

## MFRON03 – Test de l'interface Code\_Aster-MFront pour des lois cristallines

---

### Résumé :

Ce test valide des comportements orthotrope définis à l'aide de *MFront* par comparaison avec des comportements similaires de *Code\_Aster*.

Modélisation B : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin avec intégration implicite, par comparaison au modèle MONOCRISTAL sur un point matériel.

Modélisation C : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin avec intégration implicite, et définition complète de la famille de systèmes de glissement et de la matrice d'interaction, par comparaison au modèle MONOCRISTAL de *Code\_Aster* sur un agrégat à 10 grains.

Modélisation D : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique polycristallin avec intégration explicite, par comparaison au modèle POLYCRISTAL sur un point matériel avec 30 grains.

Modélisation E : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin de type DD\_CFC sur un point matériel.

Modélisation F : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique polycristallin homogénéisé de type DD\_CFC sur un point matériel avec 30 grains.

Modélisation G : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin de type DD\_CFC\_IRRA sur un point matériel.

Modélisation H : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin homogénéisé de type DD\_CC sur un point matériel.

Modélisation I : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin de type DD\_CC\_IRRA sur un point matériel.

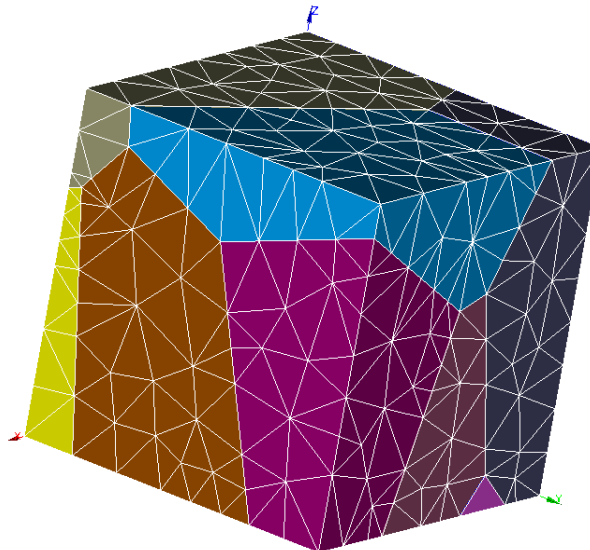
Modélisation J : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin en grandes déformations.

Modélisation K : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique polycristallin homogénéisé de type DD\_CC sur un point matériel avec 30 grains.

## 1 Problème de référence

### 1.1 Géométrie

La géométrie de la modélisation C est celle d'un agrégat à 10 grains générée par une procédure python basée sur des cellules de Voronoï. On définit des plans de coupe aux bords pour imposer les conditions aux limites.



Les autres modélisations sont effectuées sur points matériels (SIMU\_POINT\_MAT).

### 1.2 Propriétés des matériaux

#### 1.2.1 Modélisation B : monocristal

Cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin avec intégration implicite, par comparaison au modèle MONOCRISTAL sur un point matériel.

Les coefficients matériaux sont :

E	208000
NU	0,3
G	80000
N	10
K	25
C	14363
R_0	66,62
Q	11,43
B	2,1
D	494

Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :

MonoCrystal\_CFC.mfront

#### 1.2.2 Modélisation C : monocristal sur un agrégat de 10 grains

Cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin avec intégration implicite, et définition complète de la famille de systèmes de glissement et de la matrice d'interaction, par comparaison au modèle MONOCRISTAL sur un agrégat à 10 grains.  
Les coefficients matériaux sont :

E	210000
NU	0,3
G	80769.23
N	12
K	5
C	0
R_0	250
Q	55
B	12
D	0

Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :

`MonoCrystal_CFC.mfront`

## 1.2.3 Modélisation D : polycristal homogénéisé sur 30 grains

Cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique polycristallin avec intégration explicite, par comparaison au modèle POLYCRISTAL sur un point matériel avec 30 grains. Les coefficients matériaux sont :

E	145200
NU	0,3
G	55846.15
N	10
K	40
C	0
R_0	75,5
Q	9,77
B	19,34
D	0

Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :

`PolyCrystal_MC.mfront`

PolyCrystal\_Orientation.mfront

Le fichier « PolyCrystal\_Orientation.mfront » définit 30 triplets d'angles d'Euler en degrés.

## 1.2.4 Modélisation E : monocristal DD\_CFC

Cette modélisation permet de valider le modèle monocristallin DD\_CFC sur un point matériel, par comparaison avec MONO\_DD\_CFC. Les coefficients matériaux sont :

E	208000
NU	0,3
G	80000
TAU_F	105
Y	2.5E-7
N	5
GAMMA_0	1.E-3
A	0,13
B	0,005
RHOREF	1.E6
ALPHA	0,35
BETA	2,54E-7
G	80000

La densité de dislocation initiale vaut 1.E6. La solution analytique est contenue dans le fichier mfron03e.30. Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :

MonoCrystalDDCFC.mfront  
MonoCrystal\_DD\_CFC\_InteractionMatrix.mfront

## 1.2.5 Modélisation F : polycristal homogénéisé de type DD\_CFC sur 30 grains

Cette modélisation permet de valider le modèle polycristallin homogénéisé DD\_CFC sur un point matériel avec 30 grains, par comparaison avec POLYCRISTAL. Les coefficients matériaux sont :

E	208000
NU	0,3
G	80000
TAU_F	80
Y	2.5E-7
N	20
GAMMA_0	1.E-3
A	0,13
B	0,005
RHOREF	1.E6
ALPHA	0,35
BETA	2,54E-7

G	80000
---	-------

La densité de dislocation initiale vaut 1.E5. Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :

PolyCrystalDDCFC.mfront

MonoCrystal\_DD\_CFC\_InteractionMatrix.mfront

Le fichier « PolyCrystal\_Orientation.mfront » définit 30 triplets d'angles d'Euler en degrés.

## 1.2.6 Modélisation G : monocristal DD\_CFC\_IRRA

Cette modélisation permet de valider le modèle DD\_CFC\_IRRA sur un point matériel, par comparaison avec le comportement MONO\_DD\_CFC\_IRRA. Les coefficients matériaux sont :

E	208000
NU	0,3
G	80000
TAU_F	80
Y	2.5E-7
N	20
GAMMA_0	1.E-3
A	0,13
B	0,005
RHOREF	1.E6
ALPHA	0,35
BETA	2,54E-7
G	80000
ome_void	1000,
PHI_LOOP	5,9E-6
ALP_VOID	0
ALP_LOOP	0,1
ome_sat	0
PHI_SAT	4,E-2
XI_IRRA	10
DZ_IRRA	1,E7

Les variables internes initiales sont :

RHO\_0=1,E5

RHO\_LOOPS=7,4E13

PHI\_VOIDS=1.e-3

Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :

MonoDDCFC\_Irra.mfront

MonoCrystal\_DD\_CFC\_InteractionMatrix.mfront

## 1.2.7 Modélisation H : monocristal DD\_CC

Cette modélisation permet de valider le modèle DD\_CC sur un point matériel, par comparaison avec le comportement MONO\_DD\_CC du test ssnd110b. Les coefficients matériaux sont :

E (GPa)	236-0.0459*TEMP
NU	0,35
G	80000
B	2,48e-7
GH	1.e11
DeltaG0	0,84
TAU_0 (MPa)	363
TAU_F	0
gamma0	1,e-6
n	50
rho_ini	1,e5*B**2
D	1.e-5
d_lat	1000.
y_at	2.e-6
K_f	30,
K_self	100
k_boltz	8.62E-5
epsi_l	3e-4
G	80000
a_self	0,1024
a_coli	0,7
a_ncol	0,1

La température de la simulation vaut 50 K.

La densité de dislocation initiale vaut 1.E5 (multipliée par BETA\*\*2).

Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :

```
MonoCrystalDDCC.mfront  
MonoCrystal_DD_CC_InteractionMatrix.mfront  
MonoCrystal_DD_CC_SlidingSystems.mfront
```

Le monocristal est défini suivant l'orientation -1,4,9. Il est soumis à une déformation imposée  $\epsilon_{zz}$ .

## 1.2.8 Modélisation I : monocristal DD\_CC\_IRRA

Cette modélisation permet de valider le modèle DD\_CC\_IRRA sur un point matériel, par comparaison avec le comportement MONO\_DD\_CC\_IRRA du test ssnd110d. Les coefficients matériaux sont :

E (GPa)	236-0.0459*TEMP
NU	0,35
G	80000
B	2,48e-7
GH	1.e11

DeltaG0	0,84
TAU_0 (MPa)	363
TAU_F	20
gamma0	1,e-3
n	20
rho_ini	1,e5*B**2
D	1.e-5
d_lat	1000.
y_at	1.e-6
K_f	30,
K_self	100
k_boltz	8.62E-5
epsi_l	1e-5
G	80000
a_irr	0,3
xi_irr	4
a_self	0,1024
a_coli	0,7
a_ncol	0,1

La température de la simulation vaut 250 K.

Le monocristal est soumis à une traction imposée suivant l'orientation 1,5,9

La densité de dislocation initiale vaut 1.E5 (multipliée par BETA\*\*2). Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :

MonoDDCC\_Irra.mfront

MonoCrystal\_DD\_CC\_InteractionMatrix.mfront

MonoCrystal\_DD\_CC\_SlidingSystems.mfront

## 1.2.9 Modélisation J : monocristal en grande déformation

Cette modélisation permet de valider le modèle monocristallin en grande déformation sur un point matériel, par comparaison avec le comportement MONOCRISTAL du test ssnd112a. Les coefficients matériaux sont :

N__	10.
K__	25.0
C__	14363.
R_0__	66.62
Q__	11.43
B__	2.1
D__	494.
H1__	1.
H2__	1.
H3__	0.6
H4__	12.3
H5__	1.6
H6__	1.8

Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :

GdefMonoCrystal.mfront  
GdefMono\_Jacnum.mfront

## 1.2.10 Modélisation K : polycristal homogénéisé DD\_CC

Cette modélisation permet de valider le modèle polycristallin homogénéisé DD\_CC sur un point matériel avec 30 grains, par comparaison avec le comportement POLYCRISTAL du test ssnv194d. Les coefficients matériaux sont :

E (GPa)	236-0.0459*TEMP
NU	0,35
G	80000
B	2,48e-7
GH	1.e11
DeltaG0	0,84
TAU_0 (MPa)	363
TAU_F	0
gamma0	1,e-6
n	50
rho_ini	1,e5*B**2
D	1.e-5
d_lat	1000.
y_at	2.e-6
K_f	30,
K_self	100



k_boltz	8.62E-5
epsi_1	3e-4
G	80000
a_self	0,1024
a_coli	0,7
a_ncol	0,1

Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :

PolyCrystalDDCC.mfront  
PolyCrystal\_DD\_CC\_SlidingSystems.mfront  
MonoCrystal\_DD\_CC\_InteractionMatrix.mfront

## 2 Solution de référence

Valeurs des contraintes, déformations et variables internes, par inter-comparaison entre chaque comportement Mfront et le comportement équivalent de Code\_Aster.

## 3 Modélisation B

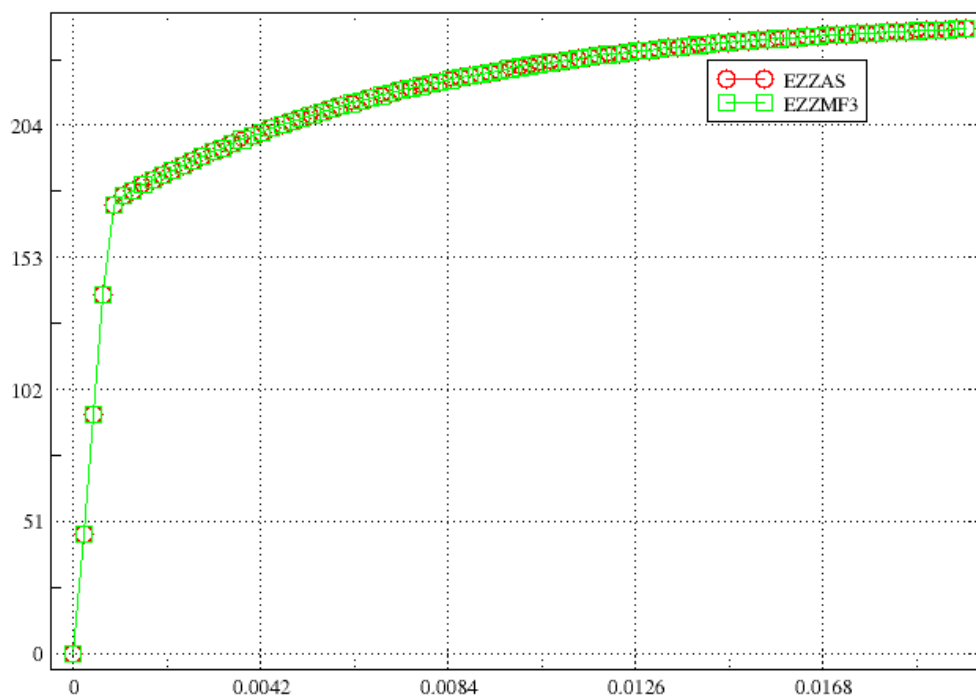
### 3.1 Caractéristiques de la modélisation

Point matériel. Comportement MONOCRISTALLIN. La loi testée est MonoCrystal\_CFC.mfront

### 3.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement MonoCrystal\_CFC de Mfront et celle obtenue avec le comportement MONOCRISTAL de Code\_Aster, en testant le maximum de la différence relative des composantes suivantes :

Composante	Instant(s)	Référence (différence)	Tolérance absolue
SIZZ	Écart maximum	0	1.E-6
Rho_1*beta**2	Écart maximum	0	1.E-5



**Courbes contraintes SIZZ en fonction des déformations EPZZ pour MFRONT et CODE\_ASTER pour le comportement MONOCRISTAL CFC.**

## 4 Modélisation C

---

### 4.1 Caractéristiques de la modélisation

Nombre de nœuds : 552.

Modélisation 3D : 2269 éléments de volume tétraédriques : TETRA4.

Les familles de systèmes de glissement sont de type octaédrique. La structure contient 10 grains générés par une procédure en python qui se base sur des cellules de Voronoï. A chacun des grains correspond 3 angles d'Euler qui définissent les orientations des systèmes de glissement .

### 4.2 Grandeurs testées et résultats

Comparaison des résultats obtenus avec *Code\_Aster* au dernier instant calculé.

	Identification	Référence	Tolérance %
$\sigma_{xx}$	de SIEF_ELGA	-16.112	0,01
$\varepsilon_{xx}$	de EPSI_ELGA	-1,0250E-03	0,01
$\varepsilon_{yy}$	de EPSI_ELGA	-9.3714E-04	0,01
$\varepsilon_{yy}$	de EPSP_ELGA	-2 .7745E-04	0,01

## 5 Modélisation D

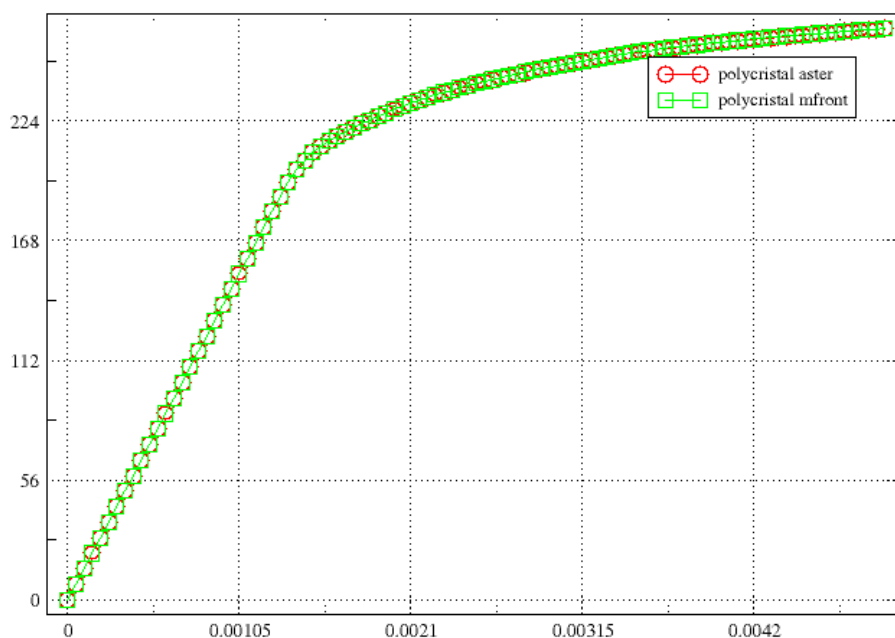
### 5.1 Caractéristiques de la modélisation

Comportement polycristallin homogénéisé. Sur point matériel. 30 grains d'orientations fixées. La loi utilisée est PolyCrystal\_MC.mfront

### 5.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement POLYCRISTAL, en testant le maximum de la différence relative des composantes suivantes :

Composante	Référence (différence )	Tolérance absolue
SIZZ	Somme des écarts	0
		8,77



**Courbes contraintes SIZZ en fonction des déformations EPZZ pour MFRONT et CODE\_ASTER pour le comportement POLYCRISTAL MC.**

## 6 Modélisation E

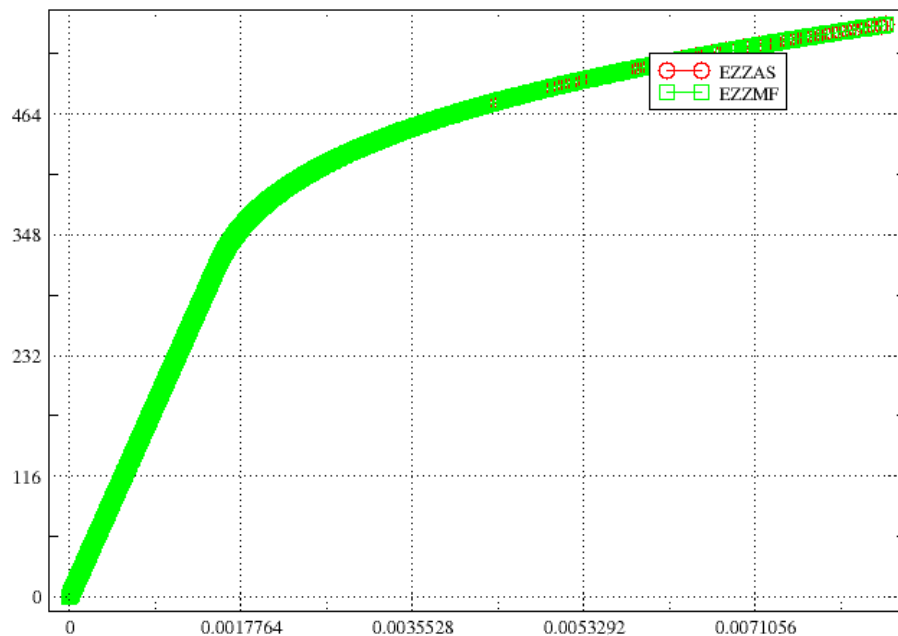
### 6.1 Caractéristiques de la modélisation

Comportement monocristallin DD\_CFC. Point matériel. La loi utilisée est MonoCrystalDDCFC.mfront

### 6.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement MONOCRISTAL DD\_CFC, en testant le maximum de la différence relative des composantes suivantes :

Composante	Instant(s)	Référence (différence)	Tolérance absolue
EPZZ	Écart maximum	0	1.E-4
Rho_1*beta**2	Écart maximum	0	1.E-4



**Courbes contraintes SIZZ en fonction des déformations EPZZ pour MFRONT et CODE\_ASTER pour le comportement MONOCRISTAL DD\_CFC.**

## 7 Modélisation F

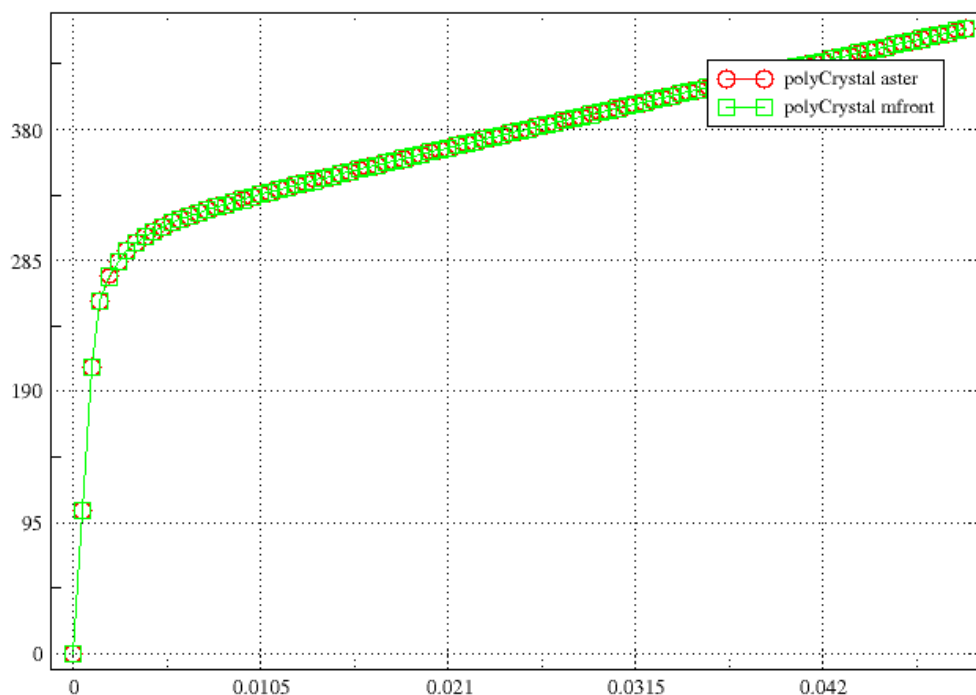
### 7.1 Caractéristiques de la modélisation

Comportement polycristallin homogénéisé DD\_CFC. Point matériel. 30 grains d'orientations fixées.  
La loi utilisée est PolyCrystalDDCFC.mfront

### 7.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement POLYCRISTAL de type DD\_CFC, en testant le maximum de la différence des composantes suivantes :

Composante	Écart relatif	Référence (différence )	Tolérance absolue
SIZZ	Écart maximum	0	1.E-3



**Courbes contraintes SIZZ en fonction des déformations EPZZ pour MFRONT et CODE\_ASTER pour le comportement POLYCRISTAL DD\_CFC.**

## 8 Modélisation G

---

### 8.1 Caractéristiques de la modélisation

Comportement monocristallin DD\_CFC\_IRRA. Point matériel.  
La loi utilisée est MonoDDCFC\_Irra.mfront

### 8.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement MONO\_DD\_CFC\_IRRA, en testant le maximum de la différence des composantes suivantes :

Composante	Instant(s)	Référence (différence )	Tolérance absolue
SIZZ	Écart maximum	0	1.E-8
Rho_1*beta**2	Écart maximum	0	1.E-8

## 9 Modélisation H

---

### 9.1 Caractéristiques de la modélisation

Point matériel. Cristal d'orientation (-1,4,9). Comportement monocristallin DD\_CC.

La loi utilisée est MonoCrystalDDCC.mfront.

### 9.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement MONO\_DD\_CC en testant le maximum de la différence relative des composantes suivantes :

Composante	Instant(s)	Référence (différence )	Tolérance relative
rho_5	Ecart maximum	0	1.E-3



## 10 Modélisation I

---

### 10.1 Caractéristiques de la modélisation

Point matériel. Comportement monocristallin DD\_CC\_IRRA.

La loi utilisée est MonoDDCC\_Irra.mfront

### 10.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement MONO\_DD\_CC\_IRRA en testant le maximum de la différence relative des composantes suivantes :

Composante	Instant(s)	Référence (différence )	Tolérance relative
rho_8	Ecart maximum	0	1.E-3
rho_5	Ecart maximum	0	1.E-4

## 11 Modélisation J

---

### 11.1 Caractéristiques de la modélisation

Comportement monocristallin en grandes déformations. Les lois utilisées sont FiniteStrainSingleCrystal.mfront et FiniteStrainSingleCrystal\_NumericalJacobian.mfront

Modélisation similaire au test SSND112A, mais avec un comportement MONO\_VISC1.

### 11.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement MONOCRISTAL et DEFORMATION='SIMO\_MIEHE'.

Composante	Instant(s)	Référence (aster )	Tolérance relative
$\epsilon_{zz}$	0,1	0.1066652	0,001
$\sigma_{zz}$	0,1	278.978407	0,001
$\gamma_1$	0,1	0.18838793	0,003
$\gamma_9$	0,1	3.9782E-03	0,08
$\gamma_{12}$	0,1	6.184097E-03	0,02

## 12 Modélisation K

---

### 12.1 Caractéristiques de la modélisation

Point matériel. 30 grains d'orientations fixées. Comportement polycristallin homogénéisé DD\_CC.  
La loi utilisée est PolyCrystalDDCC.mfront

### 12.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement similaire POLYCRISTAL de type DD\_CC, en testant le maximum de la différence relative des composantes suivantes :

Composante	Instant(s)	Référence (différence)	Tolérance
EPZZ	Ecart maximum	0	1.E-6
SIZZ	Ecart maximum	0	3.E-2

## 13 Synthèse des résultats

---

Les résultats sont satisfaisants et valident l'interface entre *Code\_Aster* et MFRONT en 3D, pour des comportements avec des comportements cristallins.