

Modélisation non locale à gradients de variables internes GRAD_VARI

Résumé

On présente ici la modélisation non locale à gradient de variables internes intitulée GRAD_VARI dans Code_Aster. Cette modélisation est issue des travaux d'E. Lorentz [Bib 1]. L'algorithme permettant de résoudre les équations d'équilibre et de régularisation a toutefois été modifié par rapport à la version initiale du modèle.

Les modélisations non locales de type GRAD_VARI sont disponibles en 3D (3D_GRAD_VARI), axisymétrique (AXIS_GRAD_VARI) et déformations planes (D_PLAN_GRAD_VARI).

Contrairement à l'ancienne version, l'utilisation de GRAD_VARI est relativement simple, puisqu'il suffit de préciser la modélisation X_GRAD_VARI dans AFFE_MODELE, de préciser une longueur caractéristique sous le mot-clé NON_LOCAL dans DEFI_MATERIAU, et de vérifier que le loi de comportement qu'on souhaite utiliser est bien disponible en version non locale.

On présente l'écriture et le traitement numérique de ce modèle.

Table des matières

1	Rappel sur la théorie des modèles à gradient.....	3
1.1	Construction des modèles à gradient.....	3
1.2	Dualisation et discrétisation en temps.....	4
1.3	Discrétisation spatiale par éléments finis.....	5
1.4	Intégration de la loi de comportement aux points de Gauss.....	6
1.5	Calcul des forces internes.....	7
2	Choix des éléments finis.....	8
3	Modélisations disponibles.....	9
4	Lois de comportement disponibles avec les modélisations GRAD_VARI.....	9
5	Conseils/Procédure pour la mise en oeuvre d'une nouvelle loi de comportement à gradients de variables internes.....	9
6	Bibliographie.....	10
7	Description des versions du document.....	12

1 Rappel sur la théorie des modèles à gradient

Les modèles à gradient présentés ici ont été développés par E. Lorentz [bib1] afin de pouvoir décrire le comportement de matériaux sollicités par de forts gradients des champs mécaniques qui apparaissent dans les zones endommagées ou bien au voisinage de singularités géométriques. En effet, dans le cas de forts gradients, le comportement d'un point matériel n'est plus indépendant de son entourage mais dépend du comportement de son voisinage, d'où l'introduction de gradients dans les modèles.

D'un point de vue numérique, le calcul d'une structure avec une loi d'endommagement locale classique montre que la zone endommagée se localise toujours sur une seule couche d'éléments finis et donc que la réponse de la structure dépend du maillage adopté : les modèles à gradient pallient ce problème.

Dans ce qui suit, nous faisons un bref rappel de cette théorie.

1.1 Construction des modèles à gradient

Cette formulation est restreinte aux matériaux standards généralisés [Bib 2].

Les modèles à gradient de variables internes consistent à introduire le gradient de variables internes dans une formulation standard généralisée [Bib 2].

Soit a une variable interne et A sa force thermodynamique associée, et soit $\Delta(\dot{a})$ le potentiel de dissipation. Si l'on considère que Δ dépend aussi du gradient de \dot{a} , $\Delta = \Delta(\dot{a}, \nabla \dot{a})$, on ne sait alors pas écrire localement le principe de normalité :

$$A \in \partial \Delta(\dot{a}, \nabla \dot{a})$$

En effet, une telle écriture nécessiterait l'introduction de 2 variables localement indépendantes a et

a_{∇} , auxquelles on associerait 2 forces thermodynamiques $A = -\frac{\partial \Phi}{\partial a}$, $A_{\nabla} = -\frac{\partial \Phi}{\partial a_{\nabla}}$ telles que :

$$(A, A_{\nabla}) \in \partial \Delta(\dot{a}, \dot{a}_{\nabla})$$

Si on appelle F le seuil d'élasticité associé au potentiel $\Delta(\dot{a}, \dot{a}_{\nabla})$, l'équation précédente est équivalente à :

$$\Delta(\dot{a}, \dot{a}_{\nabla}) = \text{Sup}_{(A, A_{\nabla}) / F(A, A_{\nabla}) \leq 0} [\dot{a} A + \dot{a}_{\nabla} A_{\nabla}]$$

Et on a :

$$\dot{a} = \dot{\lambda} \frac{\partial F}{\partial A}, \quad \dot{a}_{\nabla} = \dot{\lambda} \frac{\partial F}{\partial A_{\nabla}}$$

Le problème ici est que les variables ne sont pas indépendantes et sont liées par la contrainte non locale $a_{\nabla} = \nabla a$ si bien qu'on n'est pas sûr de vérifier :

$$\dot{a}_{\nabla} = \dot{\lambda} \frac{\partial F}{\partial A_{\nabla}} = \nabla \dot{a}$$

On propose alors d'oublier l'hypothèse d'écoulement normal en chaque point de la structure tout en conservant le formalisme des matériaux standards généralisés mais à l'échelle de la structure, où les variables d'état sont maintenant le champ de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$ et le champ de variables internes a . On définit ainsi l'énergie libre globale et le potentiel de dissipation global :

$$F_{\Phi}(\boldsymbol{\varepsilon}, a) = \int_{\Omega} \Phi(\boldsymbol{\varepsilon}(x), a(x), \nabla a(x)) dx$$

$$D(\dot{a}) = \int_{\Omega} \Delta(\dot{a}(x), \nabla \dot{a}(x)) dx$$

Le potentiel de dissipation global D est maintenant une fonction du champ \dot{a} , et l'écriture $A \in \partial D(\dot{a})$ reprend un sens.

La relation de comportement généralisée s'écrit maintenant :

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial F_{\Phi}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \quad A = -\frac{\partial F_{\Phi}}{\partial a}, \quad A \in \partial D(\dot{a})$$

1.2 Dualisation et discrétisation en temps

On supposera dans toute la suite que l'énergie du modèle régularisée est la somme de l'énergie du modèle local et d'un terme supplémentaire ne dépendant que du gradient de la variable interne qu'on régularise :

$$F_{\Phi}(\boldsymbol{\varepsilon}, a) = \int_{\Omega} \Phi^{loc}(\boldsymbol{\varepsilon}(x), a(x)) + \Phi^{grad}(\nabla a(x)) dx$$

Cette séparation correspond aux cas que nous traitons dans Code_Aster, mais il est possible de construire des modèles à gradient qui ne correspondent pas à ce cas.

L'énergie libre globale $F_{\Phi}(\boldsymbol{\varepsilon}, a)$ fait intervenir le gradient du champ de variable interne a . Or, on sait que le traitement des variables internes par la méthode des éléments finis dans Code_Aster s'effectue aux points de Gauss, où on ne dispose pas d'informations sur les gradients. On introduit donc un champ supplémentaire α , qui sera défini aux nœuds, sur lequel va porter le terme supplémentaire dépendant du gradient et auquel on va imposer d'être égal au champ a en tout point.

L'énergie libre globale s'écrit alors : $F_{\Phi}(\boldsymbol{\varepsilon}, a, \alpha) = \int_{\Omega} \Phi^{loc}(\boldsymbol{\varepsilon}(x), a(x)) + \Phi^{grad}(\nabla \alpha(x)) dx$

avec la condition $\alpha = a$.

Afin de s'affranchir de la contrainte $\alpha = a$, on dualise cette dernière en introduisant un multiplicateur de Lagrange. On introduit la fonction :

$$F_{\Phi}(\boldsymbol{\varepsilon}, a, \alpha, \lambda) = \int_{\Omega} \Phi^{loc}(\boldsymbol{\varepsilon}(x), a(x)) + \Phi^{grad}(\nabla \alpha(x)) + \lambda(a - \alpha) dx$$

où λ est un multiplicateur de Lagrange et on a $F_{\Phi}(\boldsymbol{\varepsilon}, a, \alpha) = \max_{\lambda} F_{\Phi}(\boldsymbol{\varepsilon}, a, \alpha, \lambda)$

Enfin, on ajoute un terme quadratique de pénalisation sur la condition de compatibilité entre les champs a et α :

$$F_{\Phi}(\boldsymbol{\varepsilon}, a, \alpha, \lambda) = \int_{\Omega} \Phi^{loc}(\boldsymbol{\varepsilon}(x), a(x)) + \Phi^{grad}(\nabla \alpha(x)) + \lambda(\alpha - a) + \frac{r}{2}(\alpha - a)^2 dx$$

où r est un coefficient de pénalisation. Ce terme supplémentaire de pénalisation ne modifie pas notre problème, puisqu'il doit tendre vers 0 à convergence, mais permet d'aider à la convergence.

En s'appuyant sur l'hypothèse de convexité par rapport à a des potentiels F_Φ et D et en adoptant un schéma d'Euler implicite, la discrétisation temporelle du problème précédent [éq 1.1-8] se ramène à la résolution d'un problème de minimisation portant sur l'incrément Δa des champs de variables internes. Ce problème s'écrit pour des comportements indépendants du temps :

$$\min_{\Delta a} \left(\max_{\lambda} F_\Phi(\boldsymbol{\varepsilon}, \alpha, \lambda, a^- + \Delta a) + D(\Delta a) \right)$$

où a^- représente le champ de variables internes à l'instant précédent. Cette minimisation constitue la loi de comportement.

De même, en s'appuyant sur l'hypothèse de convexité par rapport à (u, α) du potentiel F_Φ et en adoptant un schéma d'Euler implicite, la résolution des équations d'équilibre se ramène à un problème de minimisation portant sur les incréments $(\Delta u, \Delta \alpha)$. Le problème discrétisé s'écrit alors :

$$\max_{\Delta \lambda} \min_{\Delta u} \min_{\Delta \alpha} \min_{\Delta a} \left(F_\Phi(\boldsymbol{\varepsilon}^- + \Delta \boldsymbol{\varepsilon}, \alpha^- + \Delta \alpha, \lambda^- + \Delta \lambda, a^- + \Delta a) + D(\Delta a) - W^{ext} \right)$$

où W^{ext} représente le travail des forces mécaniques extérieures.

1.3 Discrétisation spatiale par éléments finis

Pour résoudre le problème de recherche d'extrema, on effectue une discrétisation spatiale par éléments finis des grandeurs suivantes :

$$\text{Déplacement : } \boldsymbol{\varepsilon}(x) = \sum_{k \text{ noeuds}} B_{k^u}(x) u_k$$

$$\text{Variable interne « régularisée » : } \alpha(x) = \sum_{k \text{ noeuds}} N_{k^\alpha}(x) \alpha_k$$

Le gradient s'exprime alors grâce au gradient des fonctions de forme :

$$\nabla \alpha(x) = \sum_{k \text{ noeuds}} \nabla N_{k^\alpha}(x) \alpha_k$$

$$\text{Multiplicateur de Lagrange : } \lambda(x) = \sum_{k \text{ noeuds}} N_{k^\lambda}(x) \lambda_k$$

où N_{k^α} (resp. N_{k^λ}) sont les fonctions de formes associées au nœud k pour le champ α (resp.

λ), B_{k^u} sont les fonctions de forme des déformations calculées à partir des dérivées des fonctions de forme associées au nœud k pour les déplacements.

On différencie les fonctions de forme selon le champ dans la mesure où le degré d'interpolation utilisé peut être différent selon la grandeur considérée.

Dans le modèle éléments finis avec intégration aux points de Gauss, l'intégrale sur le volume de la structure est évaluée par sommation sur les points de Gauss. L'énergie F_Φ s'écrit donc pour le problème spatialement discrétisé :

$$F_\Phi(\boldsymbol{\varepsilon}, a, \alpha, \lambda) = \sum_g \omega_g \left[\underbrace{\Phi^{loc}(\boldsymbol{\varepsilon}_g, a_g) + \Phi^{grad}((\nabla \alpha)_g) + \lambda_g(\alpha_g - a_g) + \frac{r}{2}(\alpha_g - a_g)^2}_{\Phi_{nonlocal}(\boldsymbol{\varepsilon}_g, \alpha_g, \lambda_g, a_g)} \right]$$

où ω_g correspond au poids des points de Gauss, et l'indice g indique que le champ est évalué aux points de Gauss à partir des valeurs aux nœuds :

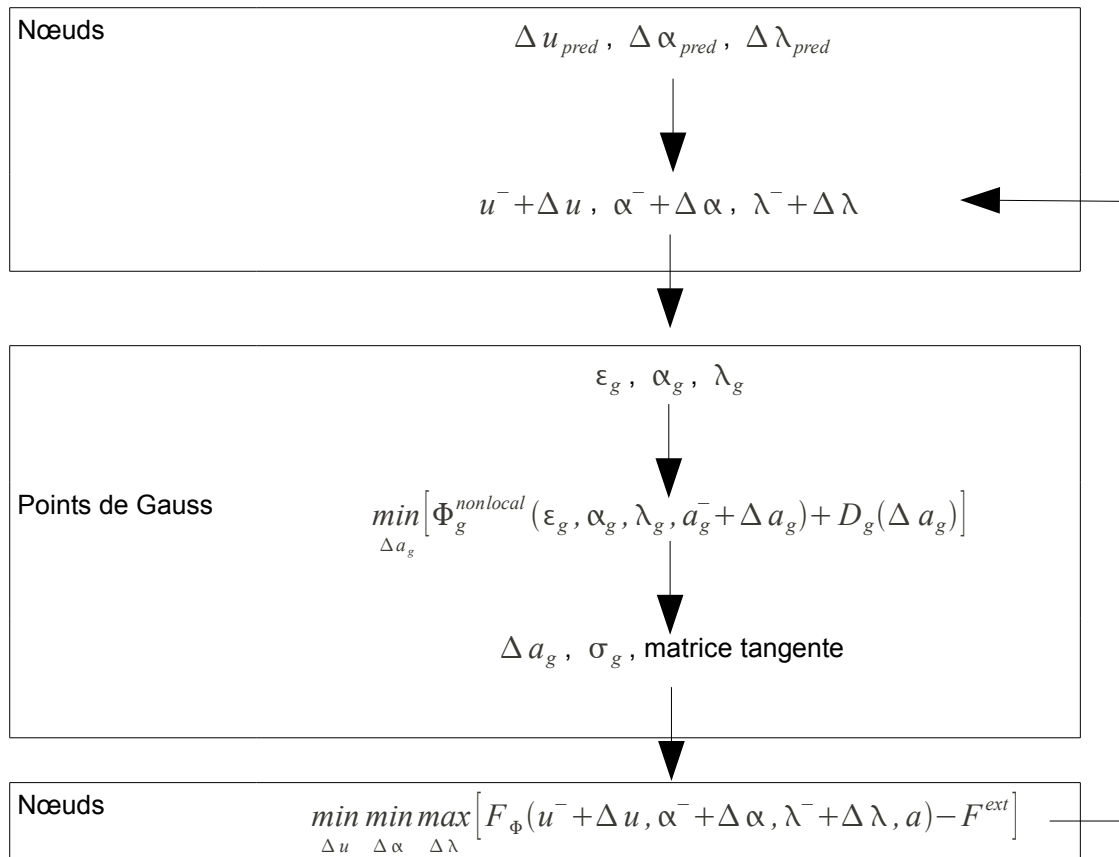
$$\boldsymbol{\varepsilon}_g = \sum_{k \text{ noeuds}} B_{k^u}(x_g) u_k$$

$$\alpha_g = \sum_{k \text{ noeuds}} N_{k\alpha}(x_g) \alpha_k$$

$$(\nabla \alpha)_g = \sum_{k \text{ noeuds}} \nabla N_{k\alpha}(x_g) \alpha_k$$

$$\lambda_g = \sum_{k \text{ noeuds}} N_{k\lambda}(x_g) \lambda_k$$

La résolution du problème incrémental discrétisé correspond donc à l'algorithme suivant :



1.4 Intégration de la loi de comportement aux points de Gauss

La loi de comportement est calculée au point de Gauss. L'évolution de la variable interne a au point de Gauss est solution de la minimisation suivante :

$$\min_{\Delta a_g} [\Phi_{g \text{ nonlocal}}(\epsilon_g, \alpha_g, \lambda_g, a_g^- + \Delta a_g) + D_g(\Delta a_g)]$$

La dualisation de la variable interne nous permet de retrouver une loi d'écoulement normale au niveau de chaque point de Gauss, comme pour la modélisation locale :

$$-\frac{\partial \Phi_{g \text{ nonlocal}}}{\partial a_g} \in \partial(D_g)$$

Lorsqu'on calcule la force thermodynamique associée à la variable interne a en dérivant l'énergie « non locale », on voit que cela revient simplement à ajouter à la force thermodynamique de la modélisation locale un terme issu de l'énergie de régularisation :

$$-\frac{\partial \Phi_g^{nonlocal}}{\partial a_g} = -\frac{\partial \Phi_g^{loc}}{\partial a_g} + [\lambda_g + r(\alpha_g - a_g)]$$

Ce terme supplémentaire, dépendant du gradient de variable interne comme on le verra par la suite, a pour effet de décaler la valeur du seuil par rapport à la modélisation locale en présence de gradient.

En pratique, dans la mesure où on applique cette modélisation non locale à des lois de comportement standards généralisées, il « suffit » de modifier l'expression de la force thermodynamique dans le critère, et d'adapter la résolution du système non linéaire à ce nouveau critère.

Une fois l'évolution de la variable interne calculée, on calcule la contrainte en dérivant l'énergie par rapport au champ de déformation :

$$\sigma_g = \frac{\partial \Phi_g^{nonlocal}}{\partial \epsilon_g} = \frac{\partial \Phi_g^{loc}}{\partial \epsilon_g}$$

On remarque immédiatement que l'expression de la contrainte est inchangée par rapport à la modélisation locale.

Outre l'évolution de la variable interne et la contrainte, nous devons aussi calculer les termes suivants, utiles pour la matrice de correction tangente (cf. section 1.5) :

$$\frac{\partial \sigma_g}{\partial \epsilon_g}, \frac{\partial a_g}{\partial \epsilon_g}, \frac{\partial a_g}{\partial \alpha_g}, \frac{\partial a_g}{\partial \lambda_g}$$

Il est à noter que $\frac{\partial a_g}{\partial \alpha_g} = r \frac{\partial a_g}{\partial \lambda_g}$. Il suffit donc de sortir $\frac{\partial a_g}{\partial \lambda_g}$

1.5 Calcul des forces internes

L'équation d'équilibre mécanique ainsi que l'équation de régularisation sont résolues aux nœuds par recherche d'extremum locaux :

$$\max_{\Delta \lambda} \min_{\Delta u} \min_{\Delta \alpha} \left(F_\Phi(\epsilon^- + \Delta \epsilon, \alpha^- + \Delta \alpha, \lambda^- + \Delta \lambda, a) - W^{ext} \right)$$

Dans la suite, nous laissons de côté les forces mécaniques extérieures qui sont traitées à part dans Code_Aster. Les forces internes associées aux variables nodales du nœud n (u_n, α_n, λ_n) ont pour expression :

$$F^u|_n = \frac{\partial F_\Phi}{\partial u_n} = \sum_g \omega_g \frac{\partial \Phi^{loc}}{\partial u_n} = \sum_g \omega_g \frac{\partial \Phi^{loc}}{\partial \epsilon_g} : \frac{\partial \epsilon_g}{\partial u_n} = \underbrace{\sum_g \omega_g \sigma_g : B_n^u}_{\int_\Omega B^T \sigma d\Omega}$$

$$F^\alpha|_n = \frac{\partial F_\Phi}{\partial \alpha_n} = \sum_g \omega_g \left[\frac{\partial \Phi^{grad}}{\partial (\nabla \alpha)_g} (\nabla N)_n^\alpha + [\lambda_g + r(\alpha_g - a_g)] N_n^\alpha \right]$$

$$F^\lambda|_n = \frac{\partial F_\Phi}{\partial \lambda_n} = \sum_g \omega_g (\alpha_g - a_g) N_n^\lambda$$

La matrice tangente s'écrit de la façon suivante :

$$K = \begin{pmatrix} \frac{\partial F^u}{\partial u} & \frac{\partial F^u}{\partial \alpha} & \frac{\partial F^u}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial F^\alpha}{\partial u} & \frac{\partial F^\alpha}{\partial \alpha} & \frac{\partial F^\alpha}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial F^\lambda}{\partial u} & \frac{\partial F^\lambda}{\partial \alpha} & \frac{\partial F^\lambda}{\partial \lambda} \end{pmatrix}$$

Le cadre des matériaux standards généralisés dans lequel s'inscrit notre modélisation à gradient de variable interne assure la symétrie de la matrice tangente. Il suffit donc de calculer la matrice triangulaire inférieure :

$$\begin{aligned} \frac{\partial F^u|_n}{\partial u_m} &= \sum_g \omega_g B_m^u \cdot \frac{\partial \sigma_g}{\partial \varepsilon_g} : B_n^u \\ \frac{\partial F^\alpha|_n}{\partial u_m} &= - \sum_g \omega_g r B_m^u \frac{\partial a_g}{\partial \varepsilon_g} N_n^\alpha \\ \frac{\partial F^\alpha|_n}{\partial \alpha_m} &= \sum_g \omega_g \left[(\nabla N)_m^\alpha \frac{\partial^2 \Phi^{grad}}{\partial^2 (\nabla \alpha)_g} (\nabla N)_n^\alpha + r N_m^\alpha \left(1 - \frac{\partial a_g}{\partial \alpha_g} \right) N_n^\alpha \right] \\ \frac{\partial F^\lambda|_n}{\partial u_m} &= - \sum_g \omega_g B_m^u \frac{\partial a_g}{\partial \varepsilon_g} N_n^\lambda \\ \frac{\partial F^\lambda|_n}{\partial \alpha_m} &= \sum_g \omega_g N_m^\alpha \left[1 - \frac{\partial a_g}{\partial \alpha_g} \right] N_n^\lambda \\ \frac{\partial F^\lambda|_n}{\partial \lambda_m} &= - \sum_g \omega_g N_m^\lambda \frac{\partial a_g}{\partial \lambda_g} N_n^\lambda \end{aligned}$$

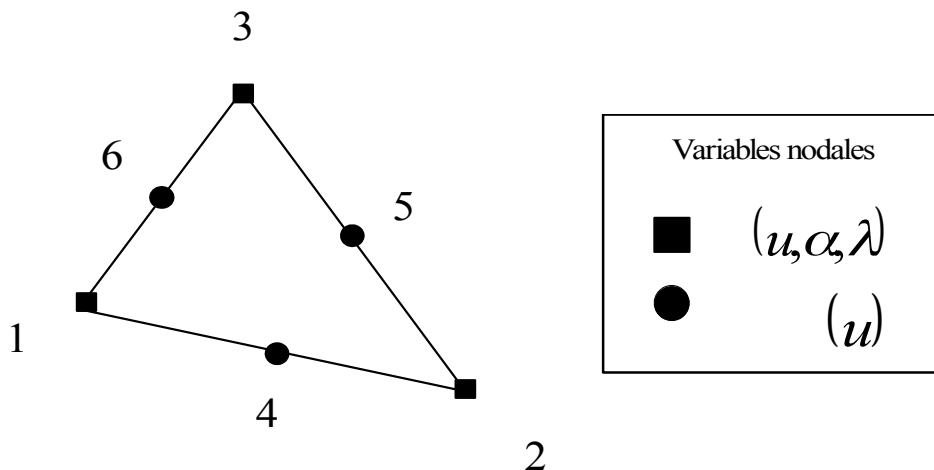
2 Choix des éléments finis

L'introduction de nouvelles variables nodales impose d'utiliser des éléments compatibles avec la nouvelle formulation. On se trouve en présence de trois inconnues nodales : les déplacements u , la variable régularisée α et le multiplicateur de Lagrange λ .

Le champ de variable interne étant lié aux déformations par l'intermédiaire du critère, il est préférable de prendre le même degré d'interpolation pour le champ de variable interne régularisée α que pour la déformation, c'est-à-dire un degré de moins que les déplacements dont sont dérivées les déformations. On choisit le même degré d'interpolation pour le multiplicateur de Lagrange λ que pour la variable régularisée α .

On considère donc des fonctions de formes P^2 pour u , P^1 pour α et P^1 pour λ . Les éléments quadratiques, TRIA6 et QUAD8 pour le 2D, TETRA10, PENTA15 et HEXA20 pour le 3D, ont été développés. Les composantes du déplacement sont affectées à tous les nœuds de l'élément

alors que les composantes des deux autres variables nodales ne sont affectées qu'aux nœuds sommets. Pour plus de clarté, l'élément TRIA6 est représenté ci-dessous :



On utilise les familles de points de Gauss des éléments linéaires correspondants, ce qui se traduit par une sous-intégration sur les déplacements. L'utilisation des familles de points de Gauss des éléments quadratiques impliquerait une sur-intégration pour α et λ , provoquant des oscillations intempestives.

3 Modélisations disponibles

Ces différents éléments sont utilisés dans trois types de modélisations :

Calcul 2D en déformations planes :	D_PLAN_GRAD_VARI (cf [U3.13.06])
Calcul 2D en axisymétrie :	AXIS_GRAD_VARI (cf [U3.13.06])
Calcul 3D :	3D_GRAD_VARI (cf [U3.14.11])

Le mode contraintes planes n'est pas encore disponible.

4 Lois de comportement disponibles avec les modélisations GRAD_VARI

Les lois de comportement disponibles dans leur version non locale à gradient de variables internes sont les suivantes

ENDO_SCALAIRE	Loi de comportement élastique fragile isotrope régularisée (cf [R5.03.25])
ENDO_ISOT_BETON	Loi de comportement élastique fragile isotrope et unilatérale pour le béton (cf [R5.07.04])
VMIS_ISOT_LINE	Loi de comportement élasto-plastique à écrouissage isotrope linéaire (cf [R5.03.02])
VMIS_ISOT_TRAC	Loi de comportement élasto-plastique à écrouissage isotrope non linéaire avec courbe de traction (cf [R5.03.02])

5 Conseils/Procédure pour la mise en oeuvre d'une nouvelle loi de comportement à gradients de variables internes

Comme on l'a vu dans la section 1.4, l'implantation d'une nouvelle loi de comportement à gradient de variables internes, à partir d'une loi locale, est relativement simple, pour peu que la loi locale respecte le cadre des matériaux standards généralisés, et plus particulièrement, que le critère d'évolution des variables internes fasse intervenir une fonction seuil convexe par rapport aux forces thermodynamiques associées aux variables internes (la force thermodynamique associée à la variable α est définie comme suit : $F^a = -\frac{\partial W}{\partial a}$ où W est l'énergie libre de la structure) et que l'on adopte une loi d'écoulement normale pour calculer l'évolution des variables internes.

Le tableau ci-dessous résume les étapes pour passer d'une loi de comportement locale à une loi de comportement non locale :

Type	Modèle local	Modèle non local
Force thermodynamique	$F^{a\ local}$	$F^{a\ non\ local} = F^{a\ local} + \lambda + r\alpha - ra$
Fonction seuil / critère	$f[F^{a\ local}] \leq 0$	$f[F^{a\ non\ local}] \leq 0$ Il s'agit de la même fonction seuil mais dépendant d'une force thermodynamique modifiée
Évolution (écoulement normal) (η multiplicateur de Lagrange)	$\Delta a = \Delta \eta \frac{\partial f}{\partial F^{a\ local}}$	$\Delta a = \Delta \eta \frac{\partial f}{\partial F^{a\ non\ local}}$ Dans les faits, il suffit d'adapter la résolution du critère à la nouvelle force thermodynamique
Contrainte	$\sigma(\varepsilon, a)$	$\sigma(\varepsilon, a)$ L'expression de la contrainte est inchangée
Matrice tangente	$\frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon}$	$\frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon}$ inchangé $\frac{\partial a}{\partial \varepsilon}, \frac{\partial a}{\partial \lambda}$ (termes supplémentaires)

Le développeur d'une nouvelle loi de comportement non locale devra se baser sur les sources des lois d'ores et déjà implantées pour voir comment les termes supplémentaires (termes régularisants et termes supplémentaires de la matrice tangente) doivent être passés dans les différentes routines. Toute la partie concernant la construction du vecteur force interne et de la matrice de correction au niveau global n'a pas à être modifiée par le développeur, il suffit en effet de respecter les règles de programmation en vigueur pour les lois déjà implantées.

6 Bibliographie

- 1) LORENTZ E. : "Lois de comportement à gradients de variables internes : construction, formulation variationnelle et mise en œuvre numérique", Thèse de doctorat de l'université Paris 6, 27 avril 1999.

- 2) HALPHEN B., NGUYEN Q. S. : "Sur le matériaux standards généralisés", Journal de Mécanique, Vol. 14, N° 1, 1975.

7 Description des versions du document

Version Aster	Auteur(s) Organisme(s)	Description des modifications
9.2	V.GODARD	Texte initial