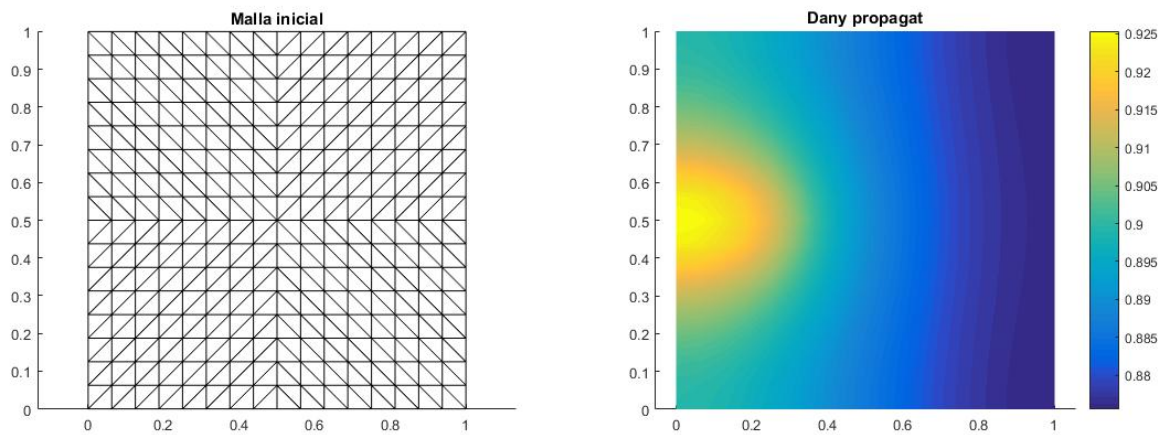
$$\sum_{i=1}^n \left[\int_{\Omega} N_i N_j + l^2 \nabla N_i \cdot \nabla N_j \, d\Omega \right] d_i = \int_{\Omega} e N_j \, d\Omega$$

d'on la matriu i vector del sistema queden:

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} N_i N_j + l^2 \nabla N_i \cdot \nabla N_j \, d\Omega, \quad \mathbf{f} = \int_{\Omega} e N_j \, d\Omega$$

De manera similar a com s'ha fet amb l'anterior equació, s'ha partit del codi de Matlab de l'equació de dany de Phase-Field per a solucionar l'equació de difusió de Gradient-Damage. Prenent e la mateixa funció que \mathcal{H} a (10), el resultat es mostra a la Figura (21).

De la mateixa manera que s'ha fet amb l'equació de dany de Phase-Field, s'ha construït un test per comprovar que el mètode està ben programat. El resultat es pot veure a la Figura (22).



(a) Malla inicial quadrada amb elements triangulars.

(b) En groc, dany propagat sobre la malla.

Figura 21: Dany propagat sobre una malla quadrada amb elements triangulars a partir de la e analítica descrita prèviament.

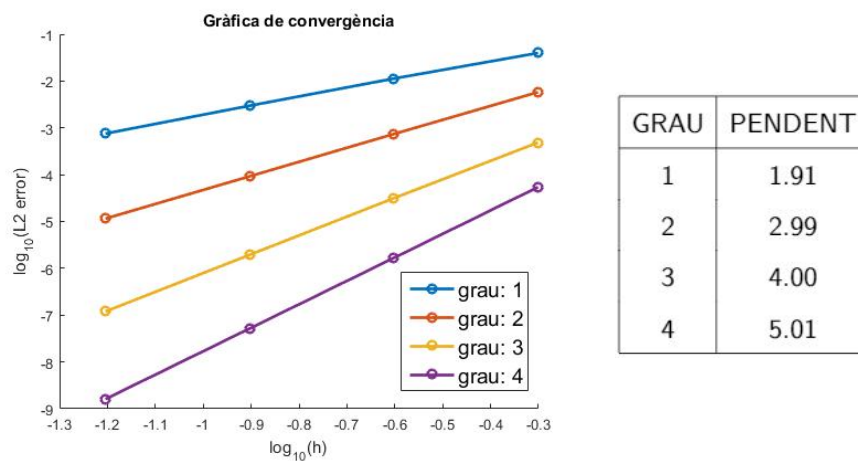


Figura 22: Gràfiques de convergència amb els pendents aproximats de les rectes.

4.3 Model Gradient-Damage

Amb tot el que s'ha explicat, el model de Gradient-Damage es pot resoldre seguint el següent esquema:

1. Resolució de l'equació d'equilibri amb l'equació constitutiva:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \\ \boldsymbol{\sigma} = (1 - d)\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \end{cases}$$

2. Càlcul de la funció e :

$$e(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}$$

3. Resolució de l'equació de difusió:

$$\tilde{\mathbf{e}} - l^2 \Delta \tilde{\mathbf{e}} = \mathbf{e}$$

4. Càlcul de la variable històrica κ :

$$\kappa := \max_{0 \leq t \leq T} \tilde{\mathbf{e}}$$

5. Càlcul del dany \mathbf{d} :

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}(\kappa)$$

Tot i que la forma estàndard de resoldre aquest problema és mitjançant el mètode de Newton-Raphson, en aquest treball s'ha optat per resoldre-ho fent un bucle Staggered per fer una millor analogia amb el model de Phase-Field. Així doncs, fent servir la mateixa malla que a Phase-Field, es consideren uns increments de càrrega i es resol un bucle Staggered similar al del model anterior, amb les mateixes condicions d'acabament.

4.4 Resultats

Utilitzant els codis explicats a les seccions 4.1 i 4.2 s'ha elaborat el codi que calcula el dany d'una peça a partir del model de Gradient-Damage. S'ha fet servir la mateixa malla que per a Phase-Field, els mateixos valors dels paràmetres, $E = 25.8423 \text{ kN/mm}^2$, $\nu = 0.18$, i tolerància per sortir del bucle Staggered $tol = 10^{-6}$. S'ha escollit $5 \cdot 10^{-4} \text{ mm}$ per als increments de càrrega, començant aquests en $5 \cdot 10^{-4} \text{ mm}$ i avançant fins a 5 mm . De la mateixa manera que amb Phase-Field, s'ha decidit fer experiments amb la resta de les variables per veure com aquestes afecten al resultat. Aquestes variables són α , β , κ_0 i l .

Primerament, s'ha fet un anàlisi del crack per a diferents valors de la variable l , amb $\alpha = 0.99$, $\beta = 200$ i $\kappa_0 = 10^{-4}$. Com es pot veure a partir de la Figura 23, la variable l controla l'amplada del crack, de manera semblant a com passava amb Phase-Field. També es pot observar que per a valors molt petits de l (per exemple, $l = 2 \text{ mm}$), el resultat obtingut comença a perdre sentit físic, ja que hi comença a aparèixer un zigzagueig. Per a valors grans de l , el resultat tampoc té cap mena de sentit físic, tal i com es pot veure a la Figura 23 (d).

A l'igual que amb el model de Phase-Field, s'han fet gràfiques Força - Desplaçament i #iteracions Staggered - Desplaçament per tal d'acabar d'entendre els resultats. Per a $l = 100 \text{ mm}$ la gràfica de Força - Desplaçament és una recta, fet que indica que no hi ha hagut trencament a la peça. Cal recordar, però, que per a aquest valor de l el resultat no tenia sentit físic. Per als altres valors de l es pot veure com, a mesura que aquesta augmenta, més tarda la peça en trencar-se.

Les gràfiques #iteracions Staggered - Desplaçament no aporten tanta informació com en el model de Phase-Field. Es pot veure que els primers pics en el nombre d'iteracions coincideix amb el moment de trencament de la peça però, contràriament a com passava amb el model de Phase-Field, les oscil·lacions en el nombre d'iteracions perduren un cop la peça s'ha trencat. També es pot observar que com més petit és el valor de l , més iteracions Staggered es fan en mitjana.

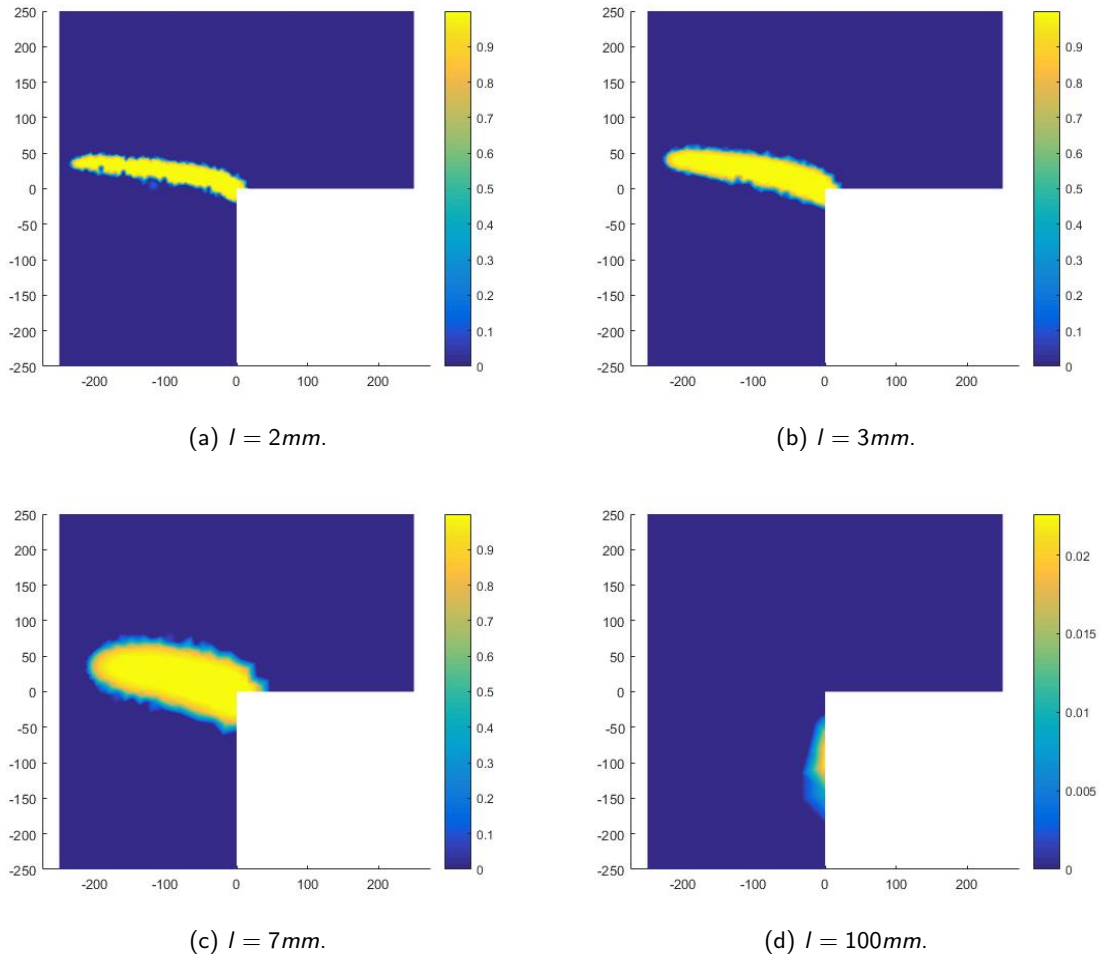


Figura 23: En groc, cracks generats amb el model de Gradient-Damage variant l .

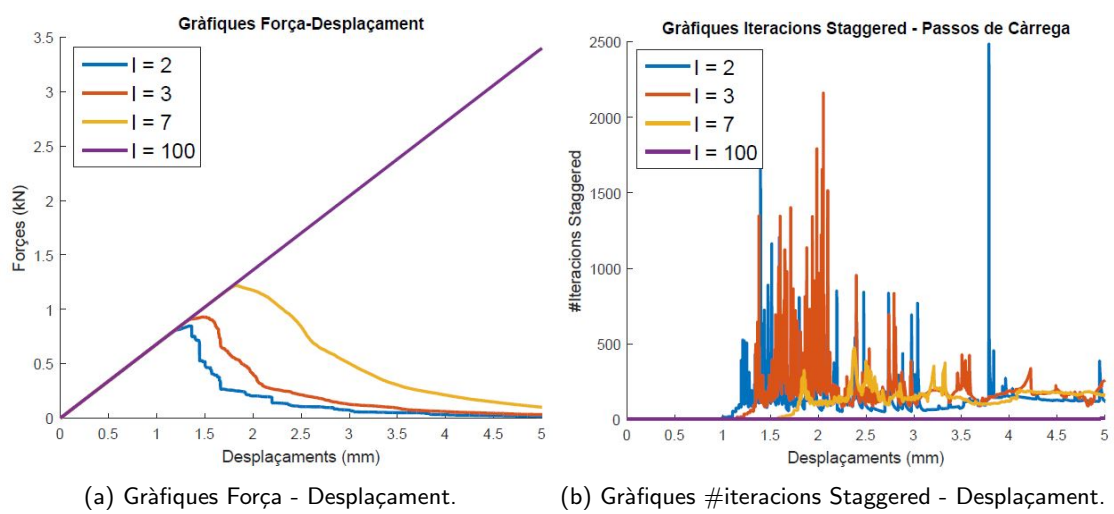


Figura 24: Gràfiques variant l .

La propera variable que s'estudiarà és κ_0 . Per a l'estudi es prendrà $\alpha = 0.99$, $\beta = 200$ i $l = 3mm$.

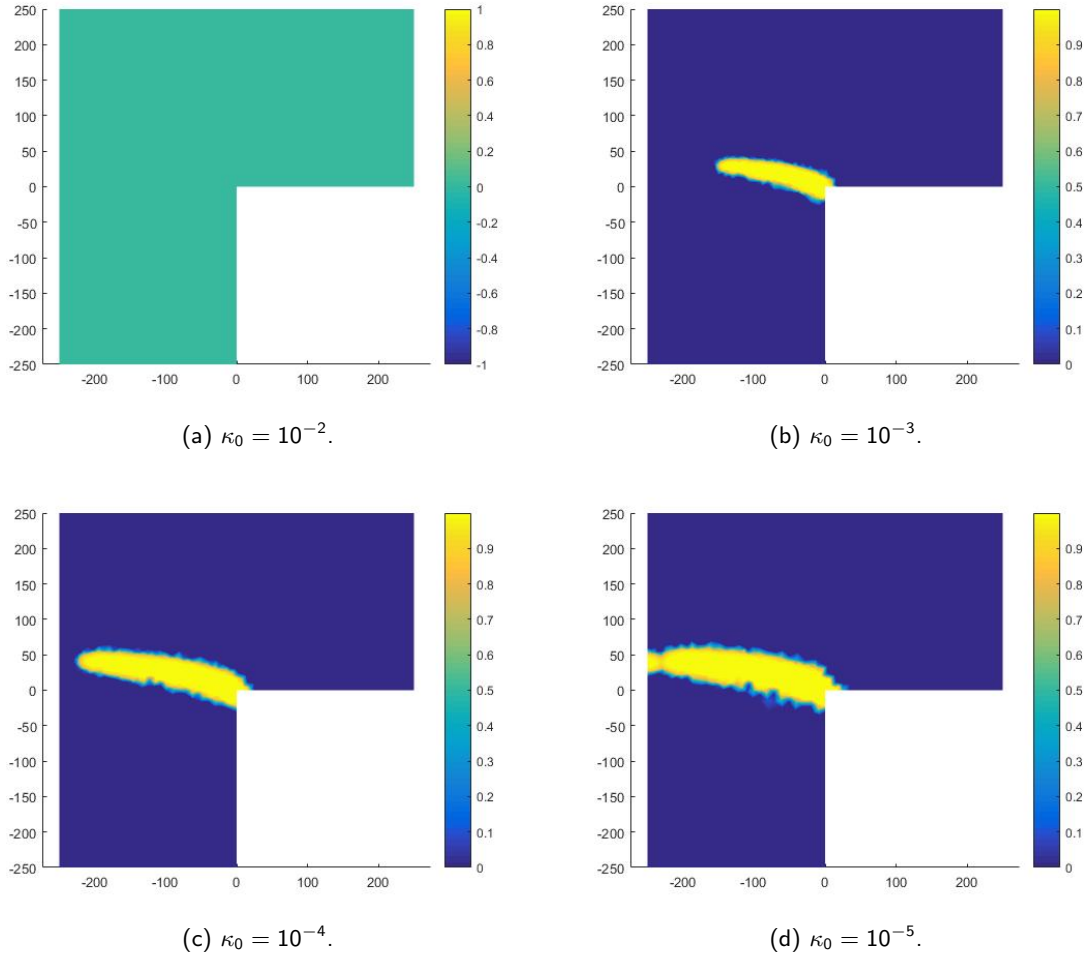


Figura 25: En groc, cracks generats amb el model de Gradient-Damage variant κ_0 .

A partir de la Figura 25 es pot veure que la variable κ_0 controla el moment en el que es trenca la peça. Per a valors alts de κ_0 la peça tarda més a trencar-se o, fins i tot, no s'arriba a trencar, tal i com passa a (a). Com més baix és aquest valor, més aviat es produeix el dany inicial i, per tant, més avançat es veu el crack en el resultat final.

Les gràfiques Força - Desplaçament són semblants a les obtingudes fent variar l . Per a $\kappa_0 = 10^{-2}$, com que encara no hi ha hagut trencament de la peça, s'obté una recta. Per als altres valors de κ_0 es pot observar com a mesura que aquesta disminueix, el crack es produeix abans.

Les gràfiques #iteracions Staggered - Desplaçament, a l'igual que ha passat fent variar l , no aporten molta informació. Es veu que el primer dels pics apareix quan la peça es trenca, però el nombre d'iteracions Staggered no sembla que segueixi cap mena de patró a l'augmentar o disminuir κ_0 . També es veu com el nombre d'iteracions de $\kappa_0 = 10^{-2}$ és molt petit, degut a que la peça no s'ha arribat a trencar.

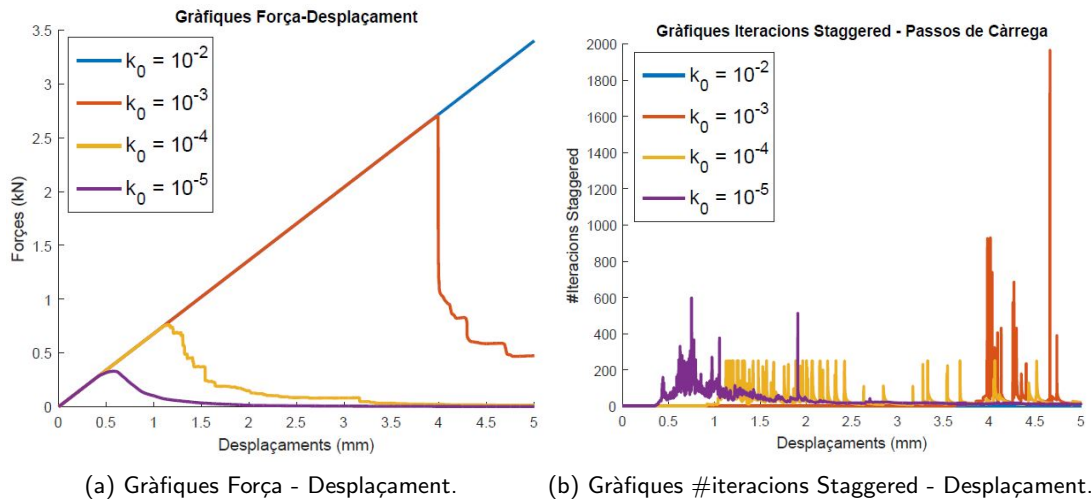


Figura 26: Gràfiques variant κ_0 .

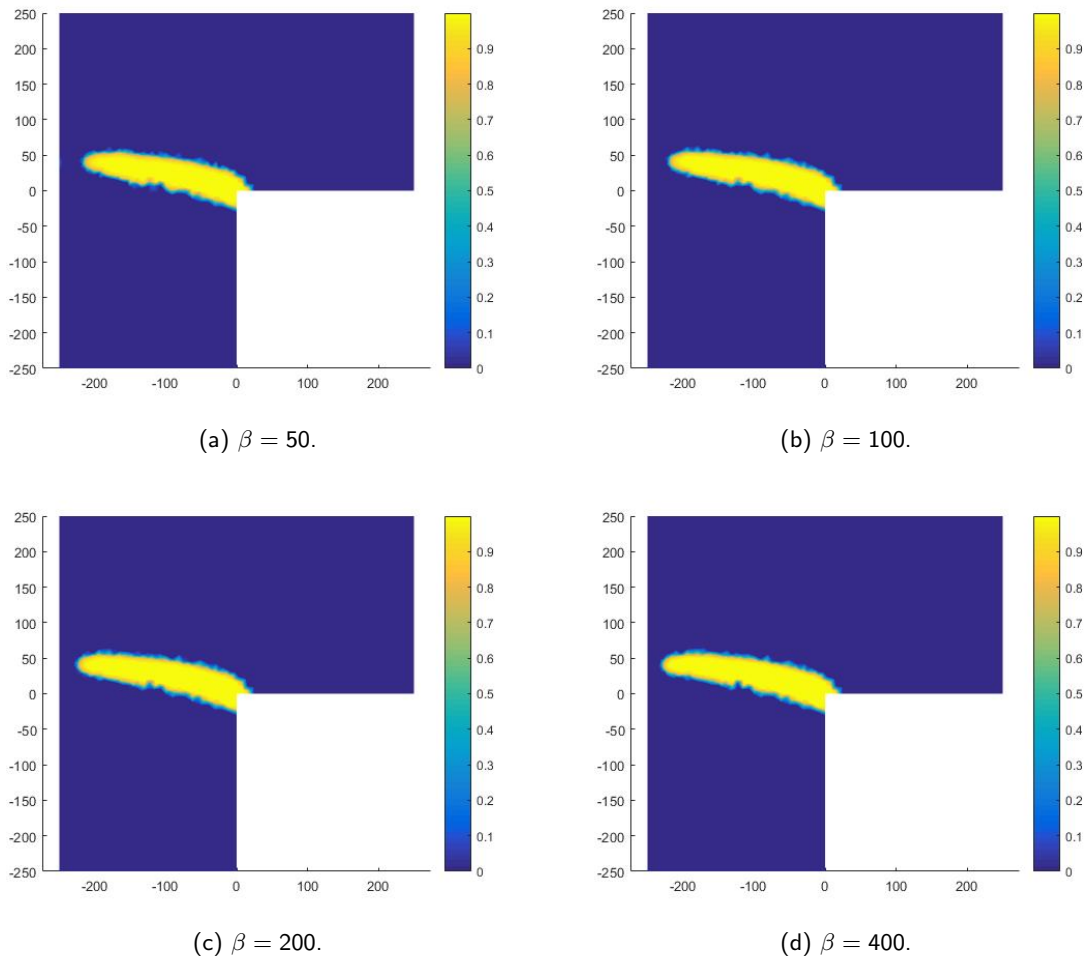


Figura 27: En groc, cracks generats amb el model de Gradient-Damage variant β .

La propera variable que s'estudiarà és β . Per a l'estudi es prendrà $\alpha = 0.99$, $\kappa_0 = 10^{-4}$ i $l = 3mm$. A la Figura 27 es poden veure diferents cracks al variar el valor de β . A partir d'aquestes simulacions, però, no es pot apreciar bé quin és l'afecte d'aquest paràmetre en el resultat final.

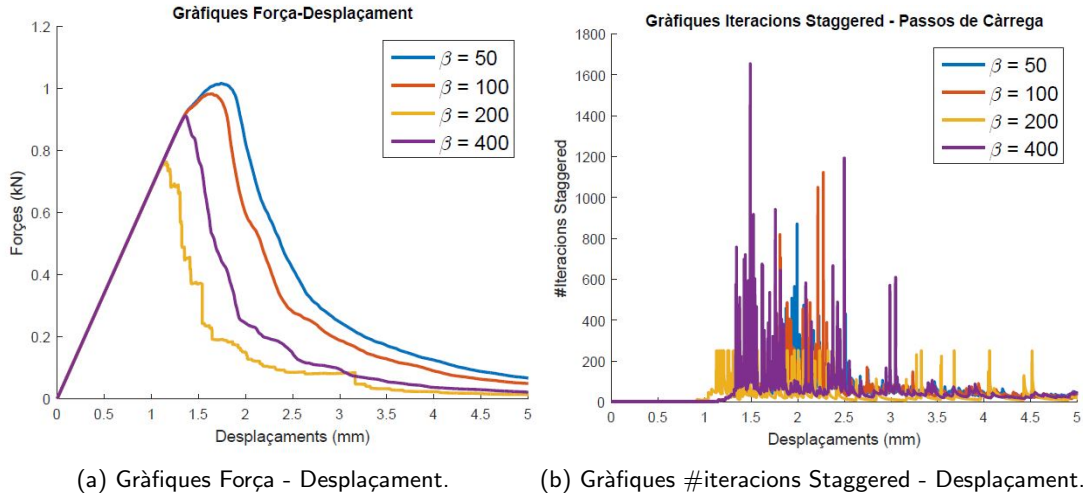


Figura 28: Gràfiques variant β .

Les gràfiques de la Figura 28 tampoc sembla que aportin més informació sobre el comportament del crack al variar β .

Per últim, s'ha estudiat el comportament del paràmetre α . Per fer-ho, s'han pres $\beta = 200$, $\kappa_0 = 10^{-4}$ i $l = 3mm$ com a valors de les altres variables. A la Figura 29 es poden veure els resultats dels cracks generats variant α . Com es pot observar, per valors petits d'aquest paràmetre apareix un trencament a la zona de l'esquerra de la peça, segurament degut a esforços de compressió. A mesura que α s'apropa al valor de 0.99 aquest crack es va fent cada cop més petit fins que arriba a desaparèixer.

A la Figura 30 s'hi troben les gràfiques Força - Desplaçament i #iteracions Staggered - Desplaçament obtingudes al variar α . Al contrari que al variar β , aquestes sí que aporten una mica d'informació. Primerament, a la de Força - Desplaçament es pot observar com a mesura que s'incrementa α la força necessària per trencar el material és cada vegada menor i com aquest es trenca cada cop més aviat. De la segona gràfica no se'n pot extreure tanta informació. Les oscil·lacions en el nombre d'iteracions comencen quan la peça es trenca, però no sembla que segueixin cap mena de patró.

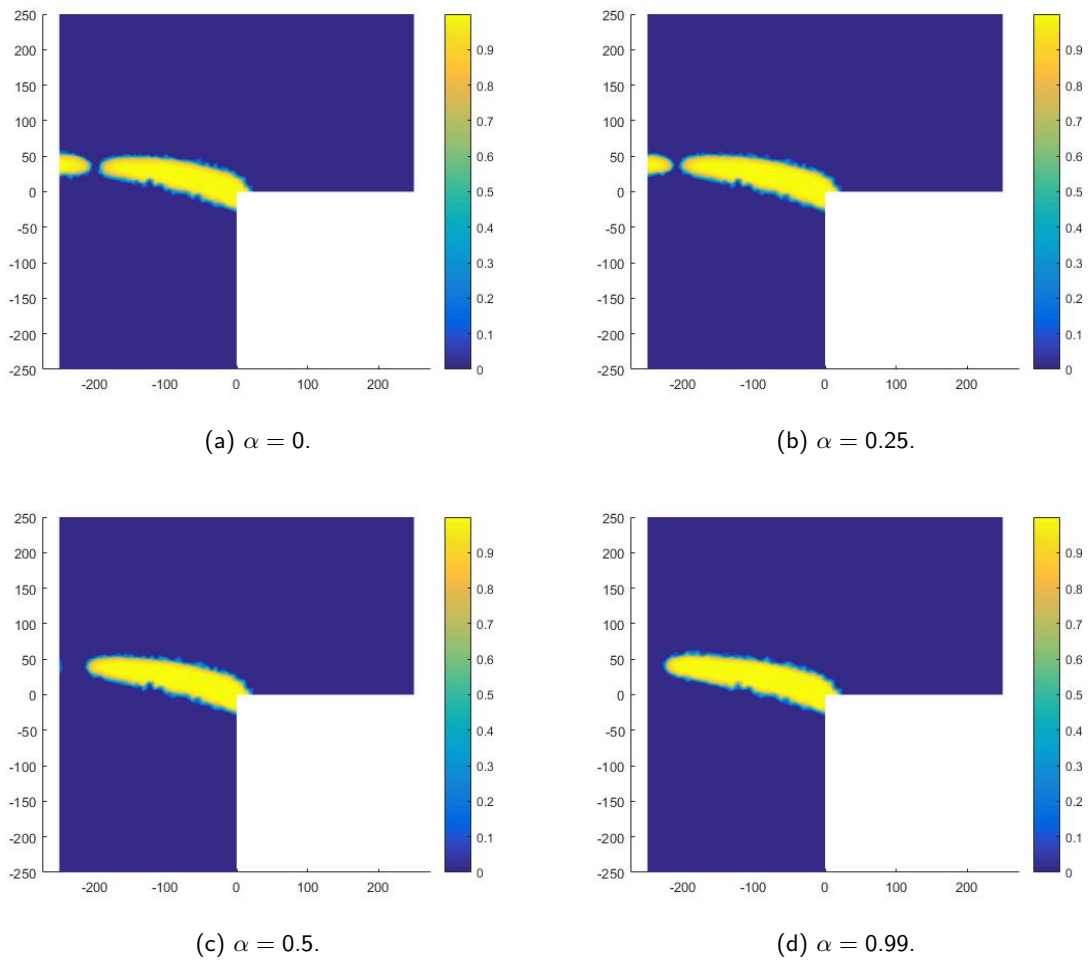


Figura 29: En groc, cracks generats amb el model de Gradient-Damage variant α .

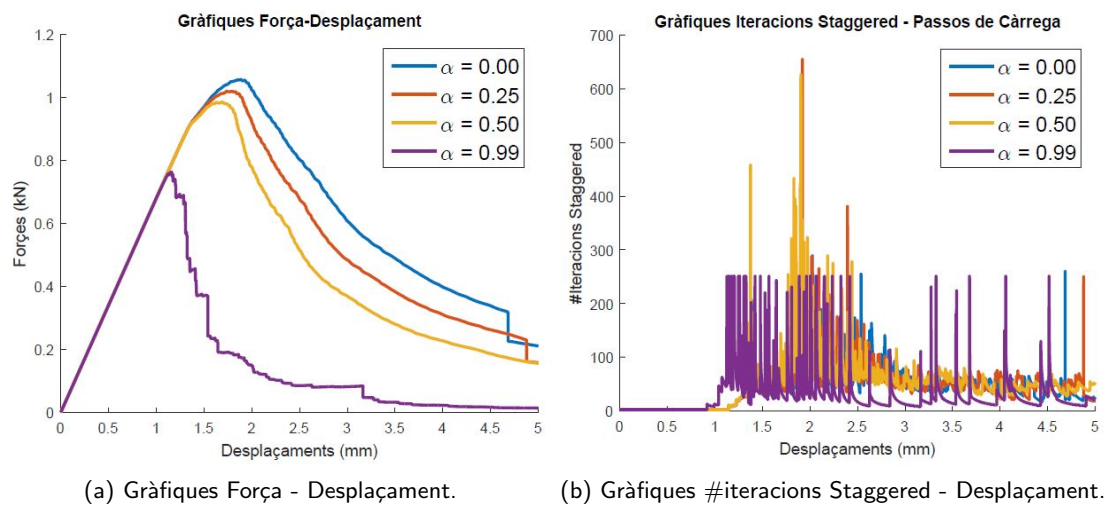


Figura 30: Gràfiques variant α .

5. Comparativa entre els dos models

Un cop acabada l'explicació dels dos models considerats en aquest treball es procedirà a fer-ne una comparació per tal de destacar-ne les similituds i diferències. La primera comparació que es realitzarà serà entre els esquemes de resolució de cada model:

PHASE-FIELD

Elasticitat Lineal + Dany

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \\ \boldsymbol{\sigma} = (1 - d)^2 \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \end{cases}$$

Dany

$$\Psi_0(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}$$

$$\mathcal{H} := \max_{0 \leq t \leq T} \Psi_0(\boldsymbol{\varepsilon})$$

$$\frac{G_c}{l} (\mathbf{d} - l^2 \Delta \mathbf{d}) = 2(1 - \mathbf{d}) \mathcal{H}$$

GRADIENT-DAMAGE

Equilibri

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \\ \boldsymbol{\sigma} = (1 - d) \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \end{cases}$$

Difusió

$$\mathbf{e}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}$$

$$\tilde{\mathbf{e}} - l^2 \Delta \tilde{\mathbf{e}} = \mathbf{e}$$

$$\boldsymbol{\kappa} := \max_{0 \leq t \leq T} \tilde{\mathbf{e}}$$

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}(\boldsymbol{\kappa})$$

Com es pot veure, a part del quadrat de les equacions d'elasticitat/equilibri, la principal diferència que existeix entre els esquemes de resolució dels models és l'ordre en què es calcula l'equació de dany/difusió. A més a més, per a computar el dany \mathbf{d} al model de Gradient-Damage es realitza un càlcul extra ($\mathbf{d} = \mathbf{d}(\boldsymbol{\kappa})$).

El fet que els esquemes i les equacions que se solucionen siguin molt semblants no implica que els models siguin equivalents, tal i com es pot observar en les diferents proves que s'han realitzat per a cada model. Com es pot veure, els cracks generats pel model de Gradient-Damage són més amples que els de Phase-Field. Tot i modificar la variable l dels models, no s'ha aconseguit que l'amplada dels cracks sigui similar.

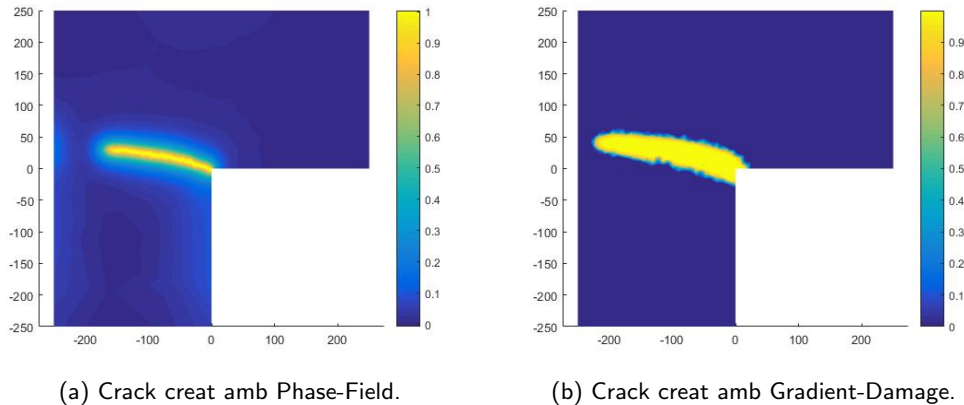


Figura 31: Comparació de les amplades dels cracks.

Si comparem les equacions de dany i difusió d'ambdós models (reajustant-les per tal que tinguin la forma més similar possible), tenim una possible explicació d'aquest fet:

$$\mathbf{d} - \left(\frac{G_c l}{G_c + 2l\mathcal{H}} \right) \cdot l \Delta \mathbf{d} = \frac{2l\mathcal{H}}{g_c + 2l\mathcal{H}}, \quad \tilde{\mathbf{e}} - l \cdot l \Delta \tilde{\mathbf{e}} = \mathbf{e}$$

Com es pot observar, el coeficient de difusió de l'equació de dany del model de Phase-Field va multiplicat pel terme $\frac{G_c l}{G_c + 2l\mathcal{H}}$. El fet que la funció \mathcal{H} formi part del denominador d'aquest terme fa que la difusió del crack es vegi afectada pel dany, de manera que aquest no va augmentant a mesura que transcorre el temps. D'altra banda, el coeficient de difusió del model de Gradient-Damage va multiplicat pel terme l , fet que no impedeix que es produeixi una difusió en el crack a mesura que aquest avança. És per aquest motiu que no es pot reduir la banda del crack en el model de Gradient-Damage, tal i com s'ha vist numèricament. Si s'intenta reduir molt el coeficient l en aquest model comencen a aparèixer solucions sense massa sentit físic, tal i com es pot veure a continuació.

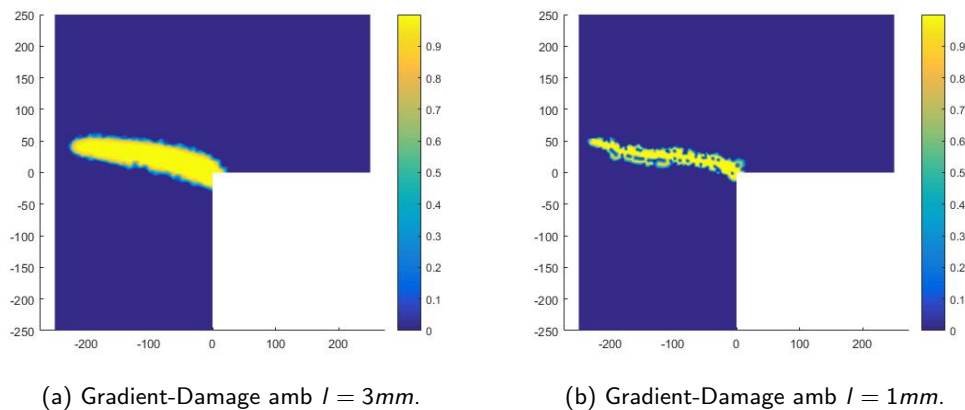


Figura 32: Intent de reduir l'amplada del crack de Gradient-Damage.

Una altra diferència apreciable en els diferents gràfics dels models comparats és que a Gradient-Damage el dany s'acumula només a la zona del crack, mentre que a Phase-Field hi ha zones danyades a la resta del material.

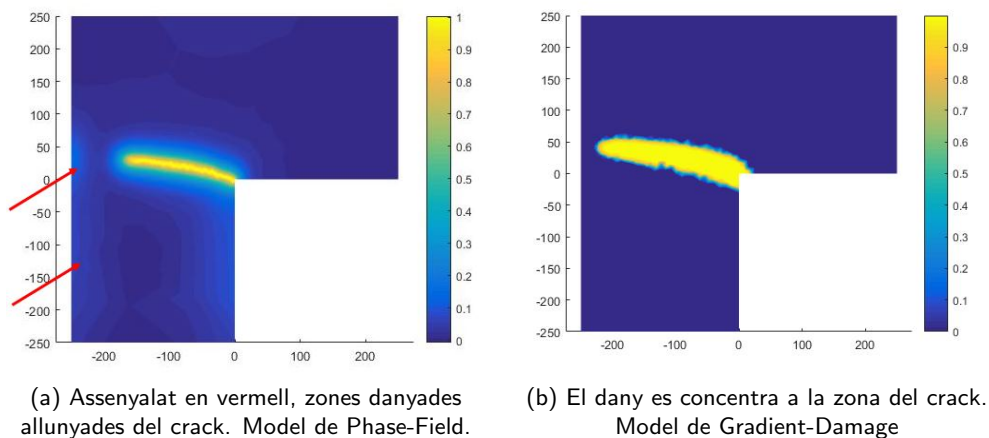


Figura 33: Comparació de l'acumulació del dany.

Prenent, per exemple, $l = 10\text{mm}$ i $G_c = 8.9 \cdot 10^{-5}\text{kN/mm}^2$ a Phase-Field i $\alpha = 0.99$, $\beta = 200$, $\kappa_0 = 10^{-4}$ i $l = 3\text{mm}$ a Gradient-Damage, s'han fet gràfiques Força - Desplaçament i #iteracions Staggered - Desplaçament per tal de poder comparar els dos models. Cal tenir en compte, però, que els dos models utilitzen un nombre diferent de desplaçaments. Això s'ha fet perquè, pels paràmetres escollits, el model de Gradient-Damage necessita més desplaçament que el de Phase-Field per tal de que es comenci a produir dany a la peça.

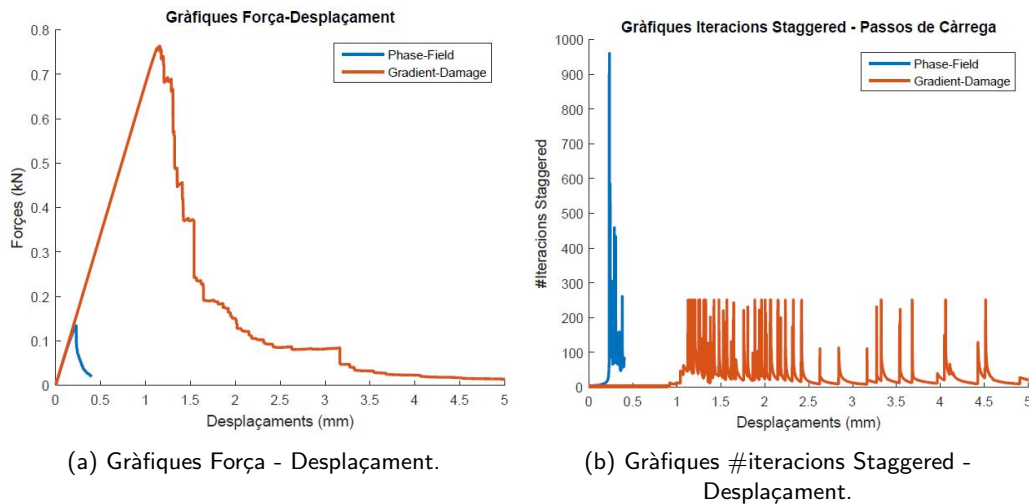


Figura 34: Comparació Força - Desplaçament i # iteracions Staggered - Desplaçament pels paràmetres escollits, que no tenen perquè ser equivalents.

A la Figura 34 es pot veure com, amb els paràmetres escollits, hi ha una diferència en el nombre de desplaçaments que han usat els models. Així i tot, cal destacar que el camí que segueix el crack és similar en ambdós models, així com també ho és la forma de la gràfica Força - Desplaçament, tot i la diferència de força necessària per produir el trencament. També es pot veure com el model de Phase-Field, amb aquests paràmetres, fa un nombre d'iteracions Staggered més elevat en el moment del trencament de la peça que Gradient-Damage.

6. Conclusions

Al llarg d'aquest treball s'ha fet la comparació dels models de Phase-Field i Gradient-Damage. El que en principi semblava que seria una comparació senzilla degut a la similitud entre les equacions que formen ambdós models ha resultat més complicat del que s'esperava.

Tal i com s'ha vist a l'apartat anterior, no s'ha aconseguit trobar una equivalència entre els paràmetres dels dos models, fet que fa sospitar que aquests no són equivalents. Tot i que aquest fet ha sorprès una mica al principi, un estudi més detallat de les equacions ha permès entendre'n el perquè. A més a més, gràcies a les simulacions numèriques, s'ha pogut observar com en el model de Gradient-Damage el dany s'acumula només a la zona del crack, mentre que en el de Phase-Field hi ha zones danyades a la resta del material.

Cal destacar també el fet que el model de Gradient-Damage s'ha implementat utilitzant un bucle Staggered a diferència de com es fa a la gran majoria d'articles, on s'utilitza el mètode de Newton-Raphson per tal de solucionar el sistema no lineal d'equacions. Un futur projecte podria ser la implementació del model amb Newton-Raphson per comprovar com afecta al resultat.

Si s'hagués d'escollir algun dels models hi ha diversos factors a tenir en compte. Primer de tot, cal destacar que el model de Phase-Field se sol utilitzar per modelitzar el trencament de materials amb poca resistència, com per exemple fulls de paper, mentre que Gradient-Damage s'usa per materials més resistents, com peces de fusta. També s'ha de considerar el fet que el model de Gradient-Damage no s'ha implementat de forma estàndard amb Newton-Raphson. Cal destacar, però, que sense una relació d'equivalència entre els paràmetres dels dos models no es pot fer una comparació quantitativa.

Personalment, el que més m'ha agradat d'aquest treball és el fet d'haver vist una aplicació real dels mètodes abstractes estudiats durant la carrera. També he après com solucionar algunes equacions que no s'havien vist a l'assignatura de Numerical Methods for PDEs, com la d'elasticitat lineal, i utilitzar un cluster per dur a terme grans computacions numèriques. Relacionat amb aquest últim fet, haver tractat amb codis tan costosos (computacionalment parlant) m'ha servit per entendre la importància dels mètodes d'optimització estudiats al llarg del grau.

Referències

- [1] Bourdin, B., Francfort, G.A., Marigo, J.J. *The variational approach to fracture*. Journal of Elasticity 91(1-3):5-148 (2008).
- [2] Muixí, A. *An HDG phase-field model with transition to fracture for crack propagation*. PhD in Applied Mathematics - Research plan.
- [3] Peerlings, R.H.J., de Borst, R., Brekelmans, W.A.M., de Vree, J.H.P. *Computational modelling of gradient-enhanced damage for fracture and fatigue problems*. Computational Plasticity, Fundamentals and Applications.
- [4] Peerlings, R.H.J., de Borst, R., Brekelmans, W.A.M., de Vree, J.H.P. *Gradient-enhanced damage for quasi-brittle materials*. Int. J. Numer. Meth. Engng., 39, 3391-3403 (1996).
- [5] Peerlings, R.H.J., de Borst, R., Brekelmans, W.A.M., Geers, M.G.D. *Gradient-enhanced damage modelling of concrete fracture*. Mechanics of Cohesive-Frictional Materials. 3, 323-342 (1998).

A. Forma Feble de l'Equació d'Elasticitat Lineal

Utilitzant la forma de Mandel explicada a la secció 2, la forma general de l'equació d'elasticitat lineal és la següent:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b} = 0 \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \end{cases} \quad (\text{Equació Constitutiva}) \quad (16)$$

on \mathbf{b} són les forces externes del sistema, \mathbf{C} és un tensor de 4t ordre que depèn de paràmetres materials i $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})$ és la matriu de petites deformacions.

Per aconseguir-ne la forma feble, es multiplica la primera equació de (16) per una funció \mathbf{v} tal que $\mathbf{v} = 0$ a Γ_D i s'integra a banda i banda de l'equació

$$- \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \, d\Omega = \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \, d\Omega \quad (17)$$

Utilitzant ara

$$\nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \nabla \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{v} \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma})$$

a (17), s'obté

$$\int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \, d\Omega = \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \, d\Omega$$

Aplicant ara el Teorema de la Divergència de Gauss, s'arriba a

$$\int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega - \int_{\partial\Omega} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma = \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \, d\Omega$$

on \mathbf{n} és el vector normal exterior. Separant ara $\partial\Omega = \Gamma_N \cup \Gamma_D$, s'obté:

$$\int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega - \int_{\Gamma_D} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma_D = \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \, d\Omega + \int_{\Gamma_N} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma_N$$

Com que s'ha escollit \mathbf{v} tal que $\mathbf{v} = 0$ a Γ_D i també es tenen les condicions de contorn $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0$ a Γ_N , la igualtat anterior queda

$$\int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega = \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \, d\Omega$$

Considerant la definició de $\boldsymbol{\sigma}$ de l'equació constitutiva de (16) i $\nabla \mathbf{v} = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})$, s'aconsegueix la forma feble del problema:

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \, d\Omega = \int_{\Omega} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \, d\Omega$$

B. Com s'utilitza Clonetroop

El Clonetroop és el cluster de la UPC, situat al Laboratori de Càlcul Numèric. És un cluster HPC Beowulf que consisteix en 48 nodes computacionals i un node mestre. Tots aquests nodes estan connectats a partir d'una xarxa Infiniband. En aquest annex s'explicarà com enviar un procés a calcular al Clonetroop, com comprovar-ne l'estat i com extreure'n els resultats.

Primer de tot, s'ha d'accedir a la xarxa privada virtual del LaCàN. Per fer-ho s'utilitzarà un programa anomenat Cisco AnyConnect, on s'hi introdueixen les dades proporcionades pel servei tècnic del LaCàN, tal i com es veu a la següent figura:

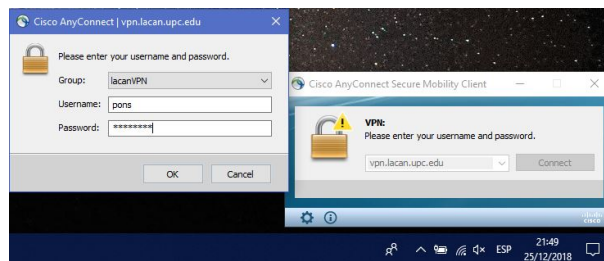


Figura 35: Connexió a Cisco AnyConnect.

A continuació, gràcies al programa FileZilla, s'afegeix a la carpeta del cluster el conjunt de scripts necessaris per fer funcionar el programa que desitgem.

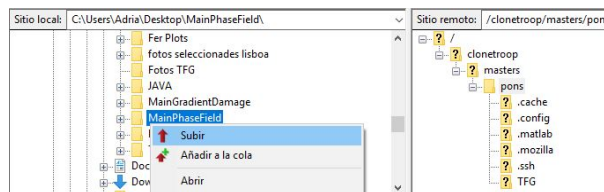


Figura 36: Càrrega de la carpeta *MainPhaseField* a Clonetroop.

Cal tenir en compte un parell de coses: el programa principal no pot fer cap plot i la carpeta que s'afegeix al cluster ha de contenir un fitxer que serveix per executar el programa principal. El fitxer té la forma següent:

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=Lshaped
##Select the desired partition:
#SBATCH --partition=serial8G
##Define the mÃ ximum number of cores you need to use:
##Keep in mind that most of matlab functions use internal multithreading.
#SBATCH -c 16
##Define the mÃ ximum memory you will use:
#SBATCH --mem=8G
##Tell the queue manager to not consider the number of cpus in use from
##other jobs.
#SBATCH --oversubscribe
echo "Start:" `date`
echo "I ran on:"
cd $SLURM_SUBMIT_DIR
echo $SLURM_NODELIST

##load the desired matlab version|
module load matlab/R2017b
##The matlab script should be called without the .m extension
matlab -nojvm -nodisplay -x "main_Lshaped; quit"
echo "End:" `date`
```

Figura 37: Fitxer per executar el programa principal.

En aquest fitxer s'indica el nom que es vol que tingui el programa (a l'exemple, *Lshaped*), la partició del cluster que es vol (a l'exemple, *serial8G*), la memòria necessària (a l'exemple, *8GB*) i el nom del programa principal que ha d'executar (a l'exemple, *main.Lshaped*), entre d'altres.

Per iniciar els càlculs, s'ha d'obrir la consola de Windows i connectar-se al Clonetroop mitjançant el protocol SSH, tal i com es veu a la següent imatge:

```
pons@lordvader:~$ ssh pons@clonetroop.upc.es
pons@clonetroop.upc.es's password:
Last login: Tue Dec 25 18:24:00 2018 from 147.83.70.25
=====
Welcome to the LaCaN Cluster
Download the new version of the manual from
https://www.lacan.upc.edu/wp-content/uploads/2018/11/ClonetroopUserManual.pdf
[pons@clonetroop ~]$
```

Figura 38: Connexió a Clonetroop des de la consola de Windows.

Un cop dins de Clonetroop, s'accedeix a la carpeta on hi ha el fitxer que es vol executar i s'escriu la comanda `sbatch scriptIso8.sh`, on `scriptIso8.sh` és el nom del fitxer de la Figura 37.

```
[pons@clonetroop ~]$ cd MainPhaseField/
[pons@clonetroop MainPhaseField]$ sbatch scriptIso8.sh
Submitted batch job 114741
[pons@clonetroop MainPhaseField]$
```

Figura 39: Execució del programa de Phase-Field, penjat a la carpeta del cluster prèviament.

Si es vol saber l'estat dels càlculs, introduint la comanda `squeue` es mostra la següent taula, que ens indica l'usuari, el nom del programa i el temps que porta executant-se, entre d'altres.

```
[pons@clonetroop MainPhaseField]$ squeue
JOBID PARTITION NAME USER ST TIME NODES NODELIST(REASON)
-----
114741 serial8G Lshaped pons R 2:16 1 clone-2-51
[pons@clonetroop MainPhaseField]$
```

Figura 40: Processos en execució a Clonetroop.

Si es volgués cancel·lar el programa, és suficient amb escriure la comanda `scancel`, seguit del `job_id` del programa que es vulgui cancel·lar.

Un cop acabada l'execució del programa, s'obté un fitxer d'extensió `.out` amb l'output que se li ha dit al programa que tragués (i.e., les línies de Matlab sense punt i coma final)

```

Start: Tue Dec 25 18:50:36 CET 2018
I ran on:
clone-2-52

< M A T L A B (R) >
Copyright 1984-2017 The MathWorks, Inc.
R2017b (9.3.0.713579) 64-bit (glnxa64)
September 14, 2017

For online documentation, see http://www.mathworks.com/support
For product information, visit www.mathworks.com.

k =

1.0000e-03

s =

```

Figura 41: Començament del fitxer .out obtingut.

Si es vol fer algun plot, s'ha de guardar la informació necessària en un fitxer .mat, que es pot descarregar de FileZilla.

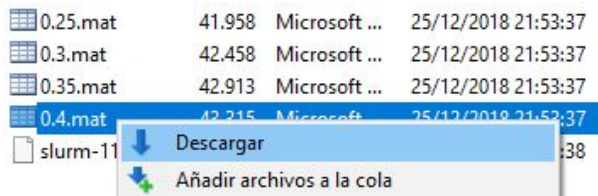


Figura 42: Arxiu .mat obtingut.

Amb aquest arxiu, es pot fer un programa de MatLab que faci el plot desitjat.

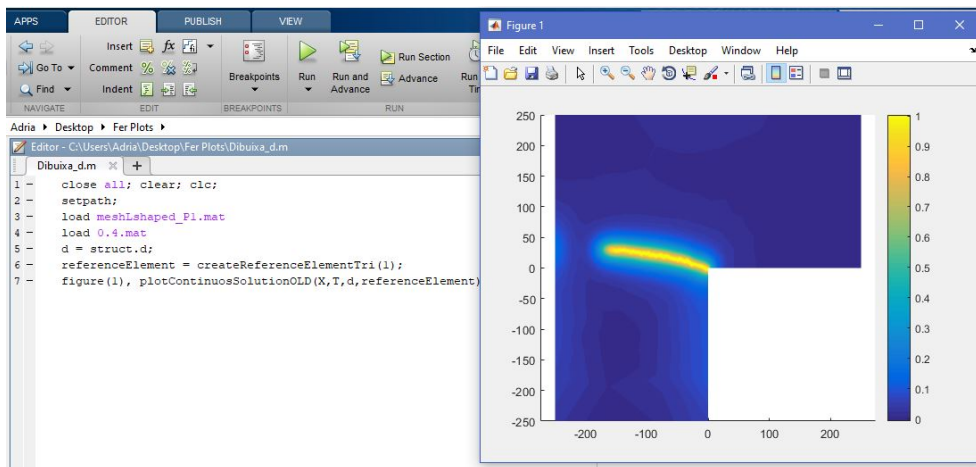


Figura 43: Programa de MatLab per fer el plot.