

Manuel de Référence
Fascicule R5.03 : Mécanique non linéaire
Document R5.03.11

Comportements élastoviscoplastiques mono et polycristallins

Résumé :

Le but de ce document est de décrire l'intégration des comportements mono et polycristallins, en spécifiant de façon indépendante le critère, l'écoulement, l'écrouissage etc.

On traite ici de l'intégration de ces lois de comportement associées à des systèmes de glissement correspondant aux familles cristallines habituelles. Cette intégration peut se faire de façon explicite (méthode de Runge_Kutta avec contrôle de la précision et redécoupage local du pas de temps) ou de façon implicite (méthode de Newton avec redécoupage local du pas de temps).

Ces comportements peuvent être employés pour le calcul de microstructures (maillage d'un agrégat, avec représentation géométrique de chaque grain physique) ou pour le calcul de poly-cristaux, milieux « homogénéisé » possédant en tout point matériel (ou point d'intégration ou de calcul) plusieurs phases simultanées, dans des proportions variables.

Table des matières

1	Introduction	3
2	Formulation des comportements mono et poly-cristallins	3
2.1	Relations de comportement du mono-cristal	3
2.1.1	Exemples de relations d'écoulement	4
2.1.2	Exemples de relations d'écrouissage cinématique	5
2.1.3	Exemples de relations d'écrouissage isotrope	5
2.2	Systèmes de glissement et comportement global du monocristal	5
2.3	Comportement du polycristal homogénéisé	6
2.3.1	Rappel de l'existant	6
2.3.2	Comportement de type POLYCRISTAL	6
2.3.2.1	Relation de changement d'échelle	7
3	Intégration locale et mise en œuvre numérique	8
3.1	Système d'équations à résoudre	8
3.1.1	Comportement de type MONOCRISTAL	8
3.1.2	Comportement de type POLYCRISTAL	9
3.2	Résolution implicite	10
3.2.1	Opérateur de comportement tangent	11
3.3	Résolution explicite	12
4	Variables internes	13
4.1	Cas du monocristal	13
4.2	Cas du polycristal	13
5	Implantation numérique dans le <i>Code_Aster</i>	14
6	Utilisation	15
6.1	Cas du monocristal	15
6.2	Cas du polycristal	17
6.3	Exemple	17
7	Bibliographie	20
Annexe 1	Expression du Jacobien des équations élastoviscoplastiques intégrées	21
Annexe 2	Evaluation de l'opérateur tangent cohérent	24

1 Introduction

L'objectif général du développement des fonctionnalités « micro-macro » dans le *Code_Aster* est de pouvoir intégrer de façon modulaire des modèles à plusieurs échelles (avec une possibilité de choix des lois de comportements, des règles de localisation, des types de microstructures, du lien entre le point d'intégration dans l'élément et le « module loi de comportement »). Ce qui peut mener à des types de calcul différents (calculs poly-cristallins, utilisation d'une loi de type *Berveiller-Zaoui* ou d'une loi type « règle en β », calculs d'agrégats multi-cristallins avec maillage d'une microstructure, ...).

La démarche présentée ici consiste à permettre le découplage, par modularité, des différents éléments qui constituent une loi de comportement. Cette souplesse est accessible directement à l'utilisateur. De plus, pour le développeur, il est possible d'ajouter une loi de comportement (macroscopique ou microscopique) en définissant simplement les dérivées partielles du problème, en termes de calcul des contraintes et de variables internes. Ceci est suffisant si on se contente d'une intégration explicite ; pour une intégration implicite, il faut définir en plus l'opérateur tangent.

Plus précisément, pour l'aspect comportement de monocristal, la modularité est totale au niveau du calcul « point matériel » : le matériau, représenté par quelques équations homogènes dans le cas des modèles phénoménologiques macroscopiques, est maintenant plus complexe : pour un élément fini donné, il est constitué d'un monocristal possédant une orientation données, et possédant un certain nombre de systèmes de glissement. Chaque famille de systèmes de glissement possède sa propre loi de comportement locale.

Dans le cas d'un modèle poly-cristallin, on suppose qu'en un point matériel (point d'intégration d'un élément fini), plusieurs phases métallurgiques sont présentes simultanément, chaque phase pouvant être constituée de grains avec des orientations données, chaque grain possédant un certain nombre de systèmes de glissement (pas forcément les mêmes pour chaque phase). La représentation du matériau peut également inclure la forme des grains et le type de phases en présence, induisant tel ou tel type de règle de transition d'échelle. Chaque famille de systèmes de glissement possède sa propre loi de comportement locale. On trouve une séparation entre la structure cristallographique, la loi de viscoplasticité cristalline et les règles de transition d'échelles. Ce mode de séparation est aussi étendu à la loi de viscoplasticité proprement dite, avec une séparation entre l'élasticité, le critère et la loi d'écoulement. La représentation du matériau peut également inclure la forme des grains et le type de phases en présence, induisant tel ou tel type de règle de transition d'échelle.

2 Formulation des comportements mono et poly-cristallins

2.1 Relations de comportement du mono-cristal

Le comportement lié à chaque système de glissement d'un monocristal est (dans l'ensemble des comportements envisagés) de type élasto-visco-plastique. Du fait que l'on s'intéresse à chaque fois à une seule direction de glissement, le comportement est *mono dimensionnel*. Il peut se décomposer en trois types d'équations :

- Relation d'écoulement :

$$\dot{\gamma}_s = g(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s), \text{ avec, } \dot{p}_s = |\dot{\gamma}_s| \text{ et}$$

pour un comportement élastoplastique un critère du type : $F(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s) \leq 0$ et $F \cdot \dot{p}_s = 0$

pour un comportement élasto-viscoplastique, $\dot{p}_s = f(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s)$

- Evolution de l'écrouissage cinématique : $\dot{\alpha}_s = h(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s)$
- Evolution de l'écrouissage isotrope défini par une fonction : $R(p_s)$

Ces relations deviennent, après discrétisation en temps:

- Relation d'écoulement :

$$\Delta\gamma_s = g(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s), \text{ avec, } \Delta p_s = |\Delta\gamma_s|$$

pour un comportement élastoplastique un critère du type : $F(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s) \leq 0$ et $F \cdot \Delta p_s = 0$

et pour un comportement élasto-viscoplastique, $\Delta p_s = f(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s) \Delta t$

- Evolution de l'écrouissage cinématique : $\Delta\alpha_s = h(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s)$
- Evolution de l'écrouissage isotrope : $R(p_s)$

Les quantités $(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s)$ sont évaluées à l'instant courant pour une discrétisation implicite et à l'instant précédent pour une discrétisation explicite.

Pour fixer les idées, voici des exemples de relations d'écoulement viscoplastique ou élastoplastique, et d'écrouissage. Les noms de ces relations correspondent à leur appellation dans la commande `DEFI_MATERIAU [U4.43.01]`.

2.1.1 Exemples de relations d'écoulement

ECOU_VISC1

$$\Delta\gamma_s = g(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s) = \Delta p_s \frac{\tau_s - c\alpha_s}{|\tau_s - c\alpha_s|}$$

$$\Delta p_s = \Delta t \cdot \left\langle \frac{|\tau_s - c\alpha_s| - R_s(p_s)}{k} \right\rangle^n$$

Les paramètres sont : c, k, n .

ECOU_VISC2

$$\Delta\gamma_s = g(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s) = \Delta p_s \frac{\tau_s - c\alpha_s - a\gamma_s}{|\tau_s - c\alpha_s - a\gamma_s|}$$

$$\Delta p_s = \left\langle \frac{|\tau_s - c\alpha_s - a\gamma_s| - R_s(p_s) + \frac{d}{2c}(c\alpha_s)^2}{k} \right\rangle^n$$

Les paramètres sont : c, k, n, a, d .

ECOU_VISC3

$$\Delta\gamma_s = g(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s) = \dot{\gamma}_0^* \exp\left(\frac{-\Delta G_0}{kT}\right) \exp\left(\frac{\langle |\tau_s| - \tau_\mu \rangle \Delta V^*}{kT}\right) \cdot \frac{\tau_s}{|\tau_s|},$$

Les paramètres sont : $k, \tau_\mu, \dot{\gamma}_0^*, \Delta G_0, \Delta V^*$

ECOU_PLAS1

$$\begin{aligned} F(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s) &= |\tau_s - c\alpha_s| - R_s(p_s) \leq 0, \\ F.\Delta p_s &= 0, \\ \Delta\gamma_s &= \Delta p_s \frac{\partial F}{\partial \tau_s} \end{aligned}$$

Le paramètre associé est : c .

2.1.2 Exemples de relations d'écrouissage cinématique

ECRO_CINE1

$$\Delta\alpha_s = h(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s) = \Delta\gamma_s - d\alpha_s\Delta p_s$$

Le paramètre est : d .

ECRO_CINE2

$$\Delta\alpha_s = h(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s) = \Delta\gamma_s - d\alpha_s\Delta p_s - \left(\frac{|c\alpha_s|}{M}\right)^m \frac{\alpha_s}{|\alpha_s|}$$

Les paramètres étant alors : d, M, m, c .

2.1.3 Exemples de relations d'écrouissage isotrope

On prenant une forme très simple de la matrice \mathbf{h} traduisant l'interaction entre les systèmes de glissement actifs, l'écrouissage isotrope peut être de la forme :

ECRO_ISOT1

$$R_s(p_s) = R_0 + Q \left(\sum_{r=1}^N h_{sr} (1 - e^{-bp_r}) \right)$$

avec :

$$h_{sr} = (1 - \delta_{sr}) + \delta_{sr}$$

Les paramètres sont : R_0, Q, b, h .

ECRO_ISOT2

$$R_s(p) = R_0 + Q_1 \left(\sum_{sg} h_{rs} q^{1s} \right) + Q_2 q^{2s}$$

avec :

$$dq^{is} = b_i (1 - q^{is}) dp$$

Les paramètres sont : R_0, Q_1, b_1, h, Q_2 .

2.2 Systèmes de glissement et comportement global du monocristal

Un monocristal est composé de une ou plusieurs familles de systèmes de glissement, (cubique, octaédrique, basal, prismatique,...), chaque famille comprenant un certain nombre de systèmes (12 pour la famille octaédrique par exemple).

A chaque famille de système de glissement sont associés une loi d'écoulement, un type d'écrouissage cinématique et isotrope, et des valeurs des paramètres pour ces lois. En d'autres termes, on ne prévoit pas de faire varier les relations de comportement ou les coefficients au sein d'un même famille de systèmes de glissement. Par contre, d'une famille à l'autre, les lois de comportement peuvent changer, ainsi que les valeurs des paramètres.

Un système de glissement est déterminé par le tenseur d'orientation \mathbf{m}^s , construit à partir des définitions cristallographiques de :

- la direction de glissement (définie par le vecteur unitaire \mathbf{l})
- et de la normale au plan qui glisse (définie par le vecteur unitaire \mathbf{n}).

$$\mathbf{m}_{ij}^s = \frac{1}{2}(\mathbf{n}_i \otimes \mathbf{l}_j + \mathbf{l}_j \otimes \mathbf{n}_i)$$

Du point de vue du comportement au point matériel, ce tenseur intervient pour le calcul de la scission réduite $\tau^s = \sum_{ij} \mathbf{m}_{ij}^s$ et celui de la vitesse de déformation viscoplastique globale E^{vp} , définie à partir de la connaissance des vitesses de glissement $\dot{\gamma}^s$ pour tous les systèmes de glissement : $\dot{E}_{ij}^{vp} = \sum_{s \in g} \mathbf{m}_{ij}^s \dot{\gamma}^s$

De plus, le monocristal peut être orienté par rapport aux axes globaux de définition des coordonnées. Cette orientation est définie pour chaque maille ou groupe de mailles (typiquement pour chaque grain) par la donnée de 3 angles nautiques. Les composantes du tenseur d'orientation \mathbf{m}^s , défini dans le repère lié au monocristal, sont alors exprimées dans le repère global en utilisant ces angles nautiques.

2.3 Comportement du polycristal homogénéisé

Dans le cas de poly-cristal homogénéisé, il faut définir chaque phase mono-cristalline par son orientation, sa proportion (fraction volumique) et le comportement associé. Il faut de plus définir une règle de localisation.

Le comportement mono-cristallin est construit comme précédemment à partir du comportement elasto-visco-plastique précédent et de la donnée de familles de systèmes de glissement.

2.3.1 Rappel de l'existant

Le *Code_Aster* dispose, depuis la version 4, d'une seule loi de comportement poly-cristalline (POLY_CFC), spécifique aux aciers C.F.C, (donc possédant obligatoirement 12 systèmes de glissement), et limitée à 40 grains (40 phases définies chacune par une fraction volumique et une orientation). La loi de comportement est fixée (élasto-visco-plasticité, avec écrouissage cinématique non linéaire), et les 2 méthodes de localisation et d'homogénéisation sont celle de Berveiller-Zaoui, et celle de Pilvin-Cailletaud. L'introduction des orientations des phases, des fractions volumiques et des orientations des systèmes de glissement se fait à l'aide de l'opérateur `DEFI_TEXTURE`. Cet opérateur crée une table, qui est fournie à `DEFI_MATERIAU`, en compléments des paramètres de la loi de comportement [R5.03.13]. Ceci est validé dans le test SSNV125.

2.3.2 Comportement de type POLYCRISTAL

En plus du comportement monocristallin décrit précédemment, on ajoute une échelle de modélisation, qui représente celle des phases.

Au niveau d'un point de Gauss, on a toujours les relations d'élasticité sur les tenseurs globaux (homogènes) :

- déformation totale macroscopique E
- déformation viscoplastique macroscopique E^{vp}
- contrainte macroscopique : Σ

$$\Sigma = D(E - E^{th} - E^{vp})$$

- De plus, connaissant l'ensemble des variables internes relatives aux systèmes de glissement de chaque phase, les paramètres de comportement de chaque phase, les orientations et fractions volumiques de chaque phase, et le type de méthode de localisation,
 - pour chaque phase monocristalline (ou « grain »), définie par une orientation et une proportion f_g , une relation de localisation des contraintes, de la forme générale (à exprimer dans le repère local de chaque phase)

$$\sigma_g = L(\Sigma, E^{vp}, \varepsilon_g^{vp}, \beta_g)$$

et pour chaque système de glissement de chaque phase, des relations de comportement relatives à chaque système de glissement, similaires au cas du monocristal :

- Relation d'écoulement :
 $\dot{\gamma}_s = g(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s)$, avec, $\dot{p}_s = |\dot{\gamma}_s|$ et $\dot{p}_s = f(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s)$
- Evolution de l'écrouissage cinématique : $\dot{\alpha}_s = h(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s)$
- Evolution de l'écrouissage isotrope défini par une fonction : $R(p_s)$
- Déformations viscoplastiques de la phase : $\dot{\varepsilon}_{ij}^{vp_g} = \sum_{s \in g} m_{ij}^s \dot{\gamma}_s$

Il reste alors les équations d'homogénéisation : $\dot{E}^{vp} = \sum_g f_g \dot{\varepsilon}_g^{vp}$

2.3.2.1 Relation de changement d'échelle

Deux relations de localisation de type $\sigma_g = L(\Sigma, E^{vp}, \varepsilon_g^{vp}, \beta_g)$ sont disponibles dans la version actuelle :

- La relation de Berveiller-Zaoui [bib5] établie sur la notion d'autocohérence. Cette relation est validée sous certaines conditions, à savoir : isotropie du matériau, comportement élastique homogène et chargement monotone :

$$\sigma_{ij}^g = \Sigma_{ij} + \alpha \mu (\mathbf{E}_{ij}^{vp} - \varepsilon_{ij}^{vp_g}) \quad \frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3}{2} \mu \frac{\|E_{ij}^{vp}\|}{J_2(\Sigma_{ij})}$$

- La deuxième relation, développée plus particulièrement pour des chargements cycliques [bib4] permet de donner une bonne description pour schématiser les interactions entre les grains :

$$\sigma_{ij}^g = \Sigma_{ij} + \mu (\mathbf{B}_{ij} - \beta_{ij}^g) \quad \mathbf{B}_{ij} = \sum_g f_g \beta_{ij}^g$$

$$\dot{\beta}_{ij}^g = \dot{\varepsilon}_{ij}^{vp_g} - D(\beta_{ij}^g - \varepsilon_{ij}^{vp_g}) \parallel \dot{\varepsilon}_{ij}^{vp_g} \parallel$$

où D et δ sont des paramètres caractéristiques du matériau et de la température.

3 Intégration locale et mise en œuvre numérique

3.1 Système d'équations à résoudre

3.1.1 Comportement de type MONOCRISTAL

Le comportement local du monocristal est défini, à un instant donné de la discrétisation en temps et au niveau d'un point d'intégration d'un élément fini, par la donnée :

- du tenseur de contraintes macroscopiques à l'instant précédent $\Sigma(t_{i-1}) = \Sigma^-$,
- des variables internes à l'instant précédent, pour chaque système de glissement : $\alpha_s(t_{i-1}), \gamma_s(t_{i-1}), p_s(t_{i-1})$,
- et du tenseur d'accroissement de déformation totale fournie par l'itération n de l'algorithme global de résolution $\Delta E = \Delta E_i^n$ (avec les notations de [R5.03.01]).

L'intégration consiste à trouver :

- le tenseur de contraintes macroscopique $\Sigma = \Sigma(t_i)$
- et les variables internes $\alpha_s = \alpha_s(t_i), \gamma_s = \gamma_s(t_i), p_s = p_s(t_i)$

vérifiant les équations de comportement dans chaque système de glissement (qui sont des relations mono dimensionnelles), et les relations de passage entre les tenseurs macroscopique et l'ensemble des directions de glissement. Notation : on écrit les équations sous forme discrétisée de façon :

- explicite, si les quantités notées $A^{+/-}$ sont évaluées à l'instant t_{i-1} : $A^{+/-} = A^- = A(t_{i-1})$
- implicite, si elles sont évaluées à l'instant t_i : $A^{+/-} = A^+ = A(t_i)$

Les équations à intégrer peuvent se mettre sous la forme générale suivante :

Etant donnés, en un point de Gauss, les tenseurs :

ΔE : variation de déformation à l'instant t_i ,

$E(t_{i-1}) = E^-$: déformation à l'instant t_{i-1} ,

$\Sigma(t_{i-1}) = \Sigma^-$: contrainte macroscopique à l'instant t_{i-1} ,

$\alpha_s(t_{i-1}), \gamma_s(t_{i-1}), p_s(t_{i-1})$: variables internes pour chaque système de glissement à t_{i-1} ,

Il faut trouver :

$\Sigma = \Sigma(t_i)$: contrainte macroscopique à l'instant t_i , dans le repère correspondant à l'orientation globale

$\alpha_s = \alpha_s(t_i)$

$\gamma_s = \gamma_s(t_i)$

$p_s = p_s(t_i)$

vérifiant :

$D^{-1}\Sigma = (D^{-1})\Sigma^- + (\Delta E - \Delta E^{th} - \Delta E^{vp})$, où D peut dépendre de la température, et peut correspondre à une élasticité orthotrope.

$$\Delta E^{vp} = \sum_s m_s \Delta \gamma_s$$

pour chaque système de glissement (de l'ensemble des familles de systèmes) :

$$n_s \text{ équations : } \tau_s = \Sigma^{+/-} : m_s$$

$$n_s \text{ relations d'écoulement : soit en viscoplasticité } \Delta \gamma_s = g(\tau_s^{+/-}, \alpha_s^{+/-}, \gamma_s^{+/-}, p_s^{+/-})$$

$$\text{avec } \Delta p_s = f(\tau_s^{+/-}, \alpha_s^{+/-}, \gamma_s^{+/-}, p_s^{+/-})$$

$$\text{soit en plasticité } F(\tau_s^{+/-}, \alpha_s^{+/-}, \gamma_s^{+/-}, p_s^{+/-}) \leq 0, F \Delta p_s = 0,$$

$$\text{avec } \Delta p_s = |\Delta \gamma_s|$$

$$n_s \text{ équations d'évolutions de l'écrouissage cinématique : } \Delta \alpha_s = h(\tau_s^{+/-}, \alpha_s^{+/-}, \gamma_s^{+/-}, p_s^{+/-})$$

$$n_s \text{ équations d'évolution de l'écrouissage isotrope : } R_s(p_s^{+/-})$$

Ceci est résolu soit de façon explicite (*Runge_Kutta*), soit implicite (*Newton*).

3.1.2 Comportement de type POLYCRISTAL

Les relations de comportement discrétisées sont :

Etant donnés (en un point de Gauss) les tenseurs globaux :

- accroissement de déformation totale ΔE ,
- déformation totale à l'instant précédent $E(t_{i-1}) = E^-$,
- contrainte à l'instant précédent : $\Sigma(t_{i-1}) = \Sigma^-$,
- l'ensemble des variables internes $\alpha_s^-, \gamma_s^-, p_s^-$ relatives aux systèmes de glissement de chaque phase,
- les paramètres de comportement de chaque phase, les orientations et fractions volumiques de chaque phase, et le type de méthode de localisation.

Il faut trouver $\Sigma = \Sigma(t_i), \alpha_s = \alpha_s(t_i), \gamma_s = \gamma_s(t_i), p_s = p_s(t_i)$ vérifiant :

- au niveau du point de Gauss : $\Sigma = D(D^{-1})\Sigma^- + D(\Delta E - \Delta E^{th} - \Delta E^{vp})$, dans le repère global,
 - pour chaque phase (ou « grain »), définie par une orientation et une proportion f_g , une relation de localisation des contraintes, de la forme générale (à exprimer dans le repère local de chaque phase)

$$\sigma_g = L(\Sigma, E^{vp}, \varepsilon_g^{vp}, \beta_g)$$

- et pour chaque système de glissement de chaque phase :

$$\Delta \varepsilon_g^{vp} = \sum_s m_s \Delta \gamma_s$$

$$n_s \text{ équations : } \tau_s = \Sigma : m_s$$

$$n_s \text{ relations d'écoulement : } \Delta \gamma_s = g(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s), \text{ avec } \Delta p_s = |\Delta \gamma_s|$$

$$n_s \text{ évolutions de l'écrouissage : } \Delta \alpha_s = h(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s)$$

$$F(\tau_s, \alpha_s, \gamma_s, p_s) \leq 0, F \Delta p_s = 0, \text{ (en plasticité indépendante du temps)}$$

- Il reste alors les équations d'homogénéisation : $\Delta E^{vp} = \sum_g f_g \Delta \varepsilon_g^{vp}$

Les comportements viscoplastiques relatifs à chaque système de glissement sont identiques au cas de la microstructure.

Dans la version actuelle du Code_Aster, ces relations de comportement sont intégrés uniquement de façon explicite.

3.2 Résolution implicite

Il faut donc résoudre un système de la forme générale suivante :

$$R(Y) = R(\Sigma, \Delta E^{vp}, \Delta \alpha_s, \Delta \gamma_s, \Delta p_s) = \begin{pmatrix} s(\Sigma, \Delta E^{vp}, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \\ e(\Sigma, \Delta E^{vp}, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \\ n_s \begin{Bmatrix} a(\Sigma, \Delta E^{vp}, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \\ g(\Sigma, \Delta E^{vp}, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \\ p(\Sigma, \Delta E^{vp}, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \end{Bmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D^{-1}\Sigma - (D_-^{-1})\Sigma^- - (\Delta E - \Delta E^{th} - \Delta E^{vp}) \\ \Delta E^{vp} - \sum_s m_s \Delta \gamma_s \\ n_s \begin{Bmatrix} \Delta \alpha_s - h(\tau_s^+, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \\ \Delta \gamma_s - g(\tau_s^+, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \\ \Delta p_s - f(\tau_s^+, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \end{Bmatrix} \end{pmatrix} = 0$$

$$\tau_s^+ = \Sigma^+ : m_s$$

De manière plus contractée, on pose :

$$R(\Delta y) = 0 = \begin{bmatrix} s(\Delta y) \\ e(\Delta y) \\ a(\Delta y) \\ g(\Delta y) \\ p(\Delta y) \end{bmatrix} \text{ avec } \Delta y = \begin{pmatrix} \Delta \Sigma \\ \Delta E^{vp} \\ \Delta \alpha_s \\ \Delta \gamma_s \\ \Delta p_s \end{pmatrix}$$

Pour résoudre ce système de 6+6+3ns équations non linéaires (en 3D), on utilise une méthode de Newton : on construit une suite de vecteurs solution de la façon suivante :

$$Y_{k+1} = Y_k - \left(\frac{dR}{dY_k} \right)^{-1} R(Y_k)$$

Il faut donc définir les valeurs initiales Y_0 , et calculer la matrice jacobienne du système : $\frac{dR}{dY_k}$ (celle-ci est détaillée en annexe pour les comportements viscoplastiques décrits précédemment). Elle a la forme suivante :

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial \Sigma}{\partial \Delta E} & \frac{\partial \Sigma}{\partial \Delta E^{vp}} & \frac{\partial \Sigma}{\partial \Delta \alpha_s} & \frac{\partial \Sigma}{\partial \Delta \gamma_s} & \frac{\partial \Sigma}{\partial \Delta p_s} \\ \frac{\partial \Delta E}{\partial \Sigma} & \frac{\partial \Delta E^{vp}}{\partial \Sigma} & \frac{\partial \Delta \alpha_s}{\partial \Sigma} & \frac{\partial \Delta \gamma_s}{\partial \Sigma} & \frac{\partial \Delta p_s}{\partial \Sigma} \\ \frac{\partial \Delta E}{\partial \Delta E} & \frac{\partial \Delta E^{vp}}{\partial \Delta E} & \frac{\partial \Delta \alpha_s}{\partial \Delta E} & \frac{\partial \Delta \gamma_s}{\partial \Delta E} & \frac{\partial \Delta p_s}{\partial \Delta E} \\ \frac{\partial \Delta E}{\partial \Delta E^{vp}} & \frac{\partial \Delta E^{vp}}{\partial \Delta E^{vp}} & \frac{\partial \Delta \alpha_s}{\partial \Delta E^{vp}} & \frac{\partial \Delta \gamma_s}{\partial \Delta E^{vp}} & \frac{\partial \Delta p_s}{\partial \Delta E^{vp}} \\ \frac{\partial \Delta E}{\partial \Delta \alpha_s} & \frac{\partial \Delta E^{vp}}{\partial \Delta \alpha_s} & \frac{\partial \Delta \alpha_s}{\partial \Delta \alpha_s} & \frac{\partial \Delta \gamma_s}{\partial \Delta \alpha_s} & \frac{\partial \Delta p_s}{\partial \Delta \alpha_s} \\ \frac{\partial \Delta E}{\partial \Delta \gamma_s} & \frac{\partial \Delta E^{vp}}{\partial \Delta \gamma_s} & \frac{\partial \Delta \alpha_s}{\partial \Delta \gamma_s} & \frac{\partial \Delta \gamma_s}{\partial \Delta \gamma_s} & \frac{\partial \Delta p_s}{\partial \Delta \gamma_s} \\ \frac{\partial \Delta E}{\partial \Delta p_s} & \frac{\partial \Delta E^{vp}}{\partial \Delta p_s} & \frac{\partial \Delta \alpha_s}{\partial \Delta p_s} & \frac{\partial \Delta \gamma_s}{\partial \Delta p_s} & \frac{\partial \Delta p_s}{\partial \Delta p_s} \end{bmatrix}$$

Le critère d'arrêt des itérations porte sur la nullité du résidu : $\frac{R(Y_k)}{R(Y_0)} < \varepsilon$. Si la convergence n'est pas atteinte après le nombre maximum d'itérations, on teste également la stationnarité de la solution :

$$|Y_{k+1} - Y_k| < \varepsilon$$

La méthode utilisée permet un re-découpage local du pas de temps, soit systématique, soit en cas de non convergence.

3.2.1 Opérateur de comportement tangent

Le système formé des équations du modèle écrit sous forme discrétisée ($R(Y)=0$) est vérifié en fin d'incrément. Pour une petite variation de R , en considérant cette fois ΔE comme variable et non comme paramètre, le système reste à l'équilibre et on vérifie $dF^l = 0$, c'est-à-dire :

$$\frac{\partial R}{\partial \Sigma} \delta \Sigma + \frac{\partial R}{\partial \Delta E} \delta \Delta E + \frac{\partial R}{\partial \Delta E^{vp}} \delta \Delta E^{vp} + \frac{\partial R}{\partial \Delta \alpha_s} \delta \Delta \alpha_s + \frac{\partial R}{\partial \Delta \gamma_s} \delta \Delta \gamma_s + \frac{\partial R}{\partial \Delta p_s} \delta \Delta p_s = 0$$

Ce système peut encore s'écrire :

$$\frac{\partial R}{\partial Y} \delta(Y) = X, \text{ avec } Y = \begin{bmatrix} \Sigma \\ \Delta E^{vp} \\ \Delta \alpha_s \\ \Delta \gamma_s \\ \Delta p_s \end{bmatrix} \text{ et } X = \begin{bmatrix} \delta \Delta E \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Par substitution et élimination successives (cf [§Annexe2]), on en déduit que la matrice jacobienne calculée pour l'intégration implicite permet de calculer l'opérateur tangent sans intervention supplémentaire dans le code.

Celui-ci s'écrit directement (voir [§Annexe2]) :

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial E} \Big|_{t+\Delta t} = \frac{\partial \Sigma}{\partial \Delta E} \Big|_{t+\Delta t} = (Y_0 - Y_1 Y_3^{-1} Y_2)^{-1}$$

En écrivant la matrice jacobienne sous la forme :

$$J.\delta Y = \begin{bmatrix} Y_0 & [1] & [0] & \Sigma \\ [0] & [1] & Y_1 & \Delta E^{vp} \\ Y_2 & [0] & Y_3 & \Delta Z \end{bmatrix}$$

Avec :

$$\begin{aligned} Y_0 &= D^{-1} \\ \Delta \alpha_s \\ \Delta Z &= \Delta \gamma_s \times n_s \\ \Delta p_s \end{aligned}$$

Les sous-matrices ont pour dimensions :

$$\begin{aligned} \dim(Y_0 = D^{-1}) &= [6,6] \\ \dim Y_1 &= [6, 3 * n_s] \\ \dim Y_2 &= [3 * n_s, 6] \\ \dim Y_3 &= [3 * n_s, 3 * n_s] \end{aligned}$$

3.3 Résolution explicite

Une autre méthode de résolution, très simple à mettre en œuvre pour résoudre les équations différentielles du comportement monocristallin est la résolution explicite. Pour qu'elle soit efficace numériquement, il est indispensable de lui associer un contrôle de pas automatique. Comme dans [R5.03.14], on utilise la méthode de Runge et Kutta. Le calcul des variables internes à l'instant $t + h$

n'est fonction que des valeurs de leurs dérivés $\frac{dY}{dt} = F(Y, t)$:

$$\Delta Y = \begin{pmatrix} \Delta \alpha_s \\ \Delta \gamma_s \\ \Delta p_s \\ \Delta E^{vp} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h(\tau_s^-, \alpha_s^-, \gamma_s^-, p_s^-) \\ g(\tau_s^-, \alpha_s^-, \gamma_s^-, p_s^-) \\ |\Delta \gamma_s| = f(\tau_s^-, \alpha_s^-, \gamma_s^-, p_s^-) \\ \sum_s m_s \Delta \gamma_s \end{pmatrix}$$

avec $\tau_s = \Sigma : m_s = \Sigma^- + D(\Delta E - \Delta E^{th} - \Delta E^{vp})$

On intègre selon le schéma suivant :

$$\begin{aligned} Y_{t+h} &= Y^{(2)} \text{ si le critère de précision est satisfait} \\ Y^{(2)} &= Y + \frac{h}{2} [F(Y, t) + F(Y^{(1)}, t + h)] \text{ avec } Y^{(1)} = Y + h F(Y, t) \end{aligned}$$

La différence entre $Y^{(2)}$ (schéma d'ordre 2) et $Y^{(1)}$ (schéma d'ordre 1, Euler) fournit une estimation de l'erreur d'intégration et permet de contrôler la taille du pas de temps h qui est initialisé à Δt_i pour la première tentative. La stratégie du contrôle du pas est définie à partir d'une norme de l'écart entre les deux méthodes d'intégration : $\|Y^{(2)} - Y^{(1)}\|$ et de la précision requise par l'utilisateur η (mot-clé : RESI_INTE_REL). Le critère retenu est le suivant, où l'on note $Y = (y_1, y_2, \dots, y_N)$:

$$\delta Y(t) = \sup_{j=1, N} \frac{|y_j^{(2)} - y_j^{(1)}|}{\max[\varepsilon, |y_j(t)|]} < \eta$$

Le paramètre ε est fixé à 0,001. La précision d'intégration souhaitée η doit être cohérente avec le niveau de précision requis pour l'étape globale.

Si le critère n'est pas vérifié, le pas de temps est re-découpé selon une méthode heuristique (nombre de sous-pas défini par l'utilisateur via le mot-clé ITER_INTER_PAS). Lorsque le pas de temps devient trop faible ($h < 1.10^{-20}$), le calcul est arrêté avec un message d'erreur.

4 Variables internes

4.1 Cas du monocristal

Les variables internes dans le *Code_Aster* sont dénommées **v1**, **v2**,... **vp**.

Les six premières sont les 6 composantes de la déformation visco-plastique.

v7, **v8**, **v9** sont les valeurs de α_1 γ_1 p_1 pour le système de glissement $s = 1$

v10, **v11**, **v12** correspondent au système $s = 2$, et ainsi de suite.

La dernière variable interne, **Vp**, ($p=6+3n+1$, n étant le nombre total de systèmes de glissement) est un indicateur de plasticité (seuil dépassé en au moins un système de glissement au pas de temps courant). S'il est nul, il n'y a pas eu d'accroissement de variables internes à l'instant courant. Sinon, il contient le nombre d'itérations de Newton (pour une résolution implicite) qui ont été nécessaires pour obtenir la convergence.

4.2 Cas du polycristal

Les variables internes dans le *Code_Aster* sont dénommées **v1**, **v2**,... **vp**.

Les six premières sont les 6 composantes de la déformation visco-plastique. La septième est la déformation viscoplastique équivalent cumulée (macroscopique).

Ensuite, pour chaque phase, on trouve :

Les déformations viscoplastiques ou le tenseur Beta

les valeurs de α_s γ_s p_s pour chaque système de glissement

La dernière variable interne, **Vp**, ($p=6+1+m(6+3n)+1$), $p = 7 + \sum_{g=1, m} (6 + 3n_s) + 2$, m étant le nombre de

phases et n_s étant le nombre de systèmes de glissement de la phase g).

est un indicateur de plasticité (seuil dépassé en au moins un système de glissement au pas de temps courant). S'il est nul, il n'y a pas eu d'accroissement de variables internes à l'instant courant. Sinon, il contient le nombre d'itérations de Newton (pour une résolution implicite) qui ont été nécessaires pour obtenir la convergence.

5 Implantation numérique dans le Code_Aster

D'une façon générale, les comportements mono-cristallins sont intégrés aux méthodes de Runge-Kutta pour l'intégration explicite [R5.03.14], et à l'environnement « `plasti` » pour l'intégration implicite [R5.03.10]. Les tenseurs d'orientation des systèmes de glissement sont quant à eux tous définis dans une routine, fournissant le tenseur en repère global pour le nième système de la famille fournie dont le nom est fourni par la routine appelante.

Pour ajouter un nouveau comportement de mono-cristal, ou simplement une nouvelle loi d'écroulement ou d'écrouissage, il convient de définir ses paramètres dans `DEFI_MATERIAU`. Suivant le cas (écoulement, écrouissage isotrope ou cinématique), il faut ajouter la lecture de ces paramètres dans les routines `LCMAFL`, `LCMAEI`, `LCMAEC`. Pour l'intégration, il suffit d'écrire la définition des accroissements de variables internes dans les routines `LCMMFL` (écoulement), `LCMMEC` (écrouissage cinématique) et `LCMMEI` (écrouissage isotrope), pour que l'intégration explicite fonctionne.

L'intégration implicite utilise également les routines `LCMMFL`, `LCMMEC` et `LCMMEI`. Elle demande en plus de définir les dérivées des équations par rapport aux différentes variables. Les dérivées sont à écrire dans les routines `LCMMJF` (dérivées de l'équation d'écoulement), `LCMMJI` (dérivées de la relation d'écrouissage isotrope) et `LCMMJC` (dérivées de la relation d'écrouissage cinématique).

6 Utilisation

Ces modèles sont accessibles dans le *Code_Aster* en 3D, déformations planes (**D_PLAN**), contraintes planes (**C_PLAN**) et axisymétrie (**AXIS**).

6.1 Cas du monocristal

Dans le cas de microstructures maillées, les différents grains d'un monocristal étant représentés par des groupes de mailles, il faut affecter les paramètres des matériaux et les comportements des monocristaux ainsi que leurs orientations aux différents grains.

Les valeurs des paramètres des relations de comportement sont fournies à l'aide de la commande **DEFI_MATERIAU**. Actuellement, ceci se définit à partir des mots clés **ECOU_VISC1**, **ECOU_VISC2**, **ECOU_VISC3** pour l'écoulement, **ECRO_ISOT1**, **ECRO_ISOT2** pour l'écrouissage isotrope et **ECRO_CINE1**, **ECRO_CINE2** pour l'écrouissage cinématique [U4.43.01]. Par exemple [V6.04.172] :

```
MATER1=DEFI_MATERIAU(
  ELAS_ORTH=_F(  E_L=192500,
                 E_T=128900,
                 NU_LT=0.23,
                 G_LT=74520, ),

  # RELATIONS D'ECOULEMENT
  ECOU_VISC1=_F(N=10, K=40,C=6333),
  ECOU_VISC2=_F(N=10, K=40,C=6333,D=37,A=121),
  ECOU_VISC3=_F(K=40,V=, GAMMA0=),

  # ECROUISSAGE ISOTROPE
  ECRO_ISOT1=_F(R_0=75.5,Q=9.77,B=19.34,H=2.54),
  ECRO_ISOT2=_F(R_0=75.5,Q1=9.77,B1=19.34,H=2.54,Q2=-33.27, B2=5.345, ),

  # ECROUISSAGE CINEMATIQUE

  ECRO_CINE1=_F(D=36.68),
  ECRO_CINE2=_F(D=36.68, GM=, PM=, ),
  );
```

On peut ainsi dissocier, au niveau des données, l'écoulement de l'écrouissage isotrope et de l'écrouissage cinématique.

Il faut maintenant définir le (ou les) type de monocristal étudié. Pour cela, on définit le comportement de façon externe à **STAT_NON_LINE**, par l'intermédiaire de l'opérateur **DEFI_COMPOR**, par exemple :

```
MONO1=DEFI_COMPOR(MONOCRISTAL =(_F( MATER=MATER1,
                                     ECOULEMENT=ECOU_VISC1,
                                     ECRO_ISOT=ECRO_ISOT1,
                                     ECRO_CINE=ECRO_CINE1,
                                     FAMI_SYST_GLIS=( 'CUBIQUE1' ), ),

  _F( MATER=MATER1,
       ECOULEMENT=ECOU_PLAS1,
       ECRO_ISOT=ECRO_ISOT2,
       ECRO_CINE=ECRO_CINE2,
       FAMI_SYST_GLIS= 'CUBIQUE2' ), ),

  _F( MATER=MATER2,
       ECOULEMENT=ECOU_PLAS1,
       ECRO_ISOT=ECRO_ISOT2,
       ECRO_CINE=ECRO_CINE2,
       FAMI_SYST_GLIS= 'PRISMATIQUE' ), ),
  );
```

La structure de donnée produite contient des noms de systèmes de glissement, associés à des noms de paramètres de matériau, pour chaque comportement de monocristal .

FAMI_SYST_GLIS	MATE_SYST	TYPE_LOI	ECOULEMENT	ECRO_ISOT	ECRO_CINE
'CUBIQUE'	MATER1	VISC	ECOU_VISC1	ECRO_ISOT1	ECRO_CIN1
'BASAL'	MATER1	VISC	ECOU_VISC1	ECRO_ISOT1	ECRO_CIN1
'PRISMATIQUE'	MATER1	PLAS	ECOU_PLAS1	ECRO_ISOT2	ECRO_CIN2
...			

L'opérateur DEFI_COMPOR calcule le nombre total de variables internes associé au monocristal.

Enfin, pour réaliser un calcul de micro-structure, il faut donner, grain par grain, ou par groupe de mailles (représentant des ensembles de grains) une orientation, à l'aide du mot-clé MASSIF de AFFE_CARA_ELEM. Par exemple :

```
ORIELEM = AFFE_CARA_ELEM ( MODELE = MO_MECA,
                           MASSIF =(
                               _F ( GROUP_MA='GRAIN1',
                                   ANGL_REP=( 348.0, 24.0, 172.0 ),
                                   ),
                               _F ( GROUP_MA='GRAIN2',
                                   ANGL_REP=( 327.0, 126.0, 335.0 ),
                                   ),
                               _F ( GROUP_MA='GRAIN3',
                                   ANGL_REP=( 235.0, 7.0, 184.0 ),
                                   ),
                               _F ( GROUP_MA='GRAIN4',
                                   ANGL_REP=( 72.0, 338.0, 73.0 ),
                                   ),
                           )
... )
```

Remarques :

- Contrairement à l'opérateur actuel DEFI_TEXTURE, on ne donne que le nom de la structure cristallographique, sachant que les directions de glissement de chaque famille de systèmes de glissement seront définis une fois pour toutes dans le source.
- Pour un même monocristal, les valeurs des paramètres peuvent être différentes d'une famille de systèmes de glissement à l'autre. C'est pourquoi on peut définir un matériau différent par occurrence du mot-clé facteur MONOCRISTAL. Mais dans ce cas, comment fournir transmettre à STAT_NON_LINE l'information stipulant qu'en un point de gauss (tous ceux du groupe de mailles concerné), on a plusieurs matériaux présents ? Ceci est possible grâce à une évolution de AFFE_MATERIAU [U4.43.03] et de la structure de données matériau [D4.06.18] :

```
MAT=AFFE_MATERIAU(MAILLAGE=MAIL,
                  AFFE      =_F(GROUP_MA='GRAIN1',
                                MATER=(MATER1,MATER2),),
                  );
```

Les autres données du calcul sont identiques à un calcul de structure habituel.

Enfin, dans STAT_NON_LINE, le comportement issu de DEFI_COMPOR est fourni, sous le mot clé COMP_INCR via le mot clé COMPOR, obligatoire avec le mot-clé RELATION='MONOCRISTAL'.

```
COMP_INCR = _F( RELATION = 'MONOCRISTAL',
                COMPOR = COMP1
```

Précisions que pour l'intégration explicite, (RESO_INTE='RUNGE_KUTTA'), il est inutile de demander la réactualisation de la matrice tangente puisque celle-ci n'est pas calculée. Pour débiter des itérations de Newton de l'algorithme global, il peut être utile de spécifier PREDICTION='EXTRAPOL' [U4.51.03].

On pourra trouver un exemple d'utilisation dans les tests : SSNV171 et SSNV172.

6.2 Cas du polycristal

Dans le cas de polycristaux multiphasés, chaque phase correspond à un monocristal. On utilisera donc les paramètres définis précédemment dans `DEFI_MATERIAU` pour le monocristal. Ici, il s'agit de définir, pour chaque phase, l'orientation, la fraction volumique, le monocristal utilisé, et le type de loi de localisation. Ceci est effectué sous le mot-clé `facteur POLYCRISTAL` de `DEFI_COMPOR`.

```
MONO1=DEFI_COMPOR(MONOCRISTAL=_F(MATER=MATPOLY,
    ECOULEMENT='ECOU_VISC2',
    ECRO_ISOT='ECRO_ISOT2',
    ECRO_CINE='ECRO_CINE1',
    ELAS='ELAS',
    FAMI_SYST_GLIS='OCTAEDRIQUE',),),);

POLY1=DEFI_COMPOR(POLYCRISTAL=(_F(MONOCRISTAL=MONO1,
    FRAC_VOL=0.025,
    ANGL_REP=(-149.676,15.61819,154.676),),),
    _F(MONOCRISTAL=MONO1,
    FRAC_VOL=0.025,
    ANGL_REP=(-150.646,33.864,55.646),),),
    _F(MONOCRISTAL=MONO1,
    FRAC_VOL=0.025,
    ANGL_REP=(-137.138,41.5917,142.138),),),
    .....
    _F(MONOCRISTAL=MONO1,
    FRAC_VOL=0.025,
    ANGL_REP=(-481.729,35.46958,188.729),),),),
    LOCALISATION='BETA',
    DL=321.5,
    DA=0.216,);
```

Le mot-clé `POLYCRISTAL` permet de définir chaque phase par la donnée d'une orientation, d'une fraction volumique, d'un mono-cristal (c'est-à-dire un modèle de comportement et des systèmes de glissement).

Le mot-clé `LOCALISATION` permet de choisir la méthode de localisation pour l'ensemble des phases du polycristal.

Enfin, dans `STAT_NON_LINE`, le comportement issu de `DEFI_COMPOR` est fourni, sous le mot clé `COMP_INCR` via le mot clé `COMPOR`, obligatoire avec le mot-clé `RELATION='POLYCRISTAL'`.

```
COMP_INCR = _F(
    RELATION = 'POLYCRISTAL',
    COMPOR = COMPL )
```

Ce comportement est testé par exemple dans `SSNV125A` (où l'on peut vérifier que les résultats sont identiques à ceux obtenus avec `POLY_CFC`).

6.3 Exemple

A titre d'exemple de mis en œuvre, on présente ici succinctement un calcul d'agrégat, de forme cubique (volume élémentaire) comprenant 100 grains monocristallins, définis chacun par un groupe de mailles. Le nombre total d'éléments est 86751. Avec des mailles d'ordre 1 (TETRA4) il comporte 15940 nœuds. Avec des mailles d'ordre 2 (TETRA10), il en comporte 121534.

Le chargement consiste en une déformation homogène, appliquée par l'intermédiaire d'un déplacement normal imposé sur une face du cube (direction z). On atteint une déformation de 4% en 1s et 50 incréments.

Le calcul (tetra4) dure 140000 secondes soit 39 heures de CPU Alphaserveur.

```
ACIER=DEFI_MATERIAU(ELAS=_F(E =145200.0,NU=0.3,),
    ECOU_VISC1=_F( N=10., K=40.,C=10.,),
    ECRO_ISOT2=_F(R_0=75.5,
        B1 =19.34,
        B2 =5.345,
        Q1 =9.77,
        Q2 =33.27,
        H=0.5),
    ECRO_CINE1=_F(D=36.68,),
    );
```

Titre : *Comportements élasto viscoplastiques mono cristallins*
Auteur(s) : **J.M. PROIX, T. KANIT, O. DIARD**

Date : 19/04/05
Clé : R5.03.11-A Page : 18/24

```
COEF=DEFI_FONCTION(NOM_PARA = 'INST', VALE =(0.0,0.0,1.0,1.0,)),);

MAT=AFFE_MATERIAU(MAILLAGE=MAIL, AFPE=_F(TOUT ="OUI", MATER=(ACIER)),);

COMPORT=DEFI_COMPOR(MONOCRISTAL=(
  _F(MATER =ACIER,
    ECOULEMENT="ECOU_VISC1",
    ECRO_ISOT ="ECRO_ISOT2",
    ECRO_CINE ="ECRO_CINE1",
    ELAS="ELAS",
    FAMI_SYST_GLIS='OCTAEDRIQUE',),
),);

ORIELEM = AFPE_CARA_ELEM ( MODELE = MO_MECA,
  MASSIF =(
    _F ( GROUP_MA='GRAIN1', ANGL_REP=(348.0,24.0,172.0), ),
    _F ( GROUP_MA='GRAIN2', ANGL_REP=( 327.0, 126.0, 335.0), ),
    _F ( GROUP_MA='GRAIN3', ANGL_REP=( 235.0, 7.0, 184.0), ),
    .....
    _F ( GROUP_MA='GRAIN99', ANGL_REP=( 201.0, 198.0, 247.0), ),
    _F ( GROUP_MA='GRAIN100', ANGL_REP=( 84.0, 349.0, 233.0), ),
  ))

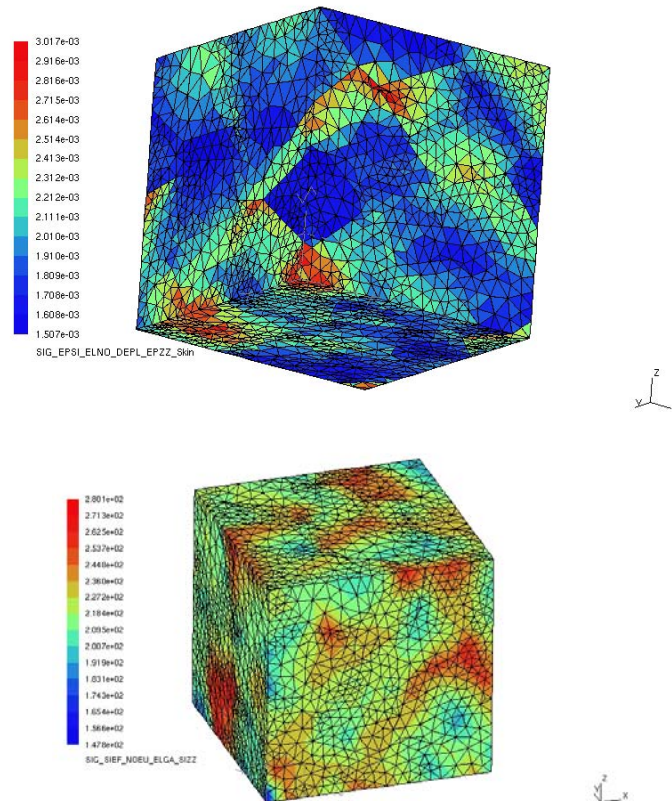
FO_UZ = DEFI_FONCTION ( NOM_PARA = 'INST',
  VALE = ( 0.0, 0.0, 1.0, 0.04, ),)

CHME4=AFPE_CHAR_MECA_F(MODELE=MO_MECA,
  DDL_IMPO=_F(GROUP_NO='HAUT', DZ=FO_UZ,))

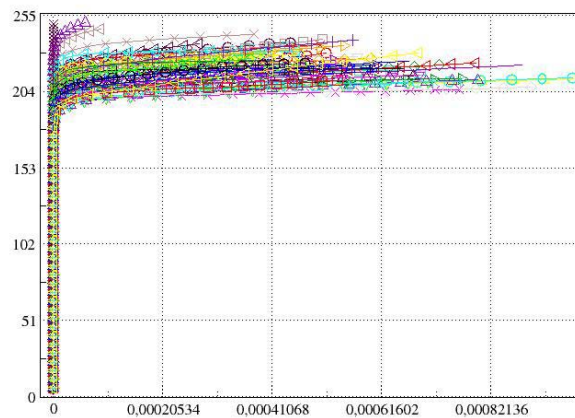
LINST = DEFI_LIST_REEL (DEBUT= 0.,
  INTERVALLE =( _F ( JUSQU_A = 1.,NOMBRE= 50 ),) )

SIG=STAT_NON_LINE(MODELE =MO_MECA,
  CARA_ELEM=ORIELEM,
  CHAM_MATER =MAT,
  EXCIT=( _F(CHARGE=CHME1),
    _F(CHARGE=CHME2),
    _F(CHARGE=CHME3),
    _F(CHARGE=CHME4),),
  COMP_INCR=( _F( RELATION = 'MONOCRISTAL',
    COMPOR =COMPORT,
    TOUT = 'OUI',),),
  INCREMENT=( _F(LIST_INST=LINST,
    SUBD_PAS =4,
    SUBD_PAS_MINI=0.000001,
    ),),
  NEWTON =_F(REAC_ITER =5,)),
);
```

Les figures suivantes représentent des isovaleurs des déformations les contraintes suivant z. On note la non homogénéité des valeurs, et on peut même discerner le contour des grains.



Pour pouvoir exploiter ce type de résultats, on peut par exemple calculer des champs moyens par grains. Sur la figure suivante, on a représenté les contraintes équivalentes en fonction des déformations plastiques équivalentes pour l'ensemble des grains.



7 Bibliographie

- [1] MERIC L., CAILLETAUD G. : « single crystal modeling for structural calculations » in Journal of Engineering Material and Technology, janvier 1991, vol 113, pp171-182.
- [2] LECLERCQ S., DIARD, O., PROIX J.M. : “Quel micro-macro dans Aster ? Etude d’impact de l’implantation d’une bibliothèque de lois de comportement et de règles de transition d’échelles » Note EDF R&D HT-26/03/053/A.
- [3] CAILLETAUD G. : “A micromechanical approach to inelastic behaviour of metals”, Int. J. of Plasticity, 8, pp. 55-73, 1992.
- [4] PILVIN P. : “The contribution of micromechanical approaches to the modelling of inelastic behaviour of polycrystals”, Int. Conf. on Biaxial / Multiaxial fatigue, France, ESIS/SF2M, pp. 31-46, 1994.
- [5] BERVEILLER M., ZAOUI A. : “An extension of the self-consistent scheme to plasticity flowing polycrystal” J. Mech. Phys. Solids, 6, pp. 325-344, 1979.

Annexe 1 Expression du Jacobien des équations élastoviscoplastiques intégrées

Le système à résoudre est de la forme :

$$R(Y) = R(\Sigma, \Delta E^{vp}, \Delta \alpha_s, \Delta \gamma_s, \Delta p_s) = \begin{pmatrix} s(\Sigma, \Delta E^{vp}, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \\ e(\Sigma, \Delta E^{vp}, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \\ n_s \begin{pmatrix} a(\Sigma, \Delta E^{vp}, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \\ g(\Sigma, \Delta E^{vp}, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \\ p(\Sigma, \Delta E^{vp}, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D^{-1}\Sigma - (D^{-1})\Sigma^- - (\Delta E - \Delta E^{th} - \Delta E^{vp}) \\ \Delta E^{vp} - \sum_s m_s \Delta \gamma_s \\ n_s \begin{pmatrix} \Delta \alpha_s - h(\tau_s^+, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \\ \Delta \gamma_s - g(\tau_s^+, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \\ \Delta p_s - f(\tau_s^+, \alpha_s^+, \gamma_s^+, p_s^+) \end{pmatrix} \end{pmatrix} = 0$$

$$\tau_s^+ = \Sigma^+ : m_s$$

Soit donc à évaluer les termes de l'hypermatrice jacobienne J à l'instant $t + \Delta t$

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial s}{\partial \Delta \Sigma} & \frac{\partial s}{\partial \Delta E^{vp}} & \frac{\partial s}{\partial \Delta \alpha_s} & \frac{\partial s}{\partial \Delta \gamma_s} & \frac{\partial s}{\partial \Delta p_s} \\ \frac{\partial e}{\partial \Delta \Sigma} & \frac{\partial e}{\partial \Delta E^{vp}} & \frac{\partial e}{\partial \Delta \alpha_s} & \frac{\partial e}{\partial \Delta \gamma_s} & \frac{\partial e}{\partial \Delta p_s} \\ \frac{\partial a}{\partial \Delta \Sigma} & \frac{\partial a}{\partial \Delta E^{vp}} & \frac{\partial a}{\partial \Delta \alpha_s} & \frac{\partial a}{\partial \Delta \gamma_s} & \frac{\partial a}{\partial \Delta p_s} \\ \frac{\partial g}{\partial \Delta \Sigma} & \frac{\partial g}{\partial \Delta E^{vp}} & \frac{\partial g}{\partial \Delta \alpha_s} & \frac{\partial g}{\partial \Delta \gamma_s} & \frac{\partial g}{\partial \Delta p_s} \\ \frac{\partial p}{\partial \Delta \Sigma} & \frac{\partial p}{\partial \Delta E^{vp}} & \frac{\partial p}{\partial \Delta \alpha_s} & \frac{\partial p}{\partial \Delta \gamma_s} & \frac{\partial p}{\partial \Delta p_s} \end{bmatrix}$$

En ce qui concerne la première ligne de la matrice, indépendamment des équations d'écoulement et d'écroutissement, on a :

$$\frac{\partial s}{\partial \Delta \Sigma} = D^{-1} \quad \frac{\partial s}{\partial \Delta E^{vp}} = Id \quad \frac{\partial s}{\partial \Delta \alpha_s} = \frac{\partial s}{\partial \Delta \gamma_s} = \frac{\partial s}{\partial \Delta p_s} = 0$$

La deuxième ligne peut s'écrire également indépendamment de l'écoulement et des écroutissements :

$$\frac{\partial e}{\partial \Delta \Sigma} = 0 \quad \frac{\partial e}{\partial \Delta E^{vp}} = Id \quad \frac{\partial e}{\partial \Delta \alpha_s} = 0 \quad \frac{\partial e}{\partial \Delta \gamma_s} = -\mathbf{m}_s \quad \frac{\partial e}{\partial \Delta p_s} = 0$$

La première colonne des lignes correspondant aux équations (a), (g) et (p) s'écrit :

$$\begin{aligned}\frac{\partial a}{\partial \Delta \Sigma} &= \frac{\partial a}{\partial \Delta \tau_s} \frac{\Delta \tau_s}{\Delta \Sigma} \\ \frac{\partial g}{\partial \Delta \Sigma} &= \frac{\partial g}{\partial \Delta \tau_s} \frac{\Delta \tau_s}{\Delta \Sigma} \\ \frac{\partial p}{\partial \Delta \Sigma} &= \frac{\partial p}{\partial \Delta \tau_s} \frac{\Delta \tau_s}{\Delta \Sigma}\end{aligned}$$

avec

$$\frac{\Delta \tau_s}{\Delta \Sigma} = (\mathbf{m}_s)^T$$

La deuxième colonne est identiquement nulle (du fait de l'équation (e)) : les relations d'écoulement et d'écrouissage ne peuvent s'exprimer qu'en fonction de $\Delta \gamma_s$ et non pas de ΔE^{vp} .

Le dernier bloc d'équations, dépend quant à lui des comportements choisis :

$$\begin{array}{ccc}\frac{\partial a}{\partial \Delta \alpha_s} & \frac{\partial a}{\partial \Delta \gamma_s} & \frac{\partial a}{\partial \Delta p_s} \\ \frac{\partial g}{\partial \Delta \alpha_s} & \frac{\partial g}{\partial \Delta \gamma_s} & \frac{\partial g}{\partial \Delta p_s} \\ \frac{\partial p}{\partial \Delta \alpha_s} & \frac{\partial p}{\partial \Delta \gamma_s} & \frac{\partial p}{\partial \Delta p_s}\end{array}$$

Exemple

Choisissons la relation d'écoulement viscoplastique **ECOU_VISC1**

$$\begin{aligned}(g) \Delta \gamma_s - \Delta p_s \frac{\tau_s - c \alpha_s}{|\tau_s - c \alpha_s|} &= 0 \\ (p) \Delta p_s - \Delta t \cdot \left\langle \frac{|\tau_s - c \alpha_s| - R_s(p_s)}{k} \right\rangle^n &= 0\end{aligned}$$

avec l'écrouissage isotrope **ECRO_ISOT1** : $R_s(p_s) = R_0 + Q \left(\sum_{r=1}^N h_{sr} (1 - e^{-b p_r}) \right)$, $h_{sr} = (1 - \delta_{sr}) + \delta_{sr}$

et un écrouissage cinématique défini par **ECRO_CINE1**

$$(a) \Delta \alpha_s - \Delta \gamma_s + d \alpha_s \Delta p_s = 0$$

alors :

$$\begin{aligned}\frac{\partial a}{\partial \Delta \tau_s} &= 0 \\ \frac{\partial g}{\partial \Delta \tau_s} &= 0 \\ \frac{\partial p}{\partial \Delta \tau_s} &= \frac{-n \Delta t}{K^n} \left\langle |\tau_s - c \alpha_s| - R_s(p_s) \right\rangle^{n-1} \frac{\tau_s - c \alpha}{|\tau_s - c \alpha_s|}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial a}{\partial \Delta \alpha_s} &= 1 + d\Delta p_s \\ \frac{\partial g}{\partial \Delta \alpha_s} &= 0 \\ \frac{\partial p}{\partial \Delta \alpha_s} &= \frac{nc\Delta t}{K^n} \left\langle |\tau_s - c\alpha_s| - R_s(p_s) \right\rangle^{n-1} \frac{\tau_s - c\alpha_s}{|\tau_s - c\alpha_s|} \\ \frac{\partial a}{\partial \Delta \gamma_s} &= -1 \\ \frac{\partial g}{\partial \Delta \gamma_s} &= 1 \\ \frac{\partial p}{\partial \Delta \gamma_s} &= 0 \\ \frac{\partial a}{\partial \Delta p_s} &= d\alpha_s \\ \frac{\partial g}{\partial \Delta p_s} &= \frac{\tau_s - c\alpha_s}{|\tau_s - c\alpha_s|} \\ \frac{\partial p}{\partial \Delta p_s} &= 1 + \frac{n\Delta t}{K^n} \left\langle |\tau_s - c\alpha_s| - R_s(p_s) \right\rangle^{n-1} \frac{dR_s(p_s)}{d\Delta p_s} \\ \frac{dR_s(p_s)}{d\Delta p_s} &= Qbh_{ss}e^{-bp_s}\end{aligned}$$

et, concernant l'interaction entre systèmes de glissement, il y a un seul terme non nul :

$$\begin{aligned}\frac{\partial p}{\partial \Delta p_r} &= 1 + \frac{n\Delta t}{K^n} \left\langle |\tau_s - c\alpha_s| - R_s(p_s) \right\rangle^{n-1} \frac{dR_s(p_s)}{d\Delta p_r} \\ \frac{dR_s(p_s)}{d\Delta p_r} &= Qbh_{sr}e^{-bp_r}\end{aligned}$$

Annexe 2 Evaluation de l'opérateur tangent cohérent

Il s'agit de trouver l'opérateur tangent cohérent, c'est à dire calculé à partir de la solution de $(R(Y)=0)$ en fin d'incrément. Pour une petite variation de R , en considérant cette fois ΔE comme variable et non comme paramètre, on obtient :

$$\frac{\partial R}{\partial \Sigma} \delta \Sigma + \frac{\partial R}{\partial \Delta E} \delta \Delta E + \frac{\partial R}{\partial \Delta E^{vp}} \delta \Delta E^{vp} + \frac{\partial R}{\partial \Delta \alpha_s} \delta \Delta \alpha_s + \frac{\partial R}{\partial \Delta \gamma_s} \delta \Delta \gamma_s + \frac{\partial R}{\partial \Delta p_s} \delta \Delta p_s = 0$$

Ce système peut s'écrire :

$$\frac{\partial R}{\partial Y} \delta(Y) = X, \text{ avec } Y = \begin{bmatrix} \Sigma \\ \Delta E^{vp} \\ \Delta \alpha_s \\ \Delta \gamma_s \\ \Delta p_s \end{bmatrix} \text{ et } X = \begin{bmatrix} \delta \Delta E \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

En écrivant la matrice jacobienne sous la forme :

$$J. \delta Y = \begin{bmatrix} Y_0 & [1] & [0] & \Sigma \\ [0] & [1] & Y_1 & \Delta E^{vp} \\ Y_2 & [0] & Y_3 & \Delta Z \end{bmatrix}$$

Avec :

$$Y_0 = D^{-1} \\ \Delta \alpha_s \\ \Delta Z = \begin{bmatrix} \Delta \gamma_s \\ \Delta p_s \end{bmatrix} \times n_s$$

En opérant par éliminations et substitutions successives, le troisième bloc du système d'équation donne :

$$\Delta Z = -(Y_3)^{-1} Y_2 \Sigma \\ \Delta E^{vp} = -Y_1 \Delta Z = Y_1 (Y_3)^{-1} Y_2 \Sigma \\ (Y_0 + Y_1 (Y_3)^{-1} Y_2) \Sigma = \Delta E$$

l'opérateur tangent recherché peut donc s'écrire directement :

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial E} \Big|_{t+\Delta t} = \frac{\partial \Sigma}{\partial \Delta E} \Big|_{t+\Delta t} = (Y_0 - Y_1 Y_3^{-1} Y_2)^{-1}$$