

Comment développer une loi de comportement avec MFront

Jean-Michel Proix⁽¹⁾ Thomas Helfer ⁽²⁾

⁽¹⁾EDF R&D AMA T64

⁽²⁾CEA DEN Cad DEC SESC LSC

mai 2014

Titre du slide : Plan de la présentation

- 1 un premier exemple simple
 - une loi de Norton
 - discrétisation et développement `mfront`
 - premier test `mtest` et `Code_Aster`
- 2 ce que permet `mfront`
 - `mfront` ?
 - `algorithmesMfront`
 - K tangente
 - `mtest`
 - `adao`
 - exemples `mfront`
- 3 développement d'une loi pas-à-pas
 - loi élastoplastique de Chaboche
- 4 conclusions

discrétisation implicite

Discrétisation en temps : ici, implicite

- Les quantités sont écrites à l'instant t_i
- les dérivées en temps sont remplacées par leurs incréments sur l'intervalle $\Delta t = t_i - t_{i-1}$

Pour la loi de Norton, on obtient :
$$\begin{cases} \Delta \underline{\epsilon}^{\text{el}} - \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}} + \Delta p \underline{n} = 0 \\ \Delta p - \Delta t A \sigma_{\text{eq}}^m = 0 \end{cases}$$

avec :

- $\underline{n} = \frac{3}{2} \frac{\underline{s}(t_i)}{\sigma_{\text{eq}}(t_i)} \quad .$

Système de 7 équations à 7 inconnues : $\Delta \underline{\epsilon}^{\text{el}}, \Delta p$

premier développement avec mfront

```

@Parser Implicit;
@Behaviour Norton;
@Algorithm NewtonRaphson_NumericalJacobian;
@RequireStiffnessTensor;
@MaterialProperty real A;
@MaterialProperty real m;
@StateVariable real p;
@ComputeStress{ sig = D*eel; }
@Integrator{
  real seq = sigmaeq(sig);
  Stensor n = Stensor(0.);
  if (seq > 1.e-15){
    n = 1.5*deviator(sig)/seq;
  }
  feel = deel + dp*n-deto;
  fp = dp - dt*A*pow(seq,m);
}

```

Newton, calcul de J

$$\sigma = \underline{\underline{\mathbf{D}}} : \underline{\epsilon}^{\text{el}}$$

$$\underline{n} = \frac{3}{2} \frac{\underline{s}}{\sigma_{\text{eq}}}$$

$$\Delta \underline{\epsilon}^{\text{el}} + \Delta p \underline{n} - \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}} = 0$$

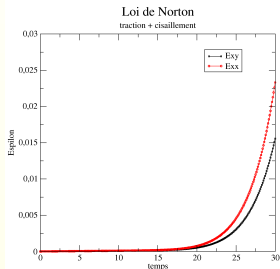
$$\Delta p - \Delta t A \sigma_{\text{eq}}^m = 0$$

compilation...

```
mfront -obuild -interface=aster norton.mfront
test...
```

```
mtest norton.mtest
```

```
@Behaviour<aster> './src/
libAsterBehaviour.so' 'asternorton';
@MaterialProperty<constant> 'YoungModulus
    2.E11 ;
@MaterialProperty<constant> 'PoissonRatio
    0.3 ;
@MaterialProperty<constant> 'A' 8.e-67;
@MaterialProperty<constant> 'm' 8.2;
@ExternalStateVariable 'Temperature'
    293.15;
@StiffnessMatrixType 'Elastic' ;
@ImposedStress 'SXX' {0.:0.,30.:40.e6};
@ImposedStress 'SXY' {0.:0.,30.:40.e6};
@Times {0., 30. in 300};
```



utilisation avec Code_Aster—1/2

compilation du comportement ;

- soit avant le calcul `Code_Aster:mfront -obuild -interface=aster norton.mfront => src/libAsterBehaviour.so`
- dans le fichier de commandes :
 - `import os;`
 - `os.system("mfront -obuild -interface=aster norton.mfront").`

dans `DEFI_MATERIAU` sous `UMAT` :

`C1=178600.0E6;`

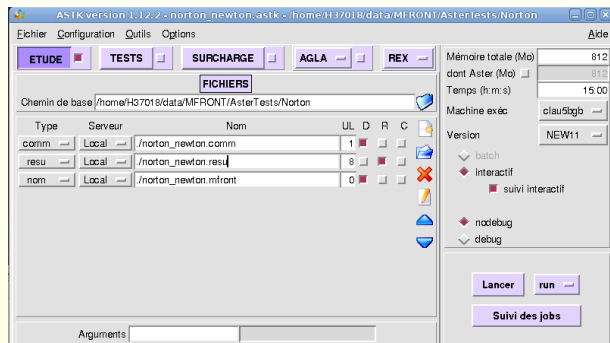
`C2=0.3;`

`C3=8...;`

`... ;` comme définis dans le fichier `norton.mfront`.

dans STAT_NON_LINE sous COMPORTEMENT ;

- `RELATION='MFRONT'`
- `LIBRAIRIE='libAsterBehaviour.so'`
- `NOM_ROUTINE='asternorton.so'`
- `NB_VARI=7`



fonctionnalités de `mfront`

- 1 un premier exemple simple
 - une loi de Norton
 - discrétisation et développement `mfront`
 - premier test `mtest` et `Code_Aster`
- 2 ce que permet `mfront`
 - `mfront` ?
 - `algorithmesMfront`
 - K tangente
 - `mtest`
 - `adao`
 - exemples `mfront`
- 3 développement d'une loi pas-à-pas
 - loi élastoplastique de Chaboche
- 4 conclusions

avantages de mfront

mfront a été développé par le CEA (pleiades) pour :

- **permettre** l'écriture de connaissances matériau :
 - les propriétés matériau ; voir [matériaux](#)
 - les comportements mécaniques (plasticité, endommagement) ;
- **mutualiser** ces connaissances matériau :
 - entre différentes applications de la plate-forme pleiades,
 - maintenant interfacé avec Code_Aster
 - la base de données sirius utilise des fichiers mfront en interne (+ de 100 matériaux différents) ;
- **simplifier le travail des utilisateurs** :
 - **numérique** : on écrit les équations, pas les algos ;
 - **informatique** peu de lignes à écrire ;
 - **donc minimiser le risque d'erreur**
- mfront produit un code efficace :
 - opérations tensorielles optimisées ;
 - benchmarks avec Code_Aster de 18 lois depuis 12 mois

avantages de mfront

mfront a été développé par le CEA (pleiades) pour :

- **permettre** l'écriture de connaissances matériau :
 - les propriétés matériau ; voir [matériaux](#)
 - les comportements mécaniques (plasticité, endommagement) ;
- **mutualiser** ces connaissances matériau :
 - entre différentes applications de la plate-forme pleiades,
 - maintenant interfacé avec Code_Aster
 - la base de données sirius utilise des fichiers mfront en interne (+ de 100 matériaux différents) ;
- **simplifier le travail des utilisateurs** :
 - **numérique** : on écrit les équations, pas les algos ;
 - **informatique** peu de lignes à écrire ;
 - **donc minimiser le risque d'erreur**
- mfront produit un code efficace :
 - opérations tensorielles optimisées ;
 - benchmarks avec Code_Aster de 18 lois depuis 12 mois

avantages de mfront

mfront a été développé par le CEA (pleiades) pour :

- **permettre** l'écriture de connaissances matériau :
 - les propriétés matériau ; voir [matériaux](#)
 - les comportements mécaniques (plasticité, endommagement) ;
- **mutualiser** ces connaissances matériau :
 - entre différentes applications de la plate-forme pleiades,
 - maintenant interfacé avec Code_Aster
 - la base de données sirius utilise des fichiers mfront en interne (+ de 100 matériaux différents) ;
- **simplifier le travail des utilisateurs** :
 - **numérique** : on écrit les équations, pas les algos ;
 - **informatique** peu de lignes à écrire ;
 - **donc minimiser le risque d'erreur**
- mfront produit un code efficace :
 - opérations tensorielles optimisées ;
 - benchmarks avec Code_Aster de 18 fois depuis 12 mois

avantages de mfront

mfront a été développé par le CEA (pleiades) pour :

- **permettre** l'écriture de connaissances matériau :
 - les propriétés matériau ; voir [matériaux](#)
 - les comportements mécaniques (plasticité, endommagement) ;
- **mutualiser** ces connaissances matériau :
 - entre différentes applications de la plate-forme pleiades,
 - maintenant interfacé avec Code_Aster
 - la base de données sirius utilise des fichiers mfront en interne (+ de 100 matériaux différents) ;
- **simplifier le travail des utilisateurs** :
 - **numérique** : on écrit les équations, pas les algos ;
 - **informatique** peu de lignes à écrire ;
 - **donc minimiser le risque d'erreur**
- mfront produit un code efficace :
 - opérations tensorielles optimisées ;
 - benchmarks avec Code_Aster de 18 lois depuis 12 mois

algorithmes disponibles dans `mfront`

Connaissant en un point et à un instant t le tenseur $\varepsilon_{t+\Delta t}$, et toutes les quantités à l'instant t , `mfront` a pour fonction de calculer :

- les contraintes $\underline{\sigma}_{t+\Delta t}$ et les variables internes $\alpha_{t+\Delta t}$;
- l'opérateur tangent cohérent : $\frac{\partial \Delta \underline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}}}$.
- pour plus de détail, voir [algo global](#)

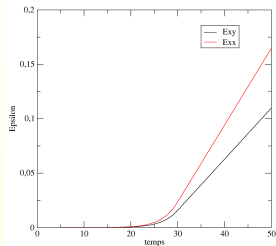
en intégrant le système d'équations régissant la loi de comportement locale à l'aide de divers algorithmes :

- spécifiques (élasto-(visco)-plasticité incompressible) ;
- explicites (méthodes de Runge-Kutta) ;
- implicites (méthode de Newton-Raphson et variantes) ;
- libre (l'utilisateur définit l'intégration).

quel algorithme choisir ?

- si un intégrateur spécifique existe, l'utiliser :
 - réduction du nombre d'équations et méthode implicite ;
- si l'on doit recourir à un autre intégrateur, **préférer l'intégration implicite** :
 - les temps de calculs sont souvent **très** avantageux ;
 - on a (plus facilement) la **tangente cohérente** ;
- utiliser une méthode de RUNGE-KUTTA si :
 - **rien d'autre** n'est possible (grand nombre de variables) ;
- exemple sur le petit test de Norton :

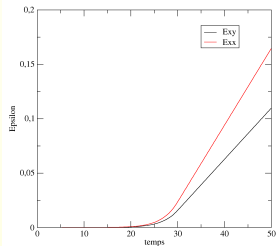
| traction | spec | impl | rk |
|----------|--------|--------|--------|
| 30 MPa | 0.032s | 0.128s | 0.372s |
| 50 MPa | 0.218s | 0.228s | 10.37s |



quel algorithme choisir ?

- si un intégrateur spécifique existe, l'utiliser :
 - réduction du nombre d'équations et méthode implicite ;
- si l'on doit recourir à un autre intégrateur, **préférer l'intégration implicite** :
 - les temps de calculs sont souvent **très** avantageux ;
 - on a (plus facilement) la **tangente cohérente** ;
- utiliser une méthode de RUNGE-KUTTA si :
 - rien d'autre n'est possible (grand nombre de variables) ;
- exemple sur le petit test de Norton :

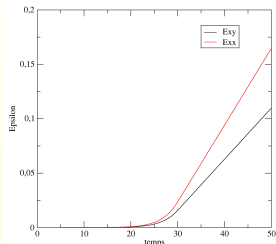
| traction | spec | impl | rk |
|----------|--------|--------|--------|
| 30 MPa | 0.032s | 0.128s | 0.372s |
| 50 MPa | 0.218s | 0.228s | 10.37s |



quel algorithme choisir ?

- si un intégrateur spécifique existe, l'utiliser :
 - réduction du nombre d'équations et méthode implicite ;
- si l'on doit recourir à un autre intégrateur, **préférer l'intégration implicite** :
 - les temps de calculs sont souvent **très** avantageux ;
 - on a (plus facilement) la **tangente cohérente** ;
- utiliser une méthode de RUNGE-KUTTA si :
 - **rien d'autre** n'est possible (grand nombre de variables) ;
- exemple sur le petit test de Norton :

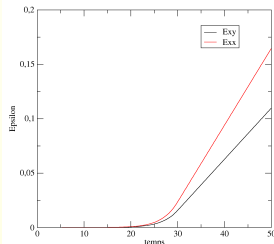
| traction | spec | impl | rk |
|----------|--------|--------|--------|
| 30 MPa | 0.032s | 0.128s | 0.372s |
| 50 MPa | 0.218s | 0.228s | 10.37s |



quel algorithme choisir ?

- si un intégrateur spécifique existe, l'utiliser :
 - réduction du nombre d'équations et méthode implicite ;
- si l'on doit recourir à un autre intégrateur, **préférer l'intégration implicite** :
 - les temps de calculs sont souvent **très** avantageux ;
 - on a (plus facilement) la **tangente cohérente** ;
- utiliser une méthode de RUNGE-KUTTA si :
 - **rien d'autre** n'est possible (grand nombre de variables) ;
- exemple sur le petit test de Norton :

| traction | spec | impl | rk |
|----------|--------|--------|--------|
| 30 MPa | 0.032s | 0.128s | 0.372s |
| 50 MPa | 0.218s | 0.228s | 10.37s |



algorithmes spécifiques

- quatre intégrateurs spécifiques :
 - `IsotropicMisesCreep`, écoulement viscoplastique isotrope $dp = f(\sigma_{eq})$;
 - `IsotropicStrainHardeningMisesCreep`, écoulement viscoplastique isotrope avec écrouissage $dp = f(\sigma_{eq}, p)$;
 - `IsotropicPlasticMisesFlow`, écoulement plastique isotrope $f(\sigma_{eq}, p) \leq 0$;
 - `MultipleIsotropicMisesFlows`, une somme des différents écoulements précédents ;
- l'élasticité est élastique isotrope :
 - les coefficients d'élasticité sont donnés par le code aux éléments finis ;
- il suffit de donner la (ou les) fonction(s) f et ses dérivées ;
- algorithme optimisé, réduction à une équation scalaire.

algorithmes spécifiques

- quatre intégrateurs spécifiques :
 - `IsotropicMisesCreep`, écoulement viscoplastique isotrope $dp = f(\sigma_{eq})$;
 - `IsotropicStrainHardeningMisesCreep`, écoulement viscoplastique isotrope avec écrouissage $dp = f(\sigma_{eq}, p)$;
 - `IsotropicPlasticMisesFlow`, écoulement plastique isotrope $f(\sigma_{eq}, p) \leq 0$;
 - `MultipleIsotropicMisesFlows`, une somme des différents écoulements précédents ;
- l'élasticité est élastique isotrope :
 - les coefficients d'élasticité sont donnés par le code aux éléments finis ;
- il suffit de donner la (ou les) fonction(s) f et ses dérivées ;
- algorithme optimisé, réduction à une équation scalaire.

algorithmes spécifiques

- quatre intégrateurs spécifiques :
 - `IsotropicMisesCreep`, écoulement viscoplastique isotrope $dp = f(\sigma_{eq})$;
 - `IsotropicStrainHardeningMisesCreep`, écoulement viscoplastique isotrope avec écrouissage $dp = f(\sigma_{eq}, p)$;
 - `IsotropicPlasticMisesFlow`, écoulement plastique isotrope $f(\sigma_{eq}, p) \leq 0$;
 - `MultipleIsotropicMisesFlows`, une somme des différents écoulements précédents ;
- l'élasticité est élastique isotrope :
 - les coefficients d'élasticité sont donnés par le code aux éléments finis ;
- il suffit de donner la (ou les) fonction(s) f et ses dérivées ;
- algorithme optimisé, réduction à une équation scalaire.

algorithmes spécifiques

- quatre intégrateurs spécifiques :
 - `IsotropicMisesCreep`, écoulement viscoplastique isotrope $dp = f(\sigma_{eq})$;
 - `IsotropicStrainHardeningMisesCreep`, écoulement viscoplastique isotrope avec écrouissage $dp = f(\sigma_{eq}, p)$;
 - `IsotropicPlasticMisesFlow`, écoulement plastique isotrope $f(\sigma_{eq}, p) \leq 0$;
 - `MultipleIsotropicMisesFlows`, une somme des différents écoulements précédents ;
- l'élasticité est élastique isotrope :
 - les coefficients d'élasticité sont donnés par le code aux éléments finis ;
- il suffit de donner la (ou les) fonction(s) f et ses dérivées ;
- algorithme optimisé, réduction à une équation scalaire.

exemple d'algorithme spécifique

```
@Parser IsotropicMisesCreep ;  
@Behaviour Norton;  
  
@MaterialProperty stress A;  
@MaterialProperty stress m;  
  
@FlowRule{  
    real tmp=A*pow(seq,m-1.);  
    df_dseq = m*tmp ;  
    f      = seq*tmp;  
}
```

Intégration par une méthode explicite (RUNGE-KUTTA)

- la loi de comportement est réduite à un système différentiel :
 $\dot{Y} = G(Y, t)$ avec : $[\Delta Y]^T = [\Delta \epsilon^{el}, \Delta \alpha]$
où t représente symboliquement l'évolution des variables externes et de la déformation totale ;
- le système différentiel s'écrit dans un bloc `@Derivative` ;
- pour toute variable interne ou externe X , dX représente la vitesse dans `@ComputeStress` et `@Derivative`
 - ce n'est pas l'incrément !
- le code du bloc `@UpdateAuxiliaryStateVariables` peut être appelé plusieurs fois. Il faut utiliser la variable locale `dt_` pour connaître le pas de temps effectivement utilisé (`dt` désigne toujours le pas de temps total)

Intégration par une méthode explicite (RUNGE-KUTTA)

- la loi de comportement est réduite à un système différentiel :
 $\dot{Y} = G(Y, t)$ avec : $[\Delta Y]^T = [\Delta \epsilon^{el}, \Delta \alpha]$
où t représente symboliquement l'évolution des variables externes et de la déformation totale ;
- le système différentiel s'écrit dans un bloc `@Derivative` ;
- pour toute variable interne ou externe X , dX représente la vitesse dans `@ComputeStress` et `@Derivative`
 - ce n'est pas l'incrément !
- le code du bloc `@UpdateAuxiliaryStateVariables` peut être appelé plusieurs fois. Il faut utiliser la variable locale `dt_` pour connaître le pas de temps effectivement utilisé (`dt` désigne toujours le pas de temps total)

Intégration par une méthode explicite (RUNGE-KUTTA)

- la loi de comportement est réduite à un système différentiel :
 $\dot{Y} = G(Y, t)$ avec : $[\Delta Y]^T = [\Delta \epsilon^{el}, \Delta \alpha]$
où t représente symboliquement l'évolution des variables externes et de la déformation totale ;
- le système différentiel s'écrit dans un bloc `@Derivative` ;
- pour toute variable interne ou externe X , dX représente la vitesse dans `@ComputeStress` et `@Derivative`
 - ce n'est pas l'incrément !
- le code du bloc `@UpdateAuxiliaryStateVariables` peut être appelé plusieurs fois. Il faut utiliser la variable locale `dt_` pour connaître le pas de temps effectivement utilisé (`dt` désigne toujours le pas de temps total)

Intégration par une méthode explicite (RUNGE-KUTTA)

- la loi de comportement est réduite à un système différentiel :
 $\dot{Y} = G(Y, t)$ avec : $[\Delta Y]^T = [\Delta \epsilon^{el}, \Delta \alpha]$
où t représente symboliquement l'évolution des variables externes et de la déformation totale ;
- le système différentiel s'écrit dans un bloc `@Derivative` ;
- pour toute variable interne ou externe X , dX représente la vitesse dans `@ComputeStress` et `@Derivative`
 - ce n'est pas l'incrément !
- le code du bloc `@UpdateAuxiliaryStateVariables` peut être appelé plusieurs fois. Il faut utiliser la variable locale `dt_` pour connaître le pas de temps effectivement utilisé (`dt` désigne toujours le pas de temps total)

```

@Parser RungeKutta;
@Algorithm rk54;
@Behaviour Norton;
@RequireStiffnessTensor;
@MaterialProperty real A;
@MaterialProperty real m;
@StateVariable real p;
@ComputeStress{ sig = D*eel; }
@TangentOperator{ Dt=D; }
@Derivative{
    real sigeq = sigmaeq(sig);
    Stensor n(0.);
    if (sigeq > 1.e-15){
        n = 1.5*deviator(sig)/sigeq;
    }
    dp = A*pow(sigeq,m);
    deel = deto - dp*n;
}
    
```

Runge-Kutta

ordres 4 et 5

$$\underline{\sigma} = \underline{\underline{D}} : \underline{\epsilon}^{el}$$

eel défini par défaut

$$\underline{n} = \frac{3}{2} \frac{\underline{s}}{\sigma_{eq}}$$

$$dp = A \sigma_{eq}^m$$

$$d\underline{\epsilon}^{el} = d\underline{\epsilon}^{to} - dp \underline{n}$$

quelques notations et définitions

- propriété matériau @MaterialProperty :
 - fournie par le code appelant !
- variable local @LocalVariable :
 - calcul de certains termes avant l'intégration (exemple de termes d'ARRHENIUS) ;
- variable interne @StateVariable ;
- variable auxiliaire @AuxiliaryStateVariable : permet de réduire la taille des systèmes à intégrer ;
- variable externe @ExternalStateVariable ;
- notations ;
 - mots réservés : eel, eto, sig, ;
 - explicite : pour toute variable a, da est la vitesse ;
 - implicite : da est l'incrément, fa est l'équation, dfa_dda la dérivée ;

Intégration implicite

- Deux analyseurs :
 - `Implicit` qui déclare automatiquement la déformation élastique ;
 - `ImplicitII` qui ne déclare pas automatiquement la déformation élastique ;
- différents algorithmes :
 - `NewtonRaphson` (jacobienne calculée par l'utilisateur) ;
 - `NewtonRaphson_NumericalJacobian` (jacobienne calculée par différence finie centrée) ;
 - `Broyden` (jacobienne partielle) ;
 - `Powell DogLeg` (méthode de Powell combinant Gauss et Newton) ;

Intégration implicite : principe

- le système différentiel devient un système non-linéaire :

$$[F(\Delta Y) = \Delta Y - \Delta t G(Y_t + \theta \Delta Y, t + \theta \Delta t) = 0 \text{ avec :} \\ [\Delta Y]^T = [\Delta \underline{\epsilon}^{\text{el}}, \Delta \alpha]$$

- pour les lois indépendantes du temps, on annule directement la surface de charge !
- on résout ce système par un NEWTON-RAPHSON
 - il faut la jacobienne $J = \frac{\partial F}{\partial \Delta Y}$
- la jacobienne peut être calculée par blocs :

$$J = \frac{\partial F}{\partial Y} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_{y_1}}{\partial y_1} & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \frac{\partial f_{y_i}}{\partial y_j} & & \vdots \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \frac{\partial f_{y_N}}{\partial y_N} \end{pmatrix}$$

- on peut demander une vérification numérique !

@CompareToNumericalJacobian, true;

Intégration implicite : principe

- le système différentiel devient un système non-linéaire :

$$[F(\Delta Y) = \Delta Y - \Delta t G(Y_t + \theta \Delta Y, t + \theta \Delta t) = 0 \text{ avec :} \\ [\Delta Y]^T = [\Delta \underline{\epsilon}^{\text{el}}, \Delta \alpha]$$

- pour les lois indépendantes du temps, on annule directement la surface de charge !

- on résout ce système par un NEWTON-RAPHSON

- il faut la jacobienne $J = \frac{\partial F}{\partial \Delta Y}$

- la jacobienne peut être calculée par blocs :

$$J = \frac{\partial F}{\partial Y} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_{y_1}}{\partial y_1} & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \frac{\partial f_{y_i}}{\partial y_j} & & \vdots \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots & & \frac{\partial f_{y_N}}{\partial y_N} \end{pmatrix}$$

- on peut demander une vérification numérique !

@CompareToNumericalJacobian, true;

Intégration implicite : principe

- le système différentiel devient un système non-linéaire :

$$[F(\Delta Y) = \Delta Y - \Delta t G(Y_t + \theta \Delta Y, t + \theta \Delta t) = 0 \text{ avec :} \\ [\Delta Y]^T = [\Delta \underline{\epsilon}^{\text{el}}, \Delta \alpha]$$

- pour les lois indépendantes du temps, on annule directement la surface de charge !
- on résout ce système par un NEWTON-RAPHSON

- il faut la jacobienne $J = \frac{\partial F}{\partial \Delta Y}$

- la jacobienne peut être calculée par blocs :

$$J = \frac{\partial F}{\partial Y} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_{y_1}}{\partial y_1} & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & & & & \\ \vdots & & \frac{\partial f_{y_i}}{\partial y_j} & & \vdots \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots & & \frac{\partial f_{y_N}}{\partial y_N} \end{pmatrix}$$

- on peut demander une vérification numérique !

@CompareToNumericalJacobian, true;

Intégration implicite : principe

- le système différentiel devient un système non-linéaire :

$$[F(\Delta Y) = \Delta Y - \Delta t G(Y_t + \theta \Delta Y, t + \theta \Delta t) = 0 \text{ avec :} \\ [\Delta Y]^T = [\Delta \underline{\epsilon}^{\text{el}}, \Delta \alpha]$$

- pour les lois indépendantes du temps, on annule directement la surface de charge !
- on résout ce système par un NEWTON-RAPHSON
 - il faut la jacobienne $J = \frac{\partial F}{\partial \Delta Y}$
- la jacobienne peut être calculée par blocs :

$$J = \frac{\partial F}{\partial Y} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_{y_1}}{\partial y_1} & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \frac{\partial f_{y_i}}{\partial y_j} & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \frac{\partial f_{y_N}}{\partial y_N} \end{pmatrix}$$

- on peut demander une vérification numérique !

@CompareToNumericalJacobian, true;

Intégration implicite : principe

- le système différentiel devient un système non-linéaire :

$$[F(\Delta Y) = \Delta Y - \Delta t G(Y_t + \theta \Delta Y, t + \theta \Delta t) = 0 \text{ avec :} \\ [\Delta Y]^T = [\Delta \underline{\epsilon}^{\text{el}}, \Delta \alpha]$$

- pour les lois indépendantes du temps, on annule directement la surface de charge !
- on résout ce système par un NEWTON-RAPHSON

- il faut la jacobienne $J = \frac{\partial F}{\partial \Delta Y}$

- la jacobienne peut être calculée par blocs :

$$J = \frac{\partial F}{\partial Y} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_{y_1}}{\partial y_1} & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \frac{\partial f_{y_i}}{\partial y_j} & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \frac{\partial f_{y_N}}{\partial y_N} \end{pmatrix}$$

- on peut demander une vérification numérique !

@CompareToNumericalJacobian true;

Exemple : loi de Norton avec intégration implicite

Le système à résoudre étant toujours défini par :

- $f_{eel} = \Delta \underline{\epsilon}^{el} + \Delta p \underline{n} - \Delta \underline{\epsilon}^{to}$
- $f_p = \Delta p - \Delta t A \sigma_{eq}^m$

Listons les différentes dérivées à calculer :

- $dfeel_deel = \frac{\partial}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{el}} (\Delta \underline{\epsilon}^{el} + \Delta p \underline{n} - \Delta \underline{\epsilon}) = \tilde{I} + \Delta p \frac{\partial \underline{n}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{el}}$

avec $\tilde{I}_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$

- $dfeel_ddp = \underline{n}$
- $dfp_ddp = 1$

- $dfp_ddeel = -\Delta t A m \sigma_{eq}^{m-1} \frac{\partial(\sigma)_{eq}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{el}} = -\Delta t A m \sigma_{eq}^{m-1} \theta \underline{n} | D$

Les dérivées de la normale \underline{n} sont : $\frac{\partial \underline{n}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{el}} = \frac{2\mu}{(\sigma)_{eq}} (M - \underline{n} \otimes \underline{n})$

Le tenseur $\underline{\underline{M}}$ étant défini par : $\underline{\underline{M}} = \frac{3}{2} \underline{\underline{I}} - \frac{1}{2} \underline{I} \otimes \underline{I}$

La première partie de `norton.mfront` est inchangée. On a oté : **Algorithm NewtonRaphson_NumericalJacobian** ;

```
@Parser Implicit;  
@Behaviour Norton;  
@RequireStiffnessTensor;  
@Epsilon 1.e-12;  
@MaterialProperty stress young;  
@MaterialProperty real nu;  
@MaterialProperty real A;  
@MaterialProperty real m;  
@StateVariable real p;  
@TangentOperator{  
  Stensor4 Je;  
  getPartialJacobianInvert(Je);  
  Dt = D*Je;  
}  
@ComputeStress{  sig = D*eel;}
```

La matrice jacobienne J est programmée :

```
@Integrator{
  real seq = sigmaeq(sig);
  real inv_seq=0. ;
  if (seq > 1.e-15){
    inv_seq = 1./seq ;
  }
  Stensor n = 1.5*deviator(sig)*inv_seq ;
  feel += dp*n-deto;
  fp    -= dt*A*pow(seq,m);

  // jacobienne
  const Stensor4 Jmn = Stensor4::M() - (n^n);
  const real mu = young/2/(1.+nu) ;
  dfeel_ddeed += 2.*mu*theta*dp*Jmn*inv_seq ;
  dfeel_ddp    = n;
  dfp_ddeed    = - dt*A*m*pow(seq,m-1)*theta*(n| D);
  dfp_ddp      = 1 ;
}
```

opérateurs tangents

- L'intégration de la loi de comportement est effectuée soit en explicite, soit en implicite ;
- On obtient les contraintes $\underline{\sigma}_{t+\Delta t}$ et les variables internes $\underline{\alpha}_{t+\Delta t}$;
- Mais pour qu'un calcul de structure converge vite, il faut calculer l'opérateur tangent cohérent :

$$\frac{\partial \Delta \underline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}}}$$

l'opérateur tangent en `mfront`

Dans le cas d'une intégration explicite, on utilise l'opérateur d'élasticité D

```
@TangentOperator{ Dt=D;}
```

Dans le cas implicite, on peut souvent construire facilement l'opérateur tangent cohérent :

```
@TangentOperator{  
  Stensor4 Je;  
  getPartialJacobianInvert(Je);  
  Dt = D*Je;  
}
```

Il est extrait de l'inverse de la jacobienne J soit programmée, soit estimée numériquement par `mfront` (pour plus de détail, voir [KtgtFromJ](#)).

fonctionnalités de `mtest`

- pour simuler la réponse d'un point matériel (comme `SIMU_POINT_MAT`) ;
- piloter en contraintes ou/en déformations ou de manière mixte ;
- l'algorithme de résolution peut être paramétré :
 - matrice de prédiction, matrice tangente cohérente (interface `Code_Aster`) ;
 - sous-découpage du pas de temps ;
 - etc...
- possibilité de comparer les résultats à une solution analytique ou des fichiers de références (non régression) ;
- les lois `mfront` peuvent générer des fichiers `mtest` en cas de non convergence d'un calcul de structure

exemple de fichier mtest

```
@Behaviour<aster> 'src/libAsterBehaviour.so' '
  asterburger';
@MaterialProperty<constant> 'young' 31000. ;
@MaterialProperty<constant> 'nu' 0.3 ;
@MaterialProperty<constant> 'KRS' 2.0E5 ;
@MaterialProperty<constant> 'NRS' 4.0E10 ;
```

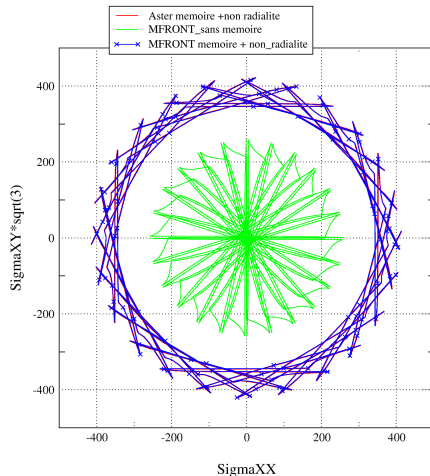
...

```
@ExternalStateVariable 'Temperature' 293.15;
@ExternalStateVariable 'C' 1.;
@ImposedStress 'SZZ' {0.: 0., 1.: -1., 31536010. : -1.};
@Times {0.,1. in 1, 138629.44 in 10,8640000. in 10 };
@Test<file> 'burger.ref' {'EZZ':4} 1.e-8 ;
```

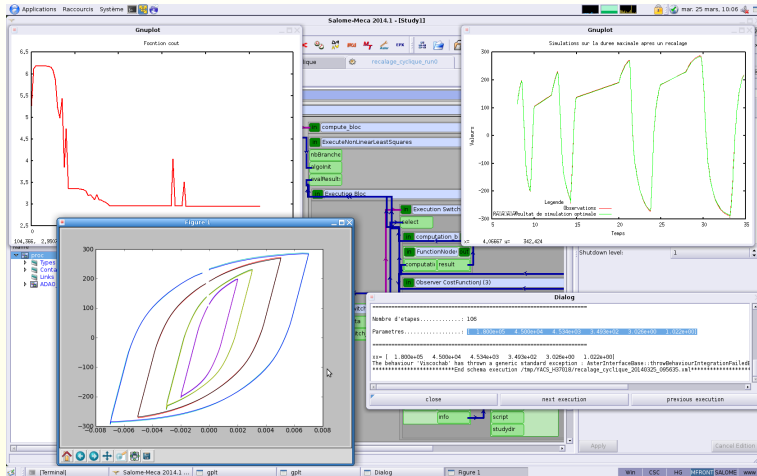
Utilisation : `mtest fichier.mtest`

exemples de simulations mtest

Loi de Chaboche
test cyclique



- recalage des propriétés matériau ;
- utilise Code_Aster+ mfront ou directement mtest ;

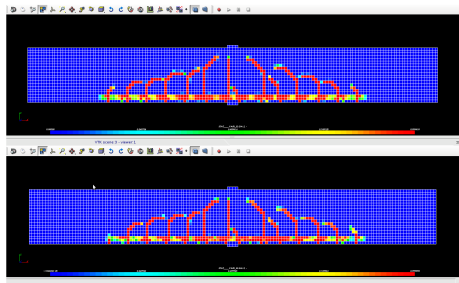
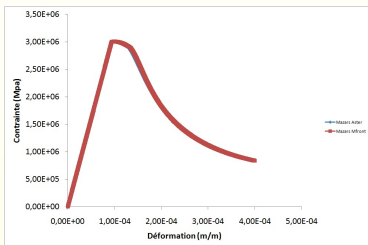


(pour plus de détail, voir ▶ [adao](#)).



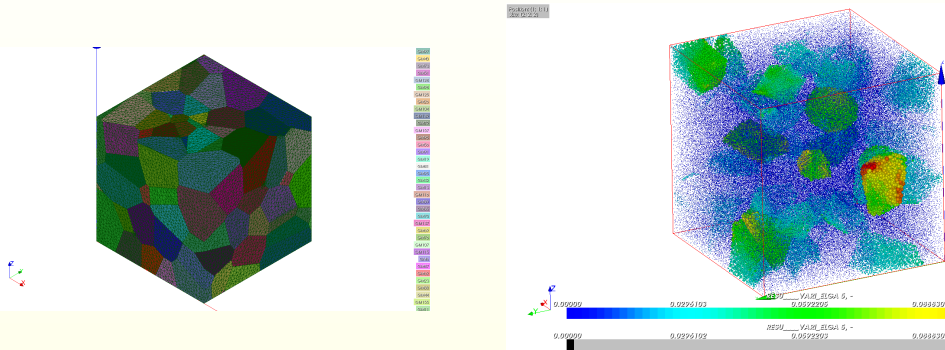
- loi de fluage tertiaire (avec endommagement) ▶ Hayhurst.mfront

Mazars



- loi de Mazars ▶ Mazars.mfront

lois monocristallines - MC—DD-CFC—DD-CC



- loi monocristalline, 172 grains ▶ monocystal.mfront

à vos claviers !

- 1 un premier exemple simple
 - une loi de Norton
 - discrétisation et développement `mfront`
 - premier test `mtest` et `Code_Aster`
- 2 ce que permet `mfront`
 - `mfront` ?
 - `algorithmesMfront`
 - K tangente
 - `mtest`
 - `adao`
 - exemples `mfront`
- 3 développement d'une loi pas-à-pas
 - loi élastoplastique de Chaboche
- 4 conclusions

formulation de la loi élastoplastique de Chaboche

Les équations du modèle sont résumées brièvement :

- contraintes déformations élastiques :

$$\underline{\sigma} = \underline{\mathbf{D}} : (\underline{\epsilon}^{\text{to}} - \underline{\epsilon}^{\text{p}})$$

- Critère de plasticité :

$$F(\underline{\sigma}, \underline{X}) = (\underline{\sigma} - \underline{X})_{\text{eq}} - R(p) \leq 0$$

- loi d'écoulement normale au critère :

$$\underline{\dot{\epsilon}}^{\text{p}} = \dot{p} \underline{n} \text{ avec } \underline{n} = \frac{3}{2} \frac{\underline{\sigma}^{\text{dev}} - \underline{X}}{(\underline{\sigma} - \underline{X})_{\text{eq}}}$$

- \underline{X} écrouissements cinématiques : $\underline{X} = \underline{X}_1 + \underline{X}_2 + \dots$;

- L'évolution de \underline{X}_i :

$$\underline{X}_i = \frac{2}{3} C_i \underline{\alpha}_i \text{ avec } : \underline{\dot{\alpha}}_i = \underline{\dot{\epsilon}}^{\text{p}} - \gamma_i \underline{\alpha}_i \dot{p} ;$$

- l'écrouissage isotrope $R(p)$ est défini par :

$$R(p) = R^{\infty} + (R^0 - R^{\infty}) \exp(-bp) ;$$

- paramètres $E, \nu, R^0, R^{\infty}, b, C_1, C_2, \dots, C_n, \gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n$

discrétisation de la loi élastoplastique de Chaboche

Les inconnues sont : $\Delta \underline{\epsilon}^{el}$; Δp ; $\Delta \underline{\alpha}_i$;

- Test : si

$$F^{el}(\underline{\sigma}, \underline{X}) = (\underline{\sigma}^{tr} - \underline{X}|_t)_{eq} - R(p|_t) < 0$$

avec :

$$\underline{\sigma}^{tr} = \underline{D} : (\underline{\epsilon}^{el}|_t + \Delta \underline{\epsilon}^{to})$$

alors la solution est élastique :

$$\Delta \underline{\epsilon}^p = \underline{0} \quad \Delta p = 0 \quad \Delta \underline{\alpha}_i = \underline{0}$$

- Sinon, il faut résoudre le système suivant :

$$F(\underline{\sigma}, \underline{X}) = 0 \quad \Leftrightarrow$$

$$\begin{cases} \underline{\sigma}|_{t+\Delta t} - \underline{X}|_{t+\Delta t})_{eq} - R(p(t + \Delta t)) = 0 \\ \Delta \underline{\alpha}_i - \Delta \underline{\epsilon}^p + \gamma_i(\underline{\alpha}_i + \theta \Delta \underline{\alpha}_i) \Delta p = \underline{0} \\ \Delta \underline{\epsilon}^{el} - \Delta \underline{\epsilon}^{to} + \Delta \underline{\epsilon}^p = \underline{0} \end{cases}$$

$$\text{où } \Delta \underline{\epsilon}^p = \Delta p \underline{n}|_{t+\Delta t}$$

```
@Parser Implicit;
@Behaviour Chaboche;
@Algorithm NewtonRaphson_NumericalJacobian;
@RequireStiffnessTensor;
@Theta 1. ;
@MaterialProperty stress young;
@MaterialProperty real nu;
@MaterialProperty real R_inf;
@MaterialProperty real R_0;
@MaterialProperty real b;
@MaterialProperty real C[2];
@MaterialProperty real g[2];
@StateVariable real p;
@StateVariable Stensor a[2];
@LocalVariable real Fel;
@InitLocalVars{ Stensor sigel=D*(eel+deto);
  for(unsigned short i=0;i!=2;++i){
    sigel-=C[i]*a[i]/1.5;}
  const real seqel = sigmaeq(sigel);
  const real Rpel = R_inf + (R_0-R_inf)*exp(-b*p) ;
  Fel = seqel - Rpel ; // prediction elastique}
@ComputeStress{ sig = D*eel;}
```

```
@Integrator{
  if (Fel > 0){          // solution plastique
    // Les variables suivies de _ sont en t+theta*dt
    const real p_ = p + theta*dp ;
    const real Rp_ = R_inf + (R_0-R_inf)*exp(-b*p_) ;
    Stensor a_[2];
    Stensor sr = deviator(sig);
    for(unsigned short i=0;i!=2;++i){
      a_[i]      = a[i]+theta*da[i];
      sr         -= C[i]*a_[i]/1.5;
    } // tenseur Sigma-X
    const stress seq = sigmaeq(sr);
    Stensor n = 1.5*sr/seq;
    feel = deel - deto + dp*n ;
    fp    = (seq-Rp_)/young; // pour normaliser
    for(unsigned short i=0;i!=2;++i){
      fa[i] = da[i] - dp*(n-g[i]*a_[i]);
    }
  } else {
    feel = deel - deto; // solution elastique }
}
```

opérateurs tangents

```
@TangentOperator{  
  if ((smt==ELASTIC) || (smt==SECANTOPERATOR)) {  
    Dt=D; // matrice elastique  
  } else if (smt==CONSISTANTTANGENTOPERATOR) {  
    Stensor4 Je;  
    getPartialJacobianInvert(Je);  
    Dt = D*Je; // matrice tangente coherente  
  }  
}
```

compilation :

```
mfront -obuild -interface=aster  
Chaboche.mfront
```

petit test : cycles de traction-compression

```
@Behaviour<aster> 'src/libAsterBehaviour.  
so' 'asterchaboche';
```

```
@MaterialProperty<constant> 'young'  
200000. ;
```

```
@MaterialProperty<constant> 'nu' 0.33 ;
```

```
@MaterialProperty<constant> 'R_inf' 50. ;
```

```
@MaterialProperty<constant> 'R 0' 30. ;
```

```
@MaterialProperty<constant> 'b' 20.;
```

```
@MaterialProperty<constant> 'C[0]'
187000.;
```

```
@MaterialProperty<constant> 'C[1]' 45000.;
```

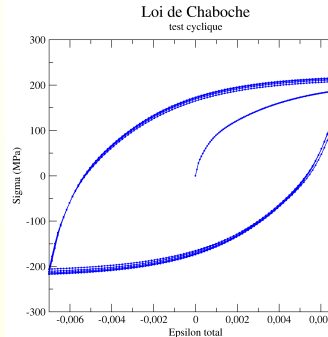
```
@MaterialProperty<constant> 'alpha[0]' 4460.;
```

```
@MaterialProperty<constant> 'g[11]' 340. ;
```

```
@ExternalStateVariable 'Temperature' 0.:
```

```
@Times {0.,5. in 1000};
```

@ImposedStrain 'EYY'

$$\{0.:0., 1.:0.007, 2.: -0.007, 3.:0.007, 4.: -0.007, 5.:0.007\};$$


exercice : modèle viscoplastique

Le critère de plasticité : $F(\sigma, X) = (\sigma - X)_{eq} - R(p) \leq 0$

est remplacé par : $\dot{p} = \langle \frac{F}{K} \rangle^m$ où : $\langle F \rangle = \max(0, F)$

Dans le fichier `mfront`,

```
fp=(seq_-Rp_)/young;
```

devient :

```
fp -= pow(F*UNsurK,m)*dt;
```

Les propriétés matériau ajoutées : `UNsurK` et `m`

et si cela plante ? Comment faire ?

- erreurs de compilation souvent explicites ;
 - Viscochab.mfront:94: error: 'F' was not declared in this scope
 - Viscochab.mfront:74: warning: unused variable 'Rp'
 - Viscochab.mfront:91: error: expected ',', ' or ';' before 'if' (oubli d'un ";" en fin de ligne)
- compilation avec `-debug` ;
- impression de variables `cout << "seq=" << seq << end; ;`
- compilation avec `CXXFLAGS='-g'` ;
- générer des fichiers mtest
`@AsterGenerateMTestFileOnFailure=true;`

petit bilan

- ajouts de nouveaux comportements : "very easy !";
- déjà dans la base de tests de Code_Aster !:

| nom de la loi de comportement | test Code_Aster |
|----------------------------------|-----------------|
| loi élastoplastique de Chaboche | mfron01a |
| loi viscoplastique de Chaboche | mfron01b |
| loi viscoplastique de Hayhurst | mfron02a,b |
| loi d'endommagement de Mazars | mfron02c,d,e |
| loi de fluage de béton Burger | mfron02f,g |
| loi cristalline Méric-Cailletaud | mfron03b,c,d |
| loi cristalline DD_CFC (IRRA) | mfron03e,f,g |
| loi cristalline DD_CC (IRRA) | mfron03h,i |
| loi meta-lema-ani phases méta | mfron03j-n |

tests de mfront : lois supplémentaires

- loi de LEMAÎTRE anisotrope :
`StrainHardeningCreep.mfront`
- lois d'endommagement : `Lorentz.mfront ,...;`
- lois CZM : `Tvergaard.mfront,...;`
- lois monocristallines en grandes déformations
`FiniteStrainMonoCristal.mfront`
- ...

72 lois de comportements dans la base de cas tests

contraintes planes (généralisées)

- déformation axiale $\underline{\epsilon}^{\text{to}}_z ==$ variable interne supplémentaire ;
- hypothèses :
 - la déformation élastique $\underline{\epsilon}^{\text{el}} ==$ variable interne ;
 - la déformation totale n'intervient que dans $f_{\underline{\epsilon}^{\text{el}}}$;
- partition des déformations :
$$f_{\underline{\epsilon}^{\text{el}}} = \Delta \underline{\epsilon}^{\text{el}} - \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}} - \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}}_z \vec{e}_z \otimes \vec{e}_z + \dots$$
- aucune des autres équations du système implicite n'est modifiée ;
- équation associée à $\underline{\epsilon}^{\text{to}}_z$: $f_{\underline{\epsilon}^{\text{to}}_z} = \frac{1}{E'} \sigma_z$
- contraintes planes généralisées : $f_{\underline{\epsilon}^{\text{to}}_z} = \frac{1}{E'} (\sigma_z - \sigma_z^{\text{équilibre}})$

perspectives

- ajouts de nouveaux analyseurs spécifiques :
 - plasticité/viscoplasticité isotrope compressible ;
- matrice tangente cohérente :
 - facile pour algorithmes spécifiques et implicites ;
 - pour l'intégration explicite ou par BROYDEN ? :
- support de lois mécaniques générales :
 - transformations finies (presque fini) ;
 - couplages de lois de fluage, d'endommagement ;
 - autres physiques : thermique non linéaire, métallurgie ;
 - mécanique des sols : Cam-Clay, Drucker-Prager, THM,...
 - lois à gradient ;
 - ... ;

- 5 algorithmes global
- 6 KtgtFromJ
- 7 lois particulières
 - loi de Hayhurst
 - loi de Mazars
 - un exemple de loi cristalline
 - loi meta-lema-ani
- 8 Propriétés matériau
- 9 contraintes planes
- 10 fonctionnement adao

équilibre mécanique : trouver $\Delta \vec{u}$ tel que :

- $\vec{R}(\Delta \vec{u}) = \vec{O}$ avec $\vec{R}(\Delta \vec{u}) = \vec{F}_i(\Delta \vec{u}) - \vec{F}_e$
- force interne élémentaire : $\vec{F}_i^{elem} = \sum_{i=1}^{N_G} (\underline{\sigma}_{t+\Delta t}(\Delta \underline{\epsilon}^{to}, \Delta t) : \underline{\underline{B}}) w_i$
- résolution par NEWTON-RAPHSON : $\Delta \vec{u}^{n+1} = \Delta \vec{u}^n - \underline{\underline{K}}^{-1} . \vec{R}(\Delta \vec{u}^n)$
- calcul de la raideur élémentaire : $\underline{\underline{K}}^e = \sum_{i=1}^{N_G} {}^t \underline{\underline{B}} : \frac{\partial \Delta \underline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{to}} : \underline{\underline{B}} w_i$ où

$\frac{\partial \Delta \underline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{to}}$ est la *matrice tangente cohérente*.

► algorithmesMfront

équilibre mécanique : trouver $\Delta \vec{u}$ tel que :

- $\vec{R}(\Delta \vec{u}) = \vec{O}$ avec $\vec{R}(\Delta \vec{u}) = \vec{F}_i(\Delta \vec{u}) - \vec{F}_e$
- force interne élémentaire : $\vec{F}_i^{elem} = \sum_{i=1}^{N_G} (\underline{\sigma}_{t+\Delta t}(\Delta \underline{\epsilon}^{to}, \Delta t) : \underline{\underline{B}}) w_i$
- résolution par NEWTON-RAPHSON : $\Delta \vec{u}^{n+1} = \Delta \vec{u}^n - \underline{\underline{K}}^{-1} . \vec{R}(\Delta \vec{u}^n)$
- calcul de la raideur élémentaire : $\underline{\underline{K}}^e = \sum_{i=1}^{N_G} {}^t \underline{\underline{B}} : \frac{\partial \Delta \underline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{to}} : \underline{\underline{B}} w_i$ où

$\frac{\partial \Delta \underline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{to}}$ est la *matrice tangente cohérente*.

► algorithmesMfront

équilibre mécanique : trouver $\Delta \vec{u}$ tel que :

- $\vec{R}(\Delta \vec{u}) = \vec{0}$ avec $\vec{R}(\Delta \vec{u}) = \vec{F}_i(\Delta \vec{u}) - \vec{F}_e$
- force interne élémentaire : $\vec{F}_i^{elem} = \sum_{i=1}^{N_G} (\underline{\sigma}_{t+\Delta t}(\Delta \underline{\epsilon}^{to}, \Delta t) : \underline{\mathbf{B}}) w_i$
- résolution par NEWTON-RAPHSON :

$$\Delta \vec{u}^{n+1} = \Delta \vec{u}^n - \left(\frac{\partial \vec{R}}{\partial \Delta \vec{u}} \bigg|_{\Delta \vec{u}^n} \right)^{-1} \cdot \vec{R}(\Delta \vec{u}^n) = \Delta \vec{u}^n - \underline{\mathbb{K}}^{-1} \cdot \vec{R}(\Delta \vec{u}^n)$$

- calcul de la raideur élémentaire : $\underline{\mathbb{K}}^e = \sum_{i=1}^{N_G} {}^t \underline{\mathbf{B}} : \frac{\partial \Delta \underline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{to}} : \underline{\mathbf{B}} w_i$ où

$\frac{\partial \Delta \underline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{to}}$ est la *matrice tangente cohérente*.

équilibre mécanique : trouver $\Delta \vec{u}$ tel que :

- $\vec{R}(\Delta \vec{u}) = \vec{O}$ avec $\vec{R}(\Delta \vec{u}) = \vec{F}_i(\Delta \vec{u}) - \vec{F}_e$
- force interne élémentaire : $\vec{F}_i^{elem} = \sum_{i=1}^{N_G} (\underline{\sigma}_{t+\Delta t}(\Delta \underline{\epsilon}^{to}, \Delta t) : \underline{\underline{B}}) w_i$
- résolution par NEWTON-RAPHSON : $\Delta \vec{u}^{n+1} = \Delta \vec{u}^n - \underline{\underline{K}}^{-1} . \vec{R}(\Delta \vec{u}^n)$
- calcul de la raideur élémentaire : $\underline{\underline{K}}^e = \sum_{i=1}^{N_G} {}^t \underline{\underline{B}} : \frac{\partial \Delta \underline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{to}} : \underline{\underline{B}} w_i$ où

$\frac{\partial \Delta \underline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{to}}$ est la *matrice tangente cohérente*.

ANNEXES : matrice tangente

- 5 algorithme global
- 6 KtgtFromJ**
- 7 lois particulières
 - loi de Hayhurst
 - loi de Mazars
 - un exemple de loi cristalline
 - loi meta-lema-ani
- 8 Propriétés matériau
- 9 contraintes planes
- 10 fonctionnement adao

une façon générique de calculer la tangente cohérente

Il faut calculer : $\frac{\partial \Delta \underline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}}} = \frac{\partial \underline{\sigma}}{\partial \underline{\epsilon}^{\text{el}}} \bigg|_{\underline{\epsilon}^{\text{el}} + \Delta \underline{\epsilon}^{\text{el}}} : \frac{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{\text{el}}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}}}$

On a résolu : $F(\Delta Y, \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}}) = 0$ avec : $[\Delta Y]^T = [\Delta \underline{\epsilon}^{\text{el}}, \Delta \alpha]$

Par différentiation : $\frac{\partial F}{\partial \Delta Y} d \Delta Y + \frac{\partial F}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}}} d \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}} = 0$

$\frac{\partial F}{\partial \Delta Y}$ est la jacobienne J , connue après la résolution.

Hyp. l'incrément de déformation $\Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}}$ n'apparaît que dans :

$$F_{\epsilon} = \Delta \underline{\epsilon}^{\text{el}} + \Delta \underline{\epsilon}_i^{\text{p}} - \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}} = 0$$

donc : $J d \Delta Y = - \frac{\partial F}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}}} d \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}} = \begin{pmatrix} d \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}} \\ 0 \end{pmatrix}$

Du 1er bloc on déduit : $d \Delta \underline{\epsilon}^{\text{el}} = J_{\underline{\epsilon}^{\text{el}}}^{-1} : d \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}}$ où $J_{\underline{\epsilon}^{\text{el}}}^{-1}$ est la partie supérieure gauche de J^{-1} .

Finalement, nous obtenons : $\frac{\partial \Delta \underline{\sigma}}{\partial \Delta \underline{\epsilon}^{\text{to}}} = D : J_{\underline{\epsilon}^{\text{el}}}^{-1}$

$J_{\underline{\epsilon}^{\text{el}}}^{-1}$ est calculée par **getPartialJacobianInvert** dans le bloc

- $\sigma = (1 - D) C \varepsilon^e$;
- $\underline{\varepsilon}^e = \underline{\varepsilon} - \dot{p} \underline{n}$ avec $\underline{n} = 1.5 \frac{\sigma^{dev}}{\sigma_{eq}}$;
- $\dot{p} = \varepsilon_0 \sinh \left(\frac{\sigma_{eq}(1-H)}{K(1-D)(1-\phi)} \right)$;
- $H = H_1 + H_2$;
- $\dot{H}_i = \frac{h_i}{\sigma_{eq}} (H_i^* - \delta_i H_i) \dot{p}$;
- $\dot{D} = A_0 \sinh \left(\frac{\alpha_D \langle tr(\sigma) \rangle_+ + \sigma_{eq} (1 - \alpha_D)}{\sigma_0} \right)$

implantation de la loi de Hayhurst —1/3

```
@Parser Implicit;  
@Behaviour Hayhurst;  
@IterMax 100 ;  
@MaterialProperty stress young;  
@MaterialProperty real nu;  
@MaterialProperty real rho;  
@MaterialProperty real alpha;  
@MaterialProperty real K;  
@MaterialProperty real epsi0;  
@MaterialProperty real sigma0;  
@MaterialProperty real h1;  
@MaterialProperty real h2;  
@MaterialProperty real H1star;  
@MaterialProperty real H2star;  
@MaterialProperty real A0;  
@MaterialProperty real alphaD;  
@MaterialProperty real delta1;  
@MaterialProperty real delta2;  
@MaterialProperty real sequid;  
@Includes{  
#include "TFEL/ Material /Lame.hxx"  
}
```

```
@StateVariable real    p;  
@StateVariable real    H1;  
@StateVariable real    H2;  
@StateVariable real    d;  
  
@LocalVariable real    lambda;  
@LocalVariable real    mu;  
@InitLocalVars{  using namespace tfel::material::lame;  
    lambda = computeLambda(young,nu);  
    mu = computeMu(young,nu);}  
  
@ComputeStress{  
    if (d > 1.-1.e-8){  
        sig= Stensor(0.);  
    } else {  
        sig = (1.-d)*(lambda*trace(eel)*Stensor::Id()+2*mu*  
        eel);  
    }  
}
```

implantation de la loi de Hayhurst —3/3

```
@Integrator{  real seq = sigmaeq(sig);
  Stensor sig0=lambda*trace(eel)*Stensor::Id()+2*mu*eel;
  real seq0 = sigmaeq(sig0);
  if(seq > 1.e-8*young){
    real H1_=H1+theta*dH1; real H2_=H2+theta*dH2;
    real d_=d+theta*dd; const real H_=H1_+H2_;
    real shp  = sinh(seq*(1-H_)/K/(1-(d_)));
    real chp  = sqrt(1.+shp*shp) ;
    real trsig=max(trace(sig),0.); const real inv_seq =
    1/seq;
    real shd= sinh((alphaD*trsig+(1-alphaD)*seq)/sigma0
    );
    real chd= sqrt(1.+shd*shd) ; const real dtrsde=(3.*
    lambda+2.*mu)*theta*(1.-d_)*trsig/trace(sig);
    Stensor n  = 1.5*deviator(sig)*inv_seq;
    feel += dp*n-deto;
    fp    = dp-epsi0*dt*shp;
    fH1   = dH1-h1*dp*(H1star-delta1*H1_)*inv_seq ;
    fH2   = dH2-h2*dp*(H2star-delta2*H2_)*inv_seq ;
```



```
@Parser DefaultParser;  
@Behaviour mazars;  
@MaterialProperty stress young;  
@MaterialProperty real nu;  
@MaterialProperty real Ac;  
@MaterialProperty real At;  
@MaterialProperty real Bc;  
@MaterialProperty real Bt;  
@MaterialProperty real k;  
@MaterialProperty real ed0;  
@ProvidesSymmetricTangentOperator;  
@Includes{#include "TFEL/ Material /Lame.hxx"}  
@StateVariable real d;  
@StateVariable real Y;  
@StateVariable real eeqcor;  
@LocalVariable real      lambda;  
@LocalVariable real      mu;  
@InitLocalVars{using namespace tfel::material::lame;  
    lambda = computeLambda(young,nu);  
    mu = computeMu(young,nu);}
```

implantation de la loi de Mazars —2/3

```
@Integrator{ using namespace tfel::material::lame;
  real e1,e2,e3;
  real s1,s2,s3;
  real ppe1,ppe2,ppe3;
  real pns1,pns2,pns3;
  real pps1,pps2,pps3;
  const Stensor e = eto+deto;
  const real tr = trace(e);
  const Stensor s0 = lambda*tr*Stensor::Id()+2*mu*e;
  const real dmax=0.99999;
  e.computeEigenValues(e1,e2,e3);
  // eigen values of s0
  s1 = 2*mu*e1+lambda*tr;
  s2 = 2*mu*e2+lambda*tr;
  s3 = 2*mu*e3+lambda*tr;
  const real sn = max(abs(s1),max(abs(s2),abs(s3)));
  ppe1=max(0.,e1);
  ppe2=max(0.,e2);
  ppe3=max(0.,e3);
  pps1=max(0.,s1);
  pps2=max(0.,s2);
  pps3=max(0.,s3);
```

implantation de la loi de Mazars —3/3

```
real r=1.;
if (sn>1.e-6*young){
    r=(pps1+pps2+pps3)/(abs(s1)+abs(s2)+abs(s3));
}
real gam=1. ;
if ((min(s1,min(s2,s3))<0.)&&(r==0.)){
    pns1=min(0.,s1);
    pns2=min(0.,s2);
    pns3=min(0.,s3);
    gam=-sqrt(pns1*pns1+pns2*pns2+pns3*pns3)/(pns1+pns2
    +pns3);
}
real eeqc= sqrt(ppe1*ppe1+ppe2*ppe2+ppe3*ppe3);
eeqcor=max(gam*eeqc,eeqcor);
real A=At*(2*r*r*(1.-2*k)-r*(1-4*k))+Ac*(2*r*r-3*r+1);
real B=r*r*Bt+(1-r*r)*Bc;
real Y1=max(ed0,eeqcor);
Y=max(Y1,Y);
d=max(d,1-(1-A)*ed0/Y-A*exp(-B*(Y-ed0)));
d=min(dmax,d);
sig = (1.-d)*s0;
```

expression d'une loi cristalline

- $\Delta \underline{\varepsilon}^e = \Delta \underline{\varepsilon} - \Delta \underline{\varepsilon}^p$
- $\Delta \underline{\varepsilon}^p$ est déduit des glissements de chaque système :
$$\Delta \underline{\varepsilon}^p = \sum_{s=1,12} \Delta \gamma_s \underline{M}_s$$
- Ceux-ci sont obtenus pour chaque système de glissement par : $\Delta \gamma_s = \Delta p_s \operatorname{sgn}(\tau_s - C \alpha_s)$ avec $\Delta p_s = \Delta t \left\langle \frac{|\tau_s - C \alpha_s| - R(p_s)}{K} \right\rangle^m$
- Ecrouissage isotrope :
$$R(p_s) = R_0 + Q \sum_r h_{sr} (1 - \exp(-b p_r))$$

 h_{sr} matrice d'interaction entre systèmes.
- Ecrouissage cinématique : $\Delta \alpha_s = \Delta \gamma_s - D \alpha_s \Delta p_s$
- Avec : $\tau_s = \underline{\sigma} : \underline{M}_s = \underline{\sigma} : \frac{1}{2} (\underline{m}_s \otimes \underline{n}_s + \underline{n}_s \otimes \underline{m}_s)$
 - \underline{n}_s et \underline{m}_s sont les normales et directions de glissement.
 - L'élasticité peut être isotrope ou orthotrope : $\underline{\sigma} = \underline{\underline{D}}(\underline{\varepsilon}^e)$

implantation d'une loi cristalline —1/3

```
@Parser      Implicit ;
@Behaviour   monocystal ;
@Algorithm   NewtonRaphson_NumericalJacobian ;
@OrthotropicBehaviour ;
@RequireStiffnessTensor ;
@MaterialProperty real m ;
@MaterialProperty real K ;
@MaterialProperty real C ;
@MaterialProperty real R0 ;
@MaterialProperty real Q ;
@MaterialProperty real b ;
@MaterialProperty real d1 ;
@StateVariable      real g[12] ;
@AuxiliaryStateVariable real p[12] ;
@AuxiliaryStateVariable real a[12] ;
@TangentOperator{
    Stensor4 Je ;
    getPartialJacobianInvert(Je) ;
    Dt = D*Je ; }
@Import "MonoCrystal_CFC_SlidingSystems.mfront" ;
@Import "MonoCrystal_InteractionMatrix.mfront" ;
@ComputeStress{ sig = D*eel ; }
```

```

@Integrator{ StrainTensor vesp(real(0));
  real tau[12], vp[12], va[12], ag[12];
  real tma[12], tmR[12], Rp[12], pe[12] ;
  for(unsigned short i=0;i!=12;++i){
    ag[i] = abs(dg[i]);
    pe[i] = Q*(1.-exp(-b*(p[i]+theta*ag[i]))) ; }
  for(unsigned short i=0;i!=12;++i){
    Rp[i] = R0 ;
    for(unsigned short j=0;j!=12;++j){
      Rp[i] +=mh(i,j)*pe[j] ; }
    tau[i] = mus[i] | sig ;
    va[i] = (dg[i]-d1*a[i]*ag[i])/(1.+d1*theta*ag[i]);
    tma[i] = tau[i]-C*(a[i]+theta*va[i]) ;
    tmR[i] = abs(tma[i])-Rp[i] ;
    if (tmR[i]>0.){real sgn=tma[i]/abs(tma[i]);
      vp[i] = dt*sgn*pow((tmR[i]/K),m); }
    else{ vp[i]=0.; }
    vesp+=vp[i]*mus[i] ; }
  feel += vesp-deto;
  for(unsigned short i=0;i!=12;++i){

```

implantation d'une loi cristalline —3/3

```
    fg[i] -= vp[i]; }  
}  
@UpdateAuxiliaryStateVars{  
for(unsigned short i=0;i!=12;++i){  
    p[i]+=abs(dg[i]);  
    a[i]+=(dg[i]-d1*a[i]*abs(dg[i]))/(1.+d1*abs(dg[i]));}}
```

```
// MonoCristal_CFC_SlidingSystems  
@LocalVariable tfel::math::tvector<12,StrainStensor> mus  
;  
@InitLocalVariables{  
    const real nx[12]={ 1.0,1.0,1.0, 1.0, 1.0,  
        1.0,-1.0,-1.0,-1.0,-1.0,-1.0,-1.0};  
    const real ny[12]={ 1.0,1.0,1.0,-1.0,-1.0,-1.0, 1.0,  
        1.0, 1.0,-1.0,-1.0,-1.0};  
    const real nz[12]={ 1.0,1.0,1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0,  
        1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0};  
    const real mx[12]={-1.0, 0.0,-1.0,-1.0,0.0,1.0,  
        0.0,1.0,1.0,-1.0,1.0,0.0};
```

- $\Delta \varepsilon^e - \Delta \varepsilon + \Delta p \underline{n} = 0$
- $\sqrt{\underline{\sigma} : \underline{\underline{\mathbf{M}}} : \underline{\sigma}} - \sum_{i=1,3} f_i[Z] \sigma_{vi} = 0$

avec :

$$\sigma_{vi} = a_i \left(e^{Q_i/T} \right)^{1/n_i} (p^- + \Delta p)^{m_i} \left(\frac{\Delta p}{\Delta t} \right)^{1/n_i}$$


```
@Parser      Implicit ;
@Behaviour   metalemani ;
@Includes{   #include <TFEL/ Material/ Hill.hxx>
              #include <TFEL/ Material/ Lamé.hxx>
}
@OrthotropicBehaviour ;
@Algorithm   NewtonRaphson_NumericalJacobian ;
@Theta 1.; @Epsilon 1.e-10;
@MaterialProperty real young;
young.setGlossaryName( "YoungModulus" );
@MaterialProperty real nu;
nu.setGlossaryName( "PoissonRatio" );
@MaterialProperty real a[3];
@MaterialProperty real m[3];
@MaterialProperty real pn[3];
@MaterialProperty real Q[3];
@MaterialProperty real M1[6];
@MaterialProperty real M3[6];
@StateVariable real p;
@AuxiliaryStateVariable real seq;
@AuxiliaryStateVariable real svi[3];
```

```

@LocalVariable stress lambda;
@LocalVariable stress mu;
@LocalVariable tfel::math::st2tost2<N,real> H;
@LocalVariable real T_ ;
@LocalVariable real invn[3], f[3], gamma[3], sv[3] ;
// variables de commande aster
@ExternalStateVariable real SECH,HYDR,IRRA,NEUT1,NEUT2,
CORR,ALPHPUR,ALPHBETA;
@IsTangentOperatorSymmetric true;
@TangentOperator{using namespace tfel::material::lame;
    StiffnessTensor Hooke;      Stensor4 Je;
    computeElasticStiffness<N,Type>::exe(Hooke,lambda,mu
);
    getPartialJacobianInvert(Je);
    Dt = Hooke*Je; }
@InitLocalVariables{
    using namespace tfel::material::lame;
    lambda = computeLambda(young,nu);
    mu = computeMu(young,nu);
    // proportion en phase alpha en milieu de pas de temps
    const real Z = min(max(ALPHPUR + theta*dALPHPUR+
        ALPHBETA + theta*dALPHBETA,0.),1.);

```

```

// fonctions f
if (Z >= 0.99) { f[0]=1. ;
} else if (Z >= 0.9) { f[0] = (Z-0.9)/0.09 ;
} else { f[0] = 0. ; }

if (Z >= 0.1) { f[2]=0. ;
} else if (Z >= 0.01) { f[2] = (0.1-Z)/0.09 ;
} else { f[2] = 1. ; }

if (Z >= 0.99) { f[1]=0. ;
} else if (Z >= 0.9) { f[1] = 1.0-(Z-0.9)/0.09 ;
} else if (Z >= 0.1) { f[1] = 1.0 ;
} else if (Z >= 0.01) { f[1] = 1.0-(0.1-Z)/0.09 ;
} else { f[1] = 0. ; }

// Temperature Aster en Celsius
T_ = 273.0 + T + theta * dT ;
for(unsigned short i=0;i!=3;++i){
    invn[i] = 1.0 / pn[i] ;
    gamma[i] = a[i]* exp(Q[i]/T_*invn[i]) ; }

```

```

// correspondance M aster (repere x,y,z) et H
real M[6];
if (Z >= 0.99) {for(unsigned short i=0;i!=6;++i)
  {M[i]=M1[i];}}
} else if (Z >= 0.01) {for(unsigned short i=0;i!=6;++i)
  {M[i]=Z*M1[i]+(1.-Z)*M3[i];}}
} else {for(unsigned short i=0;i!=6;++i)
  {M[i]=M3[i];}}
const real H_F = 0.5*( M[0]+M[1]-M[2]);
const real H_G = 0.5*(-M[0]+M[1]+M[2]);
const real H_H = 0.5*( M[0]-M[1]+M[2]);
const real H_L = 2.0*M[3];
const real H_M = 2.0*M[4];
const real H_N = 2.0*M[5];
H = hillTensor<N,real>(H_F,H_G,H_H,H_L,H_M,H_N);
}
@ComputeStress{
  sig = lambda*trace(eel)*Stensor::Id()+2*mu*eel;}
@Integrator{
  const real sigeq = sqrt(sig|H*sig);
  real p_=p+theta*dp ;
  real sigv = 0. ; real pm[3]; real dpn[3] ;

```

```

for(unsigned short i=0;i!=3;++i){
    pm[i] = (p_ > 0.) ? pow(p_,m[i])           : 0.;
    dpn[i] = (dp > 0.) ? pow((dp/dt),invn[i]) : 0. ;
    sv[i]=gamma[i]*pm[i]*dpn[i] ;
    sigv += f[i]*sv[i] ; }
Stensor  n(0.);
if(sigeq > 1.e-10*young){ n= (H*sig)/sigeq; }
feel += dp*n-deto;
fp     = (sigeq-sigv)/young;
}
@UpdateAuxiliaryStateVars{
    for(unsigned short i=0;i!=3;++i){ svi[i]=sv[i] ; }
}

```

gestion des propriétés matériau

- 5 algorithme global
- 6 KtgtFromJ
- 7 lois particulières
 - loi de Hayhurst
 - loi de Mazars
 - un exemple de loi cristalline
 - loi meta-lema-ani
- 8 Propriétés matériau**
- 9 contraintes planes
- 10 fonctionnement adao

Exemple en mfront

```
@Parser    MaterialLaw ;
@Material  Inconel600 ;
@Law       YoungModulus ;
@Input TK;

TK.setGlossaryName( "Temperature" );

@Output E;
@PhysicalBounds TK in [0:*[;
@Bounds TK in [0:*[;

@Function
{
  const real TC = TK-273.15;
  E=(-3.1636e-3*TC*TC-3.8654*TC+2.1421e+4)*1e7;
}
```


gestion des contraintes planes

- 5 algorithme global
- 6 KtgtFromJ
- 7 lois particulières
 - loi de Hayhurst
 - loi de Mazars
 - un exemple de loi cristalline
 - loi meta-lema-ani
- 8 Propriétés matériau
- 9 contraintes planes**
- 10 fonctionnement adao

contraintes planes (généralisées) —1/3

- exemple de la loi de NORTON.
- nouvelle variable interne : déformation axiale ϵ_z^{to} ,
- contrainte imposée variable externe

```
@StateVariable<PlaneStress> strain etozz;  
PlaneStress::etozz.setGlossaryName("AxialStrain");  
  
@StateVariable<AxisymmetricalGeneralisedPlaneStress>  
    strain etozz;  
AxisymmetricalGeneralisedPlaneStress::etozz.  
    setGlossaryName("AxialStrain");  
@ExternalStateVariable<  
    AxisymmetricalGeneralisedPlaneStress> stress sigzz;  
AxisymmetricalGeneralisedPlaneStress::sigzz.  
    setGlossaryName("AxialStress");
```

contraintes planes (généralisées) —2/3

Partie spécifique aux contraintes planes :

```
@Integrator<PlaneStress ,Append ,AtEnd>{  
  // the plane stress equation is satisfied at the end  
  // of the time  
  // step  
  const stress szz = (lambda+2*mu)*(eel(2)+deel(2))+  
    lambda*(eel(0)+deel(0)+eel(1)+deel(1));  
  fetozz    = szz/young;  
  // modification of the partition of strain  
  feel(2) -= detozz;  
  // jacobian  
  dfeel_ddetozz(2)=-1;  
  dfetozz_ddetozz  = real(0);  
  dfetozz_ddeel(2) = (lambda+2*mu)/young;  
  dfetozz_ddeel(0) = lambda/young;  
  dfetozz_ddeel(1) = lambda/young;  
}
```

contraintes planes (généralisées) —3/3

Partie spécifique aux contraintes planes généralisées :

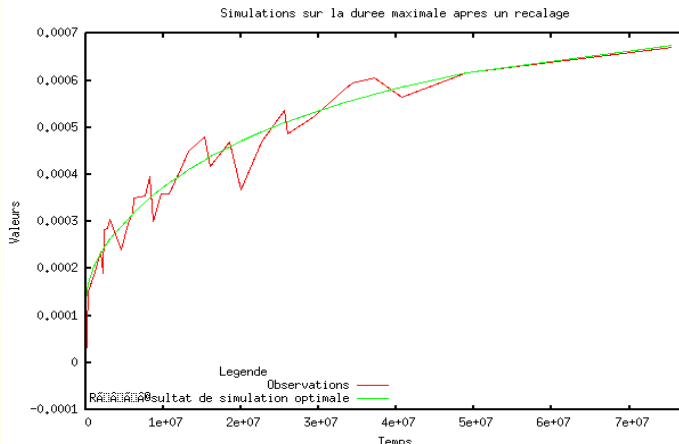
```
@Integrator<AxisymmetricalGeneralisedPlaneStress , Append,
  AtEnd>{
  // plane stress equation is satisfied at end
  const stress szz = (lambda+2*mu)*(eel(1)+deel(1))+
    lambda*(eel(0)+deel(0)+eel(2)+deel(2));
  fetozz    = (szz-sigzz-dsigzz)/young;
  // modification of the partition of strain
  feel(1) -= detozz;
  // jacobian
  dfeel_ddetozz(1)=-1;
  dfetozz_ddetozz  = real(0);
  dfetozz_ddeel(1) = (lambda+2*mu)/young;
  dfetozz_ddeel(0) = lambda/young;
  dfetozz_ddeel(2) = lambda/young;
}
```

adao

- 5 algorithme global
- 6 KtgtFromJ
- 7 lois particulières
 - loi de Hayhurst
 - loi de Mazars
 - un exemple de loi cristalline
 - loi meta-lema-ani
- 8 Propriétés matériau
- 9 contraintes planes
- 10 **fonctionnement adao**

principe d'Adao

- algorithmes d'optimisation pour trouver les paramètres X ;
- qui minimisent l'écart $F = Y^{obs} - H(X)$;
- Y^{obs} valeurs observées (expérimentales, ou autre) ;
- $H(X)$ valeurs simulées (par mtest ou Code_Aster ...) ;



appel de mtest(python) par Adao

```
t = temps_instants
t[1] = 1.e-1
```

```
m = MTest()  
setVerboseMode(VerboseLevel.VERBOSE_QUIET)  
m.setPredictionPolicy(PredictionPolicy.  
LINEARPREDICTION)
```

```
m.setMaterialProperty('Cini', 1.)
m.setExternalStateVariable("Temperature", 300.)
m.setExternalStateVariable("C", 1.)
m.setImposedStress('SXX', {0.: 0., 1.: 4E6, 3.E7: 4
E6})
s = MTestCurrentState()
wk = MTestWorkSpace()
m.completeInitialisation()
m.initializeCurrentState(s)
m.initializeWorkSpace(wk)
YY1 = [0]
for i in range(0, len(t) - 1):
```