Universitat Rovira i Virgili

MFRONT – Estudio de los materiales

Jordi Alberich Domingo

TRABAJO FINAL DE MÁSTER

dirigido por el Dr. Gerard Fortuny Anguera
y la Dra. M. Dolors Puigjaner Riba

MÁSTER EN INGENIERÍA COMPUTACIONAL Y MATEMÁTICAS

Reus, Tarragona
2017

FICHA DEL TRABAJO FINAL de MÁSTER

Título del trabajo:	MFRONT – Estudio de los materiales
Nombre del autor:	Jordi Alberich Domingo
Nombre de los directores:	Dr. Gerard Fortuny Anguera Dra. M.Dolors Puigjaner Riba
Fecha de entrega (mm/aaaa):	06/2017
Área del Trabajo Final de Máster:	Simulación numérica
Titulación:	*Máster en Ingeniería Computacional y Matemáticas*

Resumen del Trabajo:

En el estudio del comportamiento de una determinada estructura hay que tener en cuenta las características del material del que está formada y es difícil que los programas de cálculo tengan en su base de datos las características del comportamiento de todos los materiales.

Para solucionar este problema, existe MFRONT, que se trata de una herramienta con licencia LGPL o, dicho de otra forma, de *software libre,* destinada a la generación de código para el estudio de los materiales.

El código generado se integrará al programa Code-Aster mediante el conjunto Salome-meca para generar el estudio deseado.

Al hablar de *software libre* se acostumbra a confundir con que se trata de software gratuito. Pero no se trata de su precio, pues, aunque se trate de software libre, este puede ser vendido comercialmente. Cuando se habla de software libre, realmente se refiere a que puede ser utilizado, copiado, estudiado, modificado i redistribuido libremente.

Referente a Mfront, existe en la actualidad bastante material en internet que explica su uso, pero está disperso y no siempre es lo suficientemente especifico. Por eso, el objetivo de este trabajo es de realizar una pequeña guía de uso del programa.

Abstract:

In the study of the behaviour of a given structure, it is necessary to take into account the characteristics of the material of which it is formed and it is difficult for the calculation programs to have in their database the characteristics of the behaviour of all the materials.

To solve this problem, there is MFRONT, which is a LGPL licensed tool or, in other words, free software, aimed at generating code for the study of materials.

The generated code will be integrated into the Code-Aster program through the Salome-Meca set to generate the desired study.

Speaking of “free software” is usually confused with that it is free. But it is not about its price, because even if it is free, it can be sold commercially. When talking about free software, it really means that it can be used, copied, studied, modified and freely redistributed.

Regarding Mfront, there is currently enough material on the internet that explains its use, but is dispersed and not always specific enough. Therefore, the objective of this work is to make a small user manual to use the program.

Palabras clave (entre 4 y 8):

Elementos finitos, propiedades materiales, código abierto, mfront, salome-meca

Agradecimientos

A través de estas líneas quiero mostrar mi agradecimiento al director de este trabajo, el Dr. Gerard Fortuny, por encontrar un espacio en su agenda para prestarme su magnífica y valiosa ayuda siempre que lo he necesitado durante la elaboración de este trabajo.

En segundo lugar, y no por eso menos importante, mi más profundo agradecimiento a mi esposa, Nuria Villaverde, por todo el apoyo que me ha brindado durante esta nueva etapa en mi carrera educativa y por darme toda la motivación necesaria para afrontar los nuevos retos que aparecen en nuestro camino. Por eso, quiero dedicar-le este trabajo a ella y a mi hija que lleva en su vientre a quien le deseo que llegue más allá de donde se lo proponga.

Índice

Lista de figuras

1 Introducción

Mfront ha sido desarrollado por las compañías CEA y EDF. CEA, específicamente, “CEA Cadarache” es uno de los centros de investigación de la Comisión de Energía Atómica y Energías Alternativas centrado en la energía nuclear, las nuevas tecnologías de energía y la biología de las plantas. Y, por otra parte, EDF es la principal empresa de generación y distribución eléctrica de Francia.

Mfront es un generador de código dedicado al conocimiento del material. A partir de un archivo que contiene la información física y numérica, mfront genera uno o más archivos C++ utilizables en distintos programas.

El conocimiento del material viene cubierto por tres partes:

- **Propiedades del material** (por ejemplo, el módulo de Young, la conductividad térmica, etc.)

- **Modelos puntuales simples**, como el inflamiento del material utilizado en los códigos de rendimiento de combustible.

- **Comportamientos mecánicos**. Los resultados numéricos de los comportamientos mecánicos generados reciben una atención particular.

Para ofrecer una solución adaptada a diferentes situaciones, este generador de código es compatible con varios programas de análisis. Hay diferentes interfaces disponibles para adaptar el código generado al software de destino.

Se proporcionan varias interfaces para los solucionadores de elementos finitos:

- Cast3M
- Code Aster
- Europlexus
- Abaqus Standard
- Abaqus Explicit
- Zebulon

Y para los solucionadores de transformada rápida de Fourier TMFFT y AMITEX FFTP desarrollados internamente en CEA.

Para las propiedades de los materiales, también se proporcionan varias interfaces y cubren los siguientes lenguajes: C, C++, Python, Fortran, etc.

1.1 Cómo funciona: un primer ejemplo

Para poder hacernos a la idea de cómo funciona MFront, empezaremos con un ejemplo práctico de la implementación de la ley de comportamiento de Norton.

1.1.1 La ley de comportamiento de Norton

Teniendo en cuenta que el objetivo de este trabajo es el funcionamiento de MFront y no el entendimiento del comportamiento de los materiales o de las leyes como la que se describe en este punto, no se entrará en más detalle que el necesario en lo que no se refiera al propio programa.

Así que, a modo de resumen, la ley de Norton es una ley de comportamiento "viscoplástica", es decir, una ley que estipula que el comportamiento de deformación permanente de un material depende de la intensidad y la velocidad de carga.

Esta ley viene definida por:

$$\begin{cases} \underline{\epsilon}^{to} = \underline{\epsilon}^{el} + \underline{\epsilon}^{vis} \\ \underline{\sigma} = \underline{\underline{D}} : \underline{\epsilon}^{el} \\ \underline{\dot{\epsilon}}^{vis} = \dot{p}\underline{n} \\ \dot{p} = A\sigma_{eq}^{m} \end{cases}$$

Donde $\underline{\underline{D}}$ viene calculado a partir del modulo de Young *E* y del coeficiente de Poisson *V.*

Sin entrar en detalle sobre la función de cada variable, para integrar esta ley en un cálculo de estructura, se debe discretizar en el tiempo definiendo una sucesión de instantes de calculo $\{t_i\}_{1\leq i\leq I}$ y reemplazando las derivadas respecto el tiempo por los incrementos en el intervalo $\Delta t = t_i - t_{i-1}$:

$$\begin{cases} \Delta\underline{\epsilon}^{el} - \Delta\underline{\epsilon}^{to} + \Delta p\underline{n} = 0 \\ \Delta p - \Delta t A\sigma_{eq}^{m} = 0 \end{cases}$$

Donde se obtiene un sistema de 7 ecuaciones: 6 ecuaciones relativas a la descomposición aditiva de la deformación de los tensores (en 3D), y una ecuación relativa al flujo visco-plastico. Las 7 incógnitas son las 6 componentes de $\Delta\underline{\epsilon}^{el}$ y Δp.

La resolución implícita del sistema se hace por un método de Newton.

1.1.2 Implantación de la Ley de Norton en MFront

A continuación, en la Ilustración 1, se muestra un ejemplo de la implantación del resultado obtenido de la resolución implícita del punto anterior a un archivo MFront, donde tan solo se necesita escribir el siguiente código con un editor de texto sin formato y guardar-lo con extensión "*.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-12){
    n = 1.5*deviator(sig)/seq ;
  }
  feel += dp*n-deto ;
  fp -= dt*A*pow(seq,m) ;
} // end of @Integrator

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

Ilustración 1: Implantación Ley de Norton, 'Norton.mfront'

Un fichero *mfront* empieza normalmente por una parte descriptiva indicando el algoritmo utilizado para la resolución, el nombre del comportamiento (en este caso Norton), y a continuación la lista de materiales utilizados, la definición de las variables internas y finalmente la descripción de las ecuaciones del sistema a resolver.

`@Parser;` indica el método de integración que se utilizará.

`@Behaviour;` da el nombre del comportamiento.

`@Algorithm NewtonRaphson_NumericalJacobian;` informa del algoritmo utilizado.

`@RequireStiffnessTensor;` solicita el cálculo de la matriz de elasticidad. Esto generalmente indica que algunas propiedades de material extra serán introducidas y manejadas por la interfaz antes de la integración del comportamiento.

`@MaterialProperty;` define las propiedades del material de la ley.

`@StateVariable`; declara la variable interna p.

`@ComputeStress{};` introduce un bloque de código destinado a calcular el tensor simétrico de tensión.

`@Integrator{};` define las ecuaciones a resolver.

`@TangentOperator{};` introduce un bloque de código utilizado para definir el operador tangente. Este código se llama una vez que se han actualizado las variables de integración, las tensiones y las variables de estado auxiliares.

1.1.3 Compilación de Norton.mfront

Una vez creado el archivo con la extensión *".mfront"* se puede al fin compilar accediendo a su ubicación a través del *Terminal* y con la siguiente línea de comandos:

```
$ mfront --obuild --interface=aster Norton.mfront
```

Definiendo en el parámetro *--interface* el código que se desea utilizar, correspondiendo la interface *aster* a *Code_Aster*.

Esto genera dos directorios: *include* y *src* con varios archivos en cada uno, particularmente, en el directorio *src* se generan las librerías dinámicas:

*src/**libAsterBehaviour.so***

1.1.4 La utilidad MTest

La utilidad Mtest incluida en el paquete TFEL/MFront permite efectuar simulaciones para calcular la respuesta a las tensiones o deformaciones.

Para ello debemos crear un archivo con extensión *".mtest"* como el que se muestra a continuación en la Ilustración 2:

```
@Behaviour<aster> './src/libAsterBehaviour.so' 'asternorton' ;
@MaterialProperty<constant> 'YoungModulus' 178600.0E6 ;
@MaterialProperty<constant> 'PoissonRatio' 0.3 ;
@MaterialProperty<constant> 'A' 8.e-67 ;
@MaterialProperty<constant> 'm' 8.2 ;
@ExternalStateVariable 'Temperature' 293.15 ;
@ImposedStress 'SXX' { 0. :  0., 30. : 40.e6};
@ImposedStress 'SXY' { 0. :  0., 30. : 40.e6};
@Times {0.,30. in 100};
```

Ilustración 2: Norton.mtest

`@Behaviour` declara el comportamiento utilizado para la prueba. Se indica la interfaz utilizada por el comportamiento.

`@MaterialProperty` define una propiedad de material. En este caso <*constant*>, y a continuación se le define su valor.

`@ExternalStateVariable` permite al usuario especificar la evolución de las variables de estado externas, en este caso la temperatura.

`@ImposedStress` permite al usuario imponer la evolución de un componente de las tensiones.

`@Times` permite al usuario especificar una lista de tiempos utilizados para los cálculos.

Con el archivo *Norton.mtest* ya preparado, se puede ejecutar la simulación a través del *Terminal* con la siguiente línea de comandos:

```
$ mtest Norton.mtest
```

Esto generará un archivo *Norton.res* con el resultado numérico de la simulación el cual se puede representar gráficamente con, por ejemplo, *gnuplot*, dando un resultado como el de la Ilustración 3:

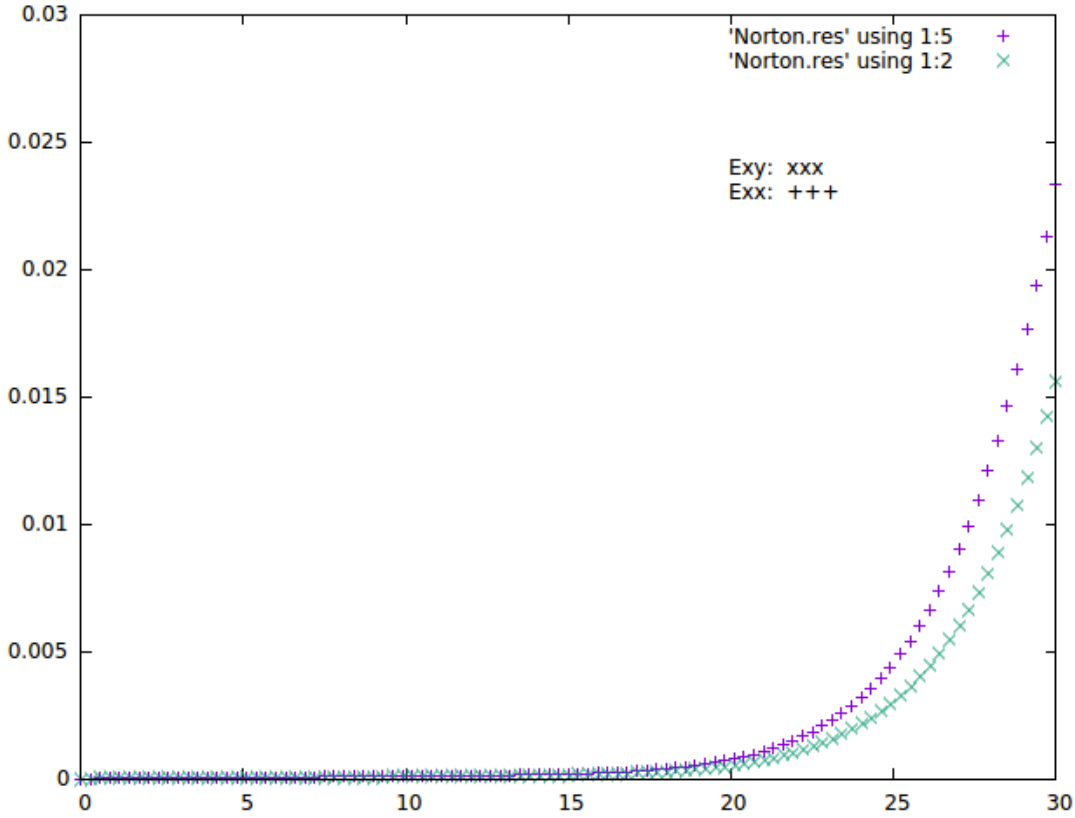


Ilustración 3: Respuesta representada gráficamente con gnuplot de Norton.res

2 Archivos .mfront

Tal y como se ha visto, la creación de los archivos de entrada en formato *".mfront"* consisten en la edición de un archivo de texto sin formato en el que se debe definir cada parte del código con una serie de instrucciones señalizadas con "@".

A lo largo de este apartado se describirán las instrucciones y parámetros de este archivo según su función. Todas las instrucciones disponibles se pueden ver en el Anexo 4: .

2.1 Estructura del archivo .mfront

Un archivo de entrada *.mfront* representa un único conocimiento de material, es decir, una propiedad material, una ley de comportamiento, o un modelo.

Este archivo de entrada se presenta como una lista de palabras clave, o instrucciones, empezando con el símbolo "@". Algunas partes del archivo están directamente escritas en C++, pues Mfront se basa en este lenguaje, aunque intenta reducir al mínimo su uso para hacerlo más accesible a las personas con menos capacidad de desarrollo informático.

Orden de las instrucciones: No se impone un orden en las instrucciones, aunque se debe destacar que MFront analiza el archivo secuencialmente, por lo que no permitirá el uso de una variable antes de ser declarada. Por ejemplo, será imposible especificar el rango de validez de la temperatura de una propiedad del material antes de declarar que dicha propiedad depende de la temperatura.

Comentarios: MFront acepta los dos tipos de comentarios de C++, es decir, los que empiezan por `/*` y terminan por `*/` pudiendo estos ocupar varias líneas, y los que empiezan por `//` extendiéndose estos tan solo hasta el final de la línea actual.

2.2 Uso de las instrucciones

El conocimiento de materiales soportado por MFront está clasificado en tres categorías:

- Las propiedades de los materiales.
- Los modelos.
- Las leyes de comportamiento mecánico.

Para tratar estos conocimientos, hay disponibles diferentes analizadores:

- *DefaultParser, DefaultCZMParser, DefaultFiniteStrainParser*: Estos analizadores son los más genéricos ya que no hacen ninguna restricción sobre el comportamiento o el método de integración que se puede utilizar.

- *Implicit:* Este analizador proporciona un integrador genérico basado en un esquema implícito. La deformación elástica no se define automáticamente com una variable de estado.

- *ImplicitII:* Este analizador proporciona un integrador genérico basado en un método *theta*. A diferencia de *Implicit*, la deformación elástica no se define automáticamente como una variable de estado.

- *ImplicitFiniteStrain*: Este analizador proporciona un integrador genérico basado en un método *theta*.

- *IsotropicMisesCreep*: Este analizador se usa para los comportamientos de flujo estándar de la forma $\dot{p} = f(s)$ donde p es la deformación equivalente y s la tensión equivalente.

- *IsotropicPlasticMisesFlow*: Este analizador se usa para los comportamientos de plásticos estándar con superficie de rendimiento de la forma $f(s,p) = 0$.

- *IsotropicStrainHardeningMisesCreep*: Este analizador se usa para los comportamientos de flujo de endurecimiento por deformación estándar de la forma $\dot{p} = f(s,p)$.

- *MaterialLaw*: Este analizador se usa para definir las propiedades del material.

- *Model*: Este analizador se usa para definir modelos de materiales simples.

- *MultipleIsotropicMisesFlows*: Este analizador se usa para definir comportamientos combinando varios flujos isotrópicos. Los tipos de flujos soportados son *'Creep'*$(\dot{p} = f(s))$, *'StrainHardeningCreep'* $(\dot{p} = f(s,p))$ y *'Plasticity'* $(f(s,p) = 0)$.

- *RungeKutta*: Este analizador proporciona un integrador genérico basado en uno de los muchos algoritmos Runge-Kutta.

La instrucción **`@Parser`** define el analizador con el que se trabajará, el cual tiene su propio conjunto de instrucciones admitidas, es decir, cada analizador admite ciertas instrucciones.

```
@Parser MaterialLaw;
```

Todas las instrucciones disponibles en MFront están clasificadas según los analizadores que las pueden usar en el "Anexo 1 – Instrucciones Disponibles".

A continuación, se describen algunas de las instrucciones más comunes.

2.2.1 Instrucciones informativas

En este punto se describirán cuatro instrucciones opcionales cuyo objetivo es tan solo informativo.

`@Author` se usa para dar el nombre de quien ha escrito el archivo mfront.

```
@Author Jordi Alberich;
```

`@Description` describe la propiedad del material, el comportamiento o el modelo que se implementa en el archivo.

```
@Description{
     Aquí se suelen describir las referencias del
artículo o informe técnico del que se extrae la propiedad
del material, el comportamiento o el modelo.
     El nombre de los autores.
     Las modificaciones hechas.
}
```

`@Date` permite al usuario especificar cuándo se escribió el archivo mfront.

```
@Date 2016-11-23;
```

`@Material` permite al usuario especificar qué material es tratado por el archivo actual.

```
@Material UO2;
```

2.2.2 Importación de una definición e inclusión de otros archivos mfront

Para minimizar errores, con la instrucción `@MaterialLaw` MFront permite importar la definición de una ley material definida en un archivo mfront y compila, como parte de la biblioteca actual, una función utilizando la interfaz mfront.

Los archivos a importar se buscarán en este orden:

- A partir del directorio actual.
- A partir de los directorios especificados en la línea de comandos con `--search-path o --include`.
- A partir de los directorios especificados a través de la variable de entorno `MFRONT_INCLUDE_PATH`.

Como ejemplo, si se ha definido en un archivo:

```
@Parser MaterialLaw;
@Law ThermalExCoef;
@Material AE1307Inventado;
@Author Jordi Alberich;

//… … …
```

Este se podrá usar en otro con la instrucción `@MaterialLaw`:

```
@MaterialLaw "AE1307Inventado_ThermalExCoef.mfront";

@InitiLocalVariables {
     a = AE1307Inventado_ThermalExCoef(T+theta*dT);
}
```

Por otra parte, la instrucción `@Import` permite la inclusión de uno o varios archivos mfront externos.

Esta instrucción interrumpe el tratamiento del archivo actual e inicia el tratamiento secuencial de cada archivo a importar.

El orden de las rutas de búsqueda del archivo a importar será el mismo que en el caso de `@MaterialLaw`.

```
@Import "SlidingSystemsCC.mfront";
```

2.2.3 Instrucciones de compilación de librerías

Hay tres instrucciones relacionadas con la compilación de fuentes. Las instrucciones `@Include` y `@Link` tienen una importancia particular debido a que permiten utilizar características definidas en librerías C++ externas.

`@Library` permite al usuario especificar el nombre de la librería generada.

```
@Library LibreriaJordi;
```

`@Includes` presenta un bloque donde el usuario puede definir algunas instrucciones del preprocesador C++, normalmente instrucciones del tipo *#include*.

```
@Includes{
     #include<fstream>
     #include<TFEL/Material/Lame.hxx>
}
```

`@Link` se usa para vincular librerías generadas con librerías externas.

```
//link explicito con libm.so
@Link "-lm";
```

2.2.4 Gestión de límites

Hay variables de estado que pueden tener límites inherentes, como por ejemplo, una temperatura no puede ser negativa, o una porosidad superior a 1.

Para gestionar estos límites, se ofrecen estas instrucciones:

`@Bounds` que permite al usuario definir el dominio de validez.

Si la variable se encuentra fuera de sus límites, la mayoría de las interfaces permiten al usuario elegir una de las siguientes políticas:

- *`None`*, que significa que no hace nada.
- *`Warning`*, que muestra un mensaje, pero los cálculos no se detienen.
- *`Strict`,* que se detienen los cálculos con un mensaje de error.

```
@Bounds T in [293.15:873.15];
//El intervalo puede contener el infinito, representado por el carácter '*'.
```

@PhysicalBounds permite al usuario definir el dominio físico de una variable. En los esquemas implícitos, si se establecen límites físicos en una variable, esta variable se limita a satisfacerlos durante las iteraciones internas.

Si se encuentra que una variable está fuera de sus límites físicos, los cálculos se detienen. Las pruebas se realizan en diferentes etapas de integración dependiendo de la naturaleza de la variable.

```
@PhysicalBounds T in [0:*[;
//La temperatura (en Kelvin) no puede ser negativa.
```

2.2.5 Definición de parámetros

Para la definición de parámetros para las propiedades y leyes de comportamiento, se han definido las siguientes instrucciones:

@Parameter declara un nuevo parámetro o una lista de nuevos parámetros. Opcionalmente, el valor predeterminado de los parámetros declarados también se puede dar siguiendo varias sintaxis de asignación estándar de C++.

El valor predeterminado de un parámetro también se puede asignar después de su declaración utilizando la orden `setDefaultValue`.

```
@Parameter R0 = 500;
@Parameter Q1{10000},b1{0.00001};
@Parameter Q2(0),b2(0);
@Parameter fc;
fc.setDefaultValue(1.e-2);
```

Para el analizador *Model* unas instrucciones específicas, **@GlobalParameter** para definir los parámetros del modelo que se podrán usar en otros modelos, y **@LocalParameter** para definir parámetros especializados del modelo actual.

```
@GlobalParameter real a;
a.setDefaultValue(1.23);

@LocalParameter real b;
b.setDefaultValue(1.23);
```

2.2.6 La instrucción `@Function`

La instrucción **`@Function`** se usa en el analizador *MaterialLaw* y permite definir en código C++ la propiedad del material.

La salida predeterminada se denomina *res*, aunque se puede cambiar con la instrucción **`@Output`**.

Aunque la mayoría de interfaces usan el "*double"* para las operaciones con punto flotante, esto puede no ser siempre necesario. Se ha introducido un *typedef* especial llamado *real* recomendado para definir las variables locales.

```
@Function{
     const real C0 = 575.57;
     const real C1 = -21094.;
     Cp = C0+C1/T;
}
```

2.3 Propiedades del material

Las propiedades del material son uno de los elementos esenciales para el conocimiento del material. Una propiedad del material es una función de un conjunto de variables de estado termodinámico del material.

A continuación, se describirán los diferentes tipos de variables al escribir las propiedades del material a usar con el analizador *MaterialLaw*.

2.3.1 Variables de entrada

Las variables de entrada de las propiedades del material se definen con la instrucción **`@Input`**.

Se recomienda asociar a una variable de entrada un glosario o nombre de entrada con la orden `setGlossaryName`.

```
@Input T,p;
T.setGlossaryName("Temperature");
p.setGlossaryName("Porosity");
```

2.3.2 Variables de salida

Tal como ya se ha descrito en el punto “La instrucción @Function”, la instrucción **`@Output`** permite cambiar el nombre de la variable de salida que por defecto es “*res”.*

```
@Output b;
```

2.3.3 Variables estáticas

La instrucción **`@StaticVariable`** permite al usuario definir un valor constante. A diferencia de los parámetros definidos con `@Parameter`, los valores de las variables estáticas no se pueden cambiar después de la compilación.

Al definir este tipo de variable, se deberá indicar el tipo de constante y su valor.

```
@StaticVariable real A = 1.234e56;
```

2.3.4 Parámetros

La instrucción **`@Parameter`** ya se ha descrito en el punto “Definición de parámetros”.

2.3.5 Constantes

La instrucción **`@Constant`** permite al usuario definir un valor constante. Esta instrucción es sinónima de la instrucción `@StaticVariable` para una variable real.

```
@Constant A 1.234e56;
```

2.4 Modelos puntuales simples

Generalmente, se pueden distinguir dos tipos de modelos:

- Los modelos que requieren de una solución global sobre el conjunto del dominio considerado. Estos modelos generalmente tratan la distribución (térmica o química) y el equilibrio mecánico.

- Los modelos *"point"* que describen la evolución local del material de acuerdo con su estado termodinámico local. Este tipo de modelo incluye los modelos de producción de gas de fisión, concentración isotópica, la corrosión, etc.

MFront no procesa los modelos que requieren de una solución global, tan solo puede tratar los modelos tipo "*point*".

Para tratar estos modelos, MFront ofrece el analizador *Model.*

2.4.1 Instrucción @Model

Este analizador no ofrece muchas instrucciones, y la mayoría de ellas ya se han descrito en los puntos anteriores. Una de las únicas instrucciones que se puede encontrar de más es la instrucción **`@Model`** que tan solo permite al usuario definir el nombre del modelo.

```
@Model SolidSwelling;
```

2.5 Comportamientos mecánicos
1.1

Para el debido conocimiento del material, otro factor a tener en cuenta, sino quizás el más importante, es su comportamiento mecánico.

Los analizadores disponibles para definir los comportamientos mecánicos son:

- *DefaultParser* - *DefaultCZMParser*
- *DefaultFiniteStrainParser* - *Implicit*
- *ImplicitFiniteStrain* -*ImplicitII*
- *IsotropicMisesCreep* -*IsotropicPlasticMisesFlow*
- *IsotropicStrainHardeningMisesCreep*
- *MultipleIsotropicMisesFlows -RungeKutta*

Como se puede prever, el estudio de los comportamientos mecánicos podría llegar a ser muy extenso, y teniendo en cuenta que lo que se busca aprender en este trabajo es el uso de MFront, tan solo se describirán algunas de las instrucciones y funciones (no vistas en los puntos anteriores) sin entrar en demasiado detalle como qué métodos o analizadores usar y porqué.

2.5.1 Instrucciones particulares

`@Algorithm` se usa para seleccionar el algoritmo numérico. Esta instrucción está disponible en los analizadores Implícitos y Runge-Kutta.

Los algoritmos disponibles para los analizadores Implícitos son:

- *NewtonRaphson* - *NewtonRaphson_NumericalJacobian*
- *PowellDogLeg_NewtonRaphson*
- *PowellDogLeg_NewtonRaphson_NumericalJacobian*
- *Broyden* - *Broyden2*
- *PowellDogLeg_Broyden*
- *LevenbergMarquardt* - *LevenbergMarquardt_NumericalJacobian*

Y los algoritmos disponibles para el analizador Runge-Kutta son:

- *Euler*
- *rk2*
- *rk4*
- *rk42*
- *rk54*
- *rkCastem*

```
//Ejemplo en dsl Implicito
@Algorithm NewtonRaphson;

//Ejemplo en dsl Runge-Kutta
@Algorithm rk54;
```

`@ModellingHypotheses` permite especificar las hipótesis de modelado. Las hipótesis válidas serán las siguientes:

- *AxisymmetricalGeneralisedPlaneStrain*
- *Axisymmetrical*
- *PlaneStress*
- *PlaneStrain*
- *GeneralisedPlaneStrain*
- *Tridimensional*

`@OrthotropicBehaviour` declara que el material es ortótropo, es decir, que tiene dos o tres ejes ortogonales entre sí, de doble simetría rotacional, de forma que sus propiedades mecánicas son, en general, diferentes en las direcciones de cada uno de esos ejes.

```
@OrthotropicBehaviour;
```

`@IsotropicElasticBehaviour` declara que el comportamiento elástico es isotrópico incluso si el material ha sido declarado ortótropo. Esta declaración afecta al comportamiento `@RequireStiffnessTensor`.

```
@IsotropicElasticBehaviour;
```

`@RequireStiffnessTensor` requiere que el código calcule la rigidez del tensor. Esto generalmente significa que se introducirán algunas propiedades de material extra y serán usadas por la interfaz antes de la integración del comportamiento.

```
@RequireStiffnessTensor true;
```

@RequireThermalExpansionCoefficientTensor requiere que el código calcule el tensor del coeficiente de expansión térmica.

```
@RequireThermalExpansionCoefficientTensor true;
```

@MaterialProperty permite al usuario una varias propiedades del material. Se le debe especificar el tipo de propiedad del material y una lista de los nombres de las propiedades. Se recomienda asociar a una propiedad del material un glosario o nombre con las ordenes `setGlossaryName` o `setEntryName`.

```
@MaterialProperty stress young;
young.setGlossaryName("YoungModulus");
```

@Sources permite al usuario definir un bloque de código que se integrará a las fuentes generadas de un comportamiento. Esto permite al usuario implementar sus propias clases o funciones. Estas declaraciones de tales clases o funciones pueden realizarse en un bloque de código introducido por la instrucción `@Includes`.

```
@Includes{
     void f(void);  //declaración de la función f
}

@Sources{
     void f(void){
          std::cout <<"Ejemplo de una función"<< std::endl;
     }
}
```

@TangentOperator introduce un bloque de código utilizado para definir el operador tangente. Este código se llama una vez que se han actualizado las variables de integración, las tensiones y las variables de estado auxiliares.

El tipo de operador tangente solicitado está dado por la variable `smt` *(Stiffness matrix type)*, cuyos posibles valores serán *"*`ELASTIC`*"*, *"*`SECANT`*"*, *"*`TANGENTOPERATOR`*"* y *"*`CONSISTENTTANGENTOPERATOR`*"*.

```
@TangentOperator{
     if((smt==ELASTIC)||(smt==SECANTOPERATOR)){
          Dt = 0;

     } else if (smt==CONSISTENTTANGENTOPERATOR){
          Dt = De * Je;
     } else {
      return false;
     }
}
```

@UpdateAuxiliaryStateVariables introduce un bloque de código destinado a actualizar las variables de estado auxiliares después de la integración.

En los lenguajes específicos de dominio implícito, el código declarado por `@UpdateAuxiliaryStateVariables` se llama una vez que se han actualizado las variables de integración (incluidas las variables de estado) y las tensiones. Las variables de estado externas no se actualizan.

En los lenguajes específicos de Runge-Kutta, el código declarado por `@UpdateAuxiliaryStateVariables` se llama después de cada paso de tiempo exitoso. Hay que tener en cuenta que la mayoría de algoritmos de Runge-Kutta realiza subescalas internas, en este caso, el código declarado por `@UpdateAuxiliaryStateVariables` puede ser llamado varias veces durante la integración del comportamiento. Una variable adicional llamada `dt_`, que es menor que el incremento de paso de tiempo total *dt* si se realizan subpasos, da el incremento de tiempo actual.

```
//Ejemplo dsl Implícito
@UpdateAuxiliaryStateVariables{
     const real q_ = q-(1 - theta)*dq;
     const real Q = Q0+(Qm-Q0)*(1-exp (-2*Mu*q_));
     R+=b*(Q-R)*dp;
}

//Ejemplo dsl Runge-Kutta
@UpdateAuxiliaryStateVariables{
     sigeq = sqrt(sig|sig};
}
```

@MaximumNumberOfIterations le permite al usuario definir el número máximo de iteraciones.

```
@MaximumNumberOfIteration 200;
```

@Theta se usa para definir el valor predeterminado del parámetro θ usado por los esquemas implícitos. Si no se usa esta instrucción, los lenguajes de dominio implícito le asignan su propio valor predeterminado (0.5 o 1).

El valor de θ debe estar entre el rango (`]0:1]`).

El valor de θ se puede cambiar durante la ejecución modificando el parámetro *theta*.

```
@Theta 0.5;
```

`@Epsilon` permite al usuario definir el valor del criterio de convergencia.

Este valor se puede cambiar durante la ejecución modificando el parámetro *epsilon*.

```
@Epsilon 1.e-12;
```

`@ComputeStress` introduce un bloque de código destinado a calcular el tensor simétrico de tensión. Esta instrucción interpreta el código para generar dos métodos:

- El primero se utiliza antes del paso de integración, utilizando valores actualizados para las variables de estado y las variables de estado externas.

- El segundo es un candidato para el cálculo del estrés al final de la integración. Este candidato se utiliza si el usuario no proporciona una forma adecuada de calcular el estrés al final del paso de tiempo utilizando la instrucción `@ComputeFinalStress`.

Si el usuario proporciona una forma de calcular el estrés al final del paso con la instrucción `@ComputeFinalStress`, se considerará que el uso de `@ComputeStress` no tiene sentido y aconseja al usuario calcular de forma explícita el esfuerzo como parte del paso de integración.

```
@ComputeStress{
      sig = (1-d)*(lambda*trace(eel)*Stensor::Id()+2*mu*eel);
}
```

3 Linea de comandos

En este apartado se describirá como usar MFront en línea de comandos una vez ya elaborado el archivo *.mfront*.

La forma genérica de uso de MFront es la siguiente:

```
$ mfront [opciones] [archivos]
```

3.1 Opciones disponibles

Las opciones disponibles para usar en línea de comandos con MFront son las siguientes:

`--analyser` permite al usuario especificar el analizador a utilizar.

`--build` genera el *MakeFile* y construye las librerías.

`--clean` genera el *MakeFile* y limpia las librerías.

`--debug` establece el modo de depuración (elimina las referencias al archivo inicial)

`--help` muestra las opciones disponibles. También se puede usar **`-h`**.

`--help-command` y **`-help-keyword`** muestran la ayuda asociada a la instrucción dada según el analizador indicado como se puede ver en la Ilustración 4.

```
jordi@jordi-VirtualBox:~/Documentos$ mfront --help-command=MaterialLaw:@Author
The `@Author` keyword is used give the name of the person who wrote
the `mfront` file.

All the following words are appended to the author's name up to a
final semi-colon.

Note: The name of the person who formulated the material property,
behaviour or model shall be given in the description section (see the
`@Description` keyword).

## Example

~~~~ {#Author .cpp}
@Author Éric Brunon;
~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~
```

Ilustración 4: --help-command, descripción instrucción

--help-commands-list y **-help-keywords-list** muestran una lista de las instrucciones disponibles según el analizador dado tal como se muestra en la Ilustración 5

```
jordi@jordi-VirtualBox:~/Documentos$ mfront --help-commands-list=MaterialLaw
@Author             (documented)
@Bounds             (documented)
@Constant           (documented)
@DSL                (documented)
@Date               (documented)
@Description        (documented)
@Function           (documented)
@Import             (documented)
@Includes           (documented)
@Input              (documented)
@Interface          (documented)
@Law                (documented)
@Library            (documented)
@Link               (documented)
@MFront             (documented)
@Material           (documented)
@MaterialLaw        (documented)
@Namespace          (undocumented)
@Output             (documented)
@Parameter          (documented)
@Parser             (documented)
@PhysicalBounds     (documented)
@StaticVar          (documented)
@StaticVariable     (documented)
@UseTemplate        (undocumented)
jordi@jordi-VirtualBox:~/Documentos$
```

Ilustración 5: --help-commands-list, lista de instrucciones.

--include y **--search-path** añaden una nueva ruta al principio de las rutas de búsqueda. También se puede usar como **-I.**

--interface especifica la interfaz a usar.

--list-parsers muestra una lista de los analizadores disponibles añadiendo también una pequeña descripción de ellos como la descrita en el punto “ Uso de las instrucciones”.

--make genera el archivo *Makefile*.

-nodeps evita la inclusión de reglas de dependencia en el archivo generado *Makefile.mfront*. Esta opción fue introducida para evitar algunos problemas en Windows.

--nomelt evita fusionar directorios de librerías.

--obuild, --omake genera el archivo *Makefile* con compilaciones optimizadas y crea las librerías. También se puede usar como **-b** o **-m**.

--otarget permite compilar solo las librerías de manera optimizada.

--silent-build activa o desactiva esta opción para desplegar las líneas de compilación utilizadas.

`--target` permite compilar solo las librerías. También se puede usar como **`–t`**.

`--verbose` establece el nivel de verbosidad pudiendo ser:

- `quiet` establece el nivel mínimo.
- `level1`, `level2` y `level3` establece los niveles crecientes.
- `debug` y `full` son generalmente para desarrollo.

`--version` muestra la versión instalada. También se puede usar como **`–v`**.

`--warning` imprime los avisos. También se puede usar como **`–W`**.

`--win32` permite la compilación de las librerías dinámicas para un sistema Windows.

4 MTest

MTest es una herramienta de simulación del comportamiento mecánico de un punto material.

Con esta herramienta, el usuario puede simular varios ensayos mecánicos simples, por ejemplo:

- La mayoría de ensayos “multi-céntricos”.
- Pruebas de tensión/compresión.
- Ensayos de corte.
- Ensayos de flujo.
- Ensayos de relajación.
- Prueba “SATOH”.
- Ensayos de presión interna en un tubo.

Los resultados obtenidos se pueden comparar con las soluciones analíticas o soluciones de referencia. En la salida, se crean dos archivos:

- Un archivo de texto que contiene la evolución de todas las variables internas.
- Un archivo XML que contiene el resultado de las diversas comparaciones.

4.1 Opciones de MTest

La forma genérica de uso de MTest es la siguiente:

```
$ mtest [opciones] [archivos]
```

Siendo las siguientes opciones disponibles:

`--backtrace`: pila del proceso de impresión al obtener las señales SIGSEGV (error de segmentación) o SIGFPE (excepción matemática). También se puede usar **`-bt`**.

`--floating-point-exceptions`: controla las excepciones de punto flotante a través de las señales SIGFPE. También se puede usar como **`-fpe`**.

`--help`: muestra las opciones disponibles. También se puede usar como **`-h`**.

`--help-command` y **`--help-keyword`**: muestran la ayuda asociada a la instrucción dada.

`--help-commands-list` y **`--help-keywords-list`**: muestran una lista de las instrucciones disponibles tal y como se puede ver en la Ilustración 6.

`--residual-file-output`: control de salida residual ('No' por defecto).

`--result-file-output`: control de la salida del resultado ('Si' por defecto).

`--verbose`: establece el nivel de verbosidad pudiendo ser:

- `quiet` establece el nivel mínimo.
- `level1`, `level2` y `level3` establece los niveles crecientes.
- `debug` y `full` son generalmente para desarrollo.

`--version`: muestra la versión instalada. También se puede usar como **`-v`**.

`--xml-output`: salida xml de control ('No' por defecto).

```
root@jordi-VirtualBox:~# mtest --help-commands-list
@AccelerationAlgorithm                          (documented)
@AccelerationAlgorithmParameter                 (documented)
@Author                                         (documented)
@Behaviour                                      (documented)
@CastemAccelerationPeriod                       (documented)
@CastemAccelerationTrigger                      (documented)
@CohesiveForce                                  (documented)
@CohesiveForceEpsilon                           (documented)
@CompareToNumericalTangentOperator              (documented)
@Date                                           (documented)
@DeformationGradient                            (documented)
@DeformationGradientEpsilon                     (documented)
@Description                                    (documented)
@DrivingVariable                                (undocumented)
@DrivingVariableEpsilon                         (undocumented)
@Evolution                                      (documented)
@ExternalStateVariable                          (documented)
@HandleThermalExpansion                         (undocumented)
@ImposedCohesiveForce                           (undocumented)
@ImposedDeformationGradient                     (documented)
@ImposedDrivingVariable                         (undocumented)
@ImposedOpeningDisplacement                     (undocumented)
@ImposedStrain                                  (documented)
@ImposedStress                                  (documented)
@ImposedThermodynamicForce                      (undocumented)
@IntegerParameter                               (documented)
@InternalStateVariable                          (documented)
@MaterialProperty                               (documented)
@MaximumNumberOfIterations                      (documented)
@MaximumNumberOfSubSteps                        (documented)
@ModellingHypothesis                            (documented)
@NumericalTangentOperatorPerturbationValue      (documented)
@OpeningDisplacement                            (undocumented)
@OpeningDisplacementEpsilon                     (undocumented)
@OutOfBoundsPolicy                              (documented)
@OutputFile                                     (documented)
@OutputFilePrecision                            (documented)
@Parameter                                      (documented)
@PredictionPolicy                               (documented)
@Real                                           (documented)
@ResidualFile                                   (undocumented)
@ResidualFilePrecision                          (undocumented)
@RotationMatrix                                 (documented)
@StiffnessMatrixType                            (documented)
@StiffnessUpdatePolicy                          (documented)
@Strain                                         (documented)
@StrainEpsilon                                  (documented)
@Stress                                         (documented)
@StressEpsilon                                  (documented)
@TangentOperatorComparisonCriterium             (undocumented)
@Test                                           (documented)
@ThermodynamicForce                             (undocumented)
@ThermodynamicForceEpsilon                      (undocumented)
@Times                                          (documented)
@UnsignedIntegerParameter                       (documented)
@UseCastemAccelerationAlgorithm                 (documented)
```

Ilustración 6: --commands-list, instrucciones de mtest.

4.2 Estructura del archivo .mtest

Los archivos *.mtest* toman la misma estructura que los archivos *.mfront*. Se presentan como una lista de instrucciones que empiezan por el símbolo "`@`". Algunas de estas instrucciones pueden tener opciones asociadas dadas entre los símbolos "<" y ">".

Comentarios: MTest también acepta los dos tipos de comentarios de C++, es decir, los que empiezan por **`/*`** y terminan por **`*/`** pudiendo estos ocupar varias líneas, y los que empiezan por **`//`** extendiéndose estos tan solo hasta el final de la línea actual.

Lectura de un número real: En varios lugares del archivo de entrada se requiere un número real. Si se proporciona una cadena, el contenido de esta cadena se interpreta como una fórmula matemática y es posible utilizar variables definidas anteriormente, siempre que sean constantes en el tiempo.

Descripción de una evolución temporal: La evolución en el tiempo de determinadas variables son datos esenciales para ser proporcionados por el usuario. Estos acontecimientos pueden ser reportados de dos maneras:

- Por una descripción discreta. Una constante evolución viene dada por un único valor real. Desarrollos complejos pueden ser devueltos como matrices asociativas que asocian el valor de tiempo de la evolución. Entre estos tiempos, la evolución es lineal. Más allá del tiempo extremo, el cambio es constante.

- Por una función explícita de tiempo, dado como una cadena de caracteres. Es posible reutilizar las evoluciones declaradas anteriormente o utilizar el tiempo, que corresponde a la variable *t*, de forma explícita.

4.3 Instrucciones

A continuación, se detallarán algunas de las instrucciones más significativas de MTest.

`@Author` se utiliza para dar el nombre de la persona que escribió el archivo *.mtest*.

```
@Author Jordi Alberich;
```

`@Behaviour` declara el comportamiento utilizado para la prueba. Esta instrucción debe ir seguida de una opción que especifique la interfaz utilizada por el comportamiento. Están disponibles las interfaces `castem`, `cyrano` y `aster`.

Se esperan dos cadenas, la biblioteca en la que se implementa el comporamiento, y el nombre de la función.

```
@Behaviour<castem> 'libMFrontCastemBehaviours.so' 'umatnorton';
```

`@CastemAccelerationPeriod` especifica el número de iteraciones entre dos llamadas al algoritmo de aceleración.

```
@CastemAccelerationPeriod 3;
```

`@Date` permite al usuario especificar cuándo se escribió el archivo *.mtest*.

```
@Date 2016-11-28;
```

`@Description` permite dar una descripción del test implementado en el archivo.

```
@Description{
     "Descripción del test a realizar"
}
```

`@Evolution` especifica una función del tiempo.

Esta instrucción puede tener una opción, que es la forma en que se definirá la evolución. Se aceptan dos valores: `evolution` y `function`. Si no se especifica ninguna opción, se elige la opción de `evolution`.

A continuación se define, en forma de cadena, el nombre de la evolución.

Si se ha seleccionado la opción de `evolution`, el usuario puede especificar una evolución constante simplemente dando su valor. De lo contrario, las evoluciones complejas se pueden construir utilizando una matriz asociativa donde la clave es

el tiempo y el valor de la evolución. Entre dos tiempos, los valores serán interpolados linealmente. Antes del primer tiempo declarado dado, se utiliza el valor correspondiente a esta primera vez. Después de la última vez dada, se utiliza el valor correspondiente a esta última vez.

Si se ha seleccionado la opción de `function`, se espera una cadena que se interpretará como una función del tiempo. El tiempo está representado por la variable *t*.

```
//Evolución constante
@Evolution 'Pressure' 1.e5;

//Evolución lineal
@Evolution 'Pressure' {0:0.,1.:1.e5};

//Función
@Real P0 2.e5
@Real P1 4.e5
@Evolution<function> 'Pressure' 'P0+(P1-P0)*t**2';
```

`@ExternalStateVariable` permite al usuario especificar la evolución de las variables de estado externas, incluida la temperatura que generalmente se define por defecto en las interfaces de comportamiento.

Esta instrucción puede tener una opción asociada, que es la forma en que se definirá la evolución. Al igual que en la instrucción `@Evolution`, se aceptan dos valores, `evolution` y `function`.

```
//Evolución constante
@ExternalStateVariable 'Temperature' 293.15;

//Evolución lineal
@ExternalStateVariable 'Temperature' {0:293.15,1.:800};

//Función
@Real T0 293.15
@Real T1 400.15
@ExternalStateVariable<function>'Temperature''T0+(T1-T0)*t**2';
```

@ImposedStrain permite al usuario imponer la evolución de un componente de las tensiones.

Esta instrucción puede tener asociada una opción que corresponde a la forma en que se definirá la evolución, pudiendo ser `evolution` o `function` (`evolution` por defecto). A continuación, se especificará el nombre del componente de las tensiones.

Son válidos los siguientes nombres de componentes según la hipótesis de modelado:

- *AxisymmetricalGeneralisedPlaneStrain*: `ERR EZZ ETT`.
- *Axisymmetrical*: `ERR EZZ ETT ERZ`.
- *PlaneStress*: `EXX EYY EZZ EXY`.
- *PlaneStrain*: `EXX EYY EXY`.
- *GeneralisedPlaneStrain*: `EXX EYY EZZ EXY`.
- *Tridimensional*: `EXX EYY EZZ EXY EXZ EYZ`.

```
//Evolución constante
@ImposedStrain<evolution> 'EXX' 1e-3;

//Evolución lineal
@ImposedStrain<evolution> 'EXX' {0.:0.,1:1e-3};

//Función
@ImposedStrain<function> 'EXX' 'e0*sin(t/900.)';
```

@ImposedStress permite al usuario imponer la evolución de un componente de estrés.
El funcionamiento de esta instrucción es igual al de la anterior (`@ImposedStrain`), siendo válidos los siguientes nombres según la hipótesis de modelado:

- *AxisymmetricalGeneralisedPlaneStrain*: `SRR SZZ STT`.
- *Axisymmetrical*: `SRR SZZ STT SRZ`.
- *PlaneStress*: `SXX SYY SXY`.
- *PlaneStrain*: `SXX SYY SZZ SXY`.
- *GeneralisedPlaneStrain*: `SXX SYY SZZ SXY`.
- *Tridimensional*: `SXX SYY SZZ SXY SXZ SYZ`.

```
//Evolución constante
@ImposedStress 'SXX' 50.e6;

//Evolución lineal
@ImposedStress<evolution> 'SXX' {0.:0.,1:50e6};

//Función
@ImposedStress<function> 'SXX' 's0*sin(t/900.)';
```

@InternalStateVariable define el valor inicial de una variable de estado.

Si esta variable de estado interna es escalar, se espera un valor real. En cambio, si esta variable de estado interna es un tensor simétrico, se espera una matriz de valores reales del tamaño apropiado. Un tensor simétrico tiene 3 componentes en 1D, 4 componentes en 2D y 6 componentes en 3D. Los componentes fuera de las diagonales se declararán con un factor $\sqrt{2}$.

```
    @InternalStateVariable 'ElasticStrain' {'EELRR0' ,
'EELZZ0' , 'EELZZ0' ,0.};
```

@MaterialProperty define una propiedad de material. Sólo pueden usarse las propiedades mecánicas definidas por el comportamiento para la hipótesis de modelado considerada con la excepción de las expansiones térmicas:

- La expansión térmica isotrópica se define a través de la propiedad `ThermalExpansion`.
- La expansión térmica ortotrópica se define a través de las propiedades del material `ThermalExpansion1`, `ThermalExpansion2` y `ThermalExpansion3`.

A esta instrucción se le asocia como opción el tipo de propiedad material, pudiendo ser:

- `constant`: se deberá indicar su valor.
- `castem`: se deberá indicar el nombre de la biblioteca y el nombre de la función que implementa la propiedad material.
- `function`: se deberá definir la función.

```
    //constant
    @MaterialProperty<constant> 'YoungModulus' 150.e9;

    //castem
    @MaterialProperty<castem>                'YoungModulus'
'libIncone1600MaterialProperties.so'
'Incone1600_YoungModulus';
```

@Parameter especifica el valor de un parámetro real del comportamiento.

```
    @Parameter 'epsilon' 1.e-8;
```

@IntegerParameter especifica el valor de un parámetro entero del comportamiento.

```
    @IntegerParameter 'iter' 12;
```

@UnsignedIntegerParameter especifica el valor de un parámetro entero positivo del comportamiento.

```
@UnsignedIntegerParameter 'iterMax' 12;
```

@MaximumNumberOfIterations permite al usuario especificar el número máximo de iteraciones del algoritmo global para alcanzar el equilibrio.

Si el número de iteraciones alcanza el valor máximo autorizado, el paso de tiempo se divide por dos. El número máximo de sub-pasos se puede especificar usando la instrucción `@MaximumNumberOfSubSteps`.

```
@MaximumNumberOfIterations 10;
```

@MaximumNumberOfSubSteps permite al usuario especificar el número máximo de sub-pasos permitidos.

Cuando el algoritmo global no alcanza el equilibrio, el paso de tiempo puede dividirse por dos. El número máximo de veces que el paso de tiempo se reduce se da por el número máximo de sub-pasos.

```
@MaximumNumberOsSubSteps 10;
```

@ModellingHypotesis permite al usuario elegir la hipótesis de modelado a utilizar. Se admiten los siguientes valores dados como una cadena:

- `AxisymmetricalGeneralisedPlaneStrain` (1D).
- `Axisymmetrical` (2D).
- `PlaneStress` (2D).
- `PlaneStrain` (2D).
- `GeneralisedPlaneStrain` (2D).
- `Tridimensional` (3D).

La hipótesis de modelado cambia el nombre de los componentes de los tensores simétricos y sus números como se ha visto en `@ImposedStrain` y `@ImposedStress`.

@OutputFile especifica el nombre del archivo de salida. De forma predeterminada, el nombre del archivo de salida es igual al nombre de entrada con la extensión *'.res'*.

```
@OutputFile 'results.txt';
```

@OutputFilePrecision especifica el número de dígitos utilizados para imprimir los resultados en el archivo de salida.

```
@OutputFilePrecision 15;
```

@PredictionPolicy le permite al usuario definir cómo se obtendrá la estimación inicial de la solución, pudiendo ser:

- Noprediction
- LinearPrediction
- ElasticPrediction
- ElasticPredictionFromMaterialProperties
- SecantPrediction
- TangentPrediction

```
@PredictionPolicy 'ElasticPrediction';
```

@Real permite al usuario definir una constante.

```
@Real 'SXX0' 20.6;
```

@RotationMatrix permite al usuario especificar una matriz de rotación, de manera que las direcciones principales del material sean diferentes de las utilizadas para la resolución y las condiciones de contorno.

```
@RotationMatrix    {     {0,1,0},
                {1,0,0},
                {0,0,1} };
```

@StiffnessMatrixType permite al usuario especificar el tipo de matriz de rigidez que debe ser dada por el comportamiento mecánico y que será utilizado por el algoritmo de resolución. Son válidos los siguientes valores:

- Elastic
- SecantOperator
- TangentOperator
- ConsistentTangentOperator

```
@StiffnessMatrixType 'Elastic';
```

`@Strain` permite al usuario especificar el valor inicial de las tensiones.

Se debe especificar una matriz, donde el tamaño de este array debe ser igual al número de componentes de los tensores simétricos para la hipótesis de modelado considerada.

Los valores deben seguir las convenciones TFEL. En 3D, las tensiones están almacenadas en el siguiente orden:

$$(varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{zz}, \sqrt{2}\varepsilon_{xy}, \sqrt{2}\varepsilon_{xz}, \sqrt{2}\varepsilon_{yz})$$

```
@Strain   {0.000239466253465591,
           -7.18398760396772e-05,
           -7.18398760396772e-05,
           0., 0., 0.};
```

`@Stress` permite al usuario especificar el valor inicial del estrés.

Se debe especificar una matriz, donde el tamaño de este array debe ser igual al número de componentes de los tensores simétricos para la hipótesis de modelado considerada.

```
@Stress   {'YoungModulus*EXX0',
           '-PoissonRatio*YoungModulus*EXX0',
           '-PoissonRatio*YoungModulus*EXX0',
           0., 0., 0. };
```

`@StressEpsilon`. El algoritmo global utiliza dos criterios para comprobar si se ha encontrado un equilibrio satisfactorio: uno sobre las tensiones y el otro sobre el estrés.

Este criterio sobre el estrés comprueba que el residuo del Algoritmo de Newton es bajo. Por defecto este valor es 1.e-3.

La instrucción `@StressEpsilon` permite al usuario especificar el criterio de valor utilizado para el criterio de estrés.

```
@StressEpsilon 1.e2;
```

`@Test` permite al usuario añadir una prueba a los resultados. Se admiten dos tipos de pruebas:

- `function`: se permiten dos sintaxis. En la primera, se esperan tres argumentos: el nombre de la variable probada, una función del tiempo y un valor de criterio utilizado para la comparación. En la segunda sintaxis, se esperan dos

argumentos: un mapa que asocia el nombre de una variable probada a una función de tiempo y un valor de criterio utilizado para la comparación. Las funciones pueden depender explícitamente del tiempo a través de la variable *t.*

```
@Test<function> 'EXY' '0.' 1.e-12;

@Test<function>{ 'EXX': 'SXX/YoungModulus',
                 'EYY': '-PoissonRatio*SXX/YoungModulus',
                 'EZZ': '-PoissonRatio*SXX/YoungModulus',
                 'EXY': '0.','EXZ:'0.','EYZ':'0.'}1.e-12;
```

- `file`: los valores esperados se leen en columnas de un archivo de texto. Se dará el nombre del archivo de texto y se permitirán dos sintaxis. En la primera, se esperan tres argumentos: el nombre de la variable probada, el número de columna y un criterio utilizado para la comparación. En la segunda sintaxis, se esperan dos argumentos: un mapa que asocia el nombre de la variable probada a un número de columna y un criterio utilizado para la comparación. En cada caso, los valores dados por la línea 'n+1' corresponden a los valores esperados después del periodo 'n'.

```
@Test<file> 'reference.txt' 'EXY' 1 1.e-12;
```

`@Times` permite al usuario especificar una lista de tiempos utilizados para los cálculos.

Esto se especificará con una matriz que describe los intervalos de tiempo. De forma predeterminada, se utiliza un paso de tiempo para pasar de un momento dado al siguiente. El comando '`in`' permite al usuario dividir un intervalo en un número dado de intervalos más pequeños.

```
@Times {0., 3600.}; /* 1 paso de tiempo de 3600. Segundos */

@Times {0., 3600. in 10};   /*10 pasos de tiempo de 360 segundos */
```

5 Salome-Meca

5.1 Salome-Meca, la unión de Salome y Code-Aster

Para empezar, se debería definir qué es la plataforma **SALOME**, la cual es una plataforma genérica de Pre-procesamiento y Post-procesamiento para simulaciones numéricas desarrollada por EDF (Électricité de France). Es un programa de código abierto (licencia LGPL) el cual se basa en una arquitectura abierta y flexible hecha de herramientas propias e integrando otras herramientas del mundo del software de código abierto, así como otras herramientas comerciales con licencias de código cerrado.

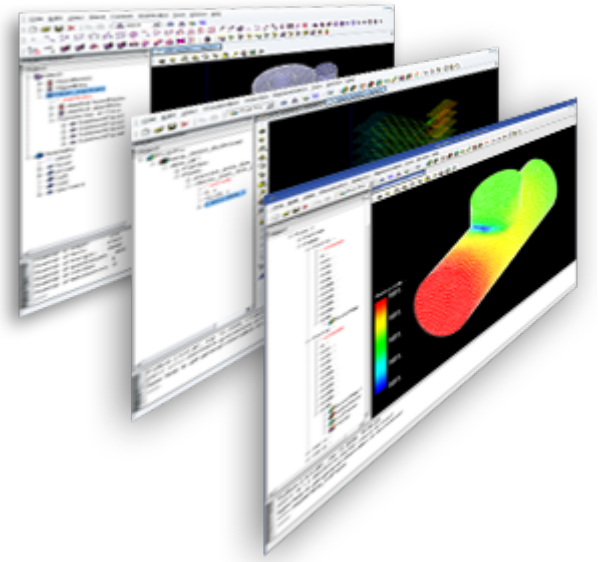


Ilustración 7: Imagen de salome-platform.org

Por otra parte, **CODE-ASTER** es una aplicación de elementos finitos, desarrollado también por EDF. Creado principalmente para el área de cálculos mecánicos, cubre un gran número de aplicaciones como pueden ser análisis térmicos y mecánicos tanto lineales como no lineales, fatiga, análisis de fracturas, etc.

Code-Aster ofrece una versión modificada de Salome a la cual le incluye distintas herramientas para poder trabajar con este solver FEM, llamada **SALOME-MECA**. Además del propio solver, Salome-Meca incluye también herramientas para trabajar con Code-Aster como ***Eficas*** con el que podemos escribir los casos FEM mediante una interfaz gráfica la cual da acceso a todos los comandos posibles y evalúa los pasos necesarios para cumplir con cada comando. Con ***ASTK*** se puede manejar y configurar las simulaciones a realizar.

Así, las principales características de Salome-Meca son:

Módulo de geometría (*Geometry*): donde se puede crear la geometría del problema a analizar, o incluso se puede importar de otros programas.

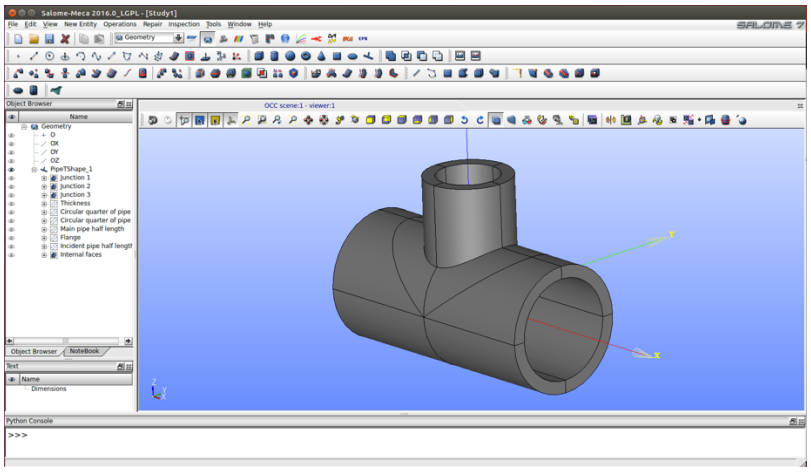


Ilustración 8: Módulo de geometría

Módulo de mallado (*Mesh*): es usado para generar mallas 1D, 2D o 3D para los análisis numéricos. Para ello cuenta con varios algoritmos de mallado propios.

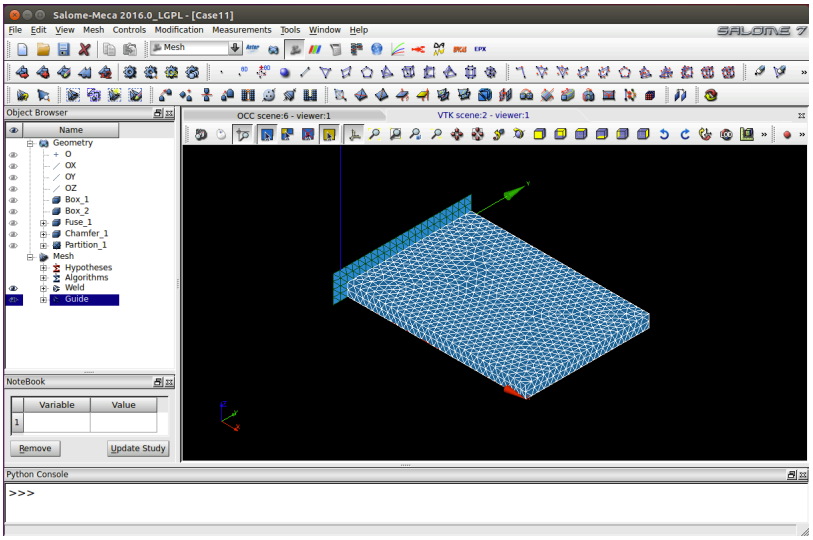


Ilustración 9: Módulo de mallado

Módulo de Code-Aster (*Aster*): como se ha descrito anteriormente, Aster és un módulo destinado al área de cálculos mecánicos que incluye las herramientas Eficas y Astk.

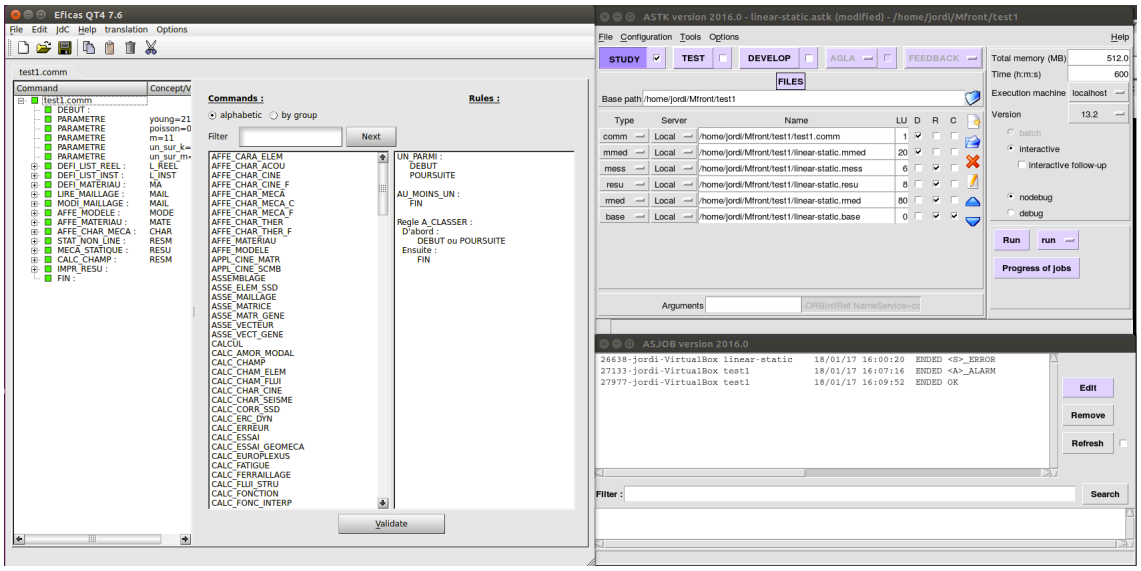


Ilustración 10: Eficas y ASTK del módulo Aster

Módulo de post-procesamiento (*ParaViS*): éste módulo se usa para analizar los resultados de la simulación incluyendo el software para post-procesamiento ParaView, el cual tiene un sin fin de herramientas utilizando técnicas cualitativas y cuantitativas de utilidad para poder usar en el post-procesamiento de nuestros análisis numéricos.

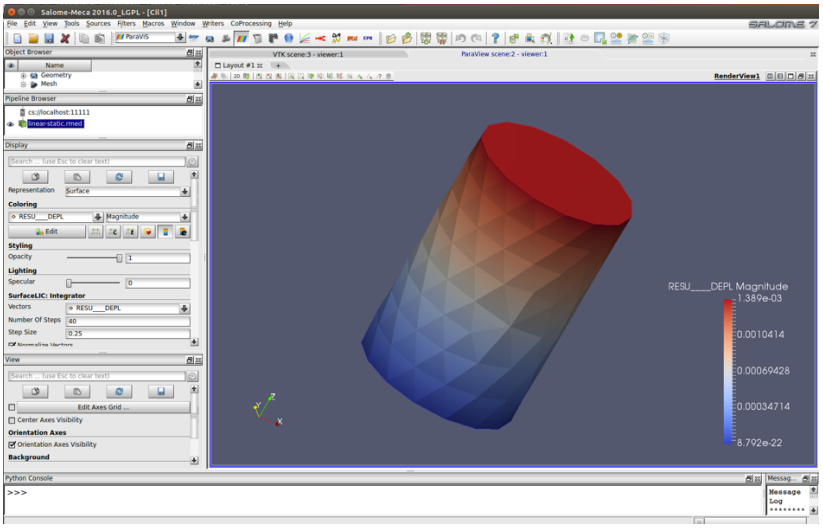


Ilustración 11: Módulo de post-procesamiento

5.2 Inclusión de librerías MFront a Salome-Meca

Al realizar un estudio con Salome-Meca, puede resultar interesante, o de utilidad, añadir algún tipo de comportamiento del material, algo que como se ha visto en los puntos anteriores se puede definir con Mfront.

Entonces, a lo largo de este punto se describirá, mediante un ejemplo, como se puede añadir dicho comportamiento empezando con la generación de éste y sus librerías, seguido de la creación del estudio en Salome-Meca y acabando con la inclusión de este comportamiento en el módulo Aster.

5.2.1 Generación de la librería con Mfront

Para ver un ejemplo de cómo introducir una librería de comportamiento material en un estudio en Salome-Meca, se procederá con la ley de comportamiento viscoplástico de Lemaitre, cuyo modelo escrito de forma implícita en Mfront será el que se muestra en la Ilustración 12 que puede ser escrito con un editor de texto genérico, y luego se guardará el archivo con la extensión '*.mfront'*:

```
@Parser Implicit;
@Behaviour Lemaitre;
@Algorithm NewtonRaphson_NumericalJacobian;
@Theta 0.5;

@RequireStiffnessTensor;
@MaterialProperty real m;
@MaterialProperty real UNsurK;
@MaterialProperty real UNsurM;

@StateVariable real p;

@ComputeStress { sig = D*eel;}

@Integrator{
        const real seq = sigmaeq(sig);
        const real p_ = max((p+theta*dp), 1.e-8);
        if(seq>0.){
                real slem = seq*UNsurK/pow(p_,UNsurM);
                real vp = pow(slem,m);
                Stensor n = 1.5*deviator(sig)/seq;
                feel += vp*dt*n;
                fp -= vp*dt;
        }

        feel -= deto;
}

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

Ilustración 12: Comportamiento viscoplastico de Lemaitre "*Lemaitre.mfront*"

La compilación del archivo se ejecutará a través del Terminal, donde con el comando “--interface" se le indica el lenguaje destino con el que se quiere usar la librería.

```
$ mfront --obuild --interface=aster Lemaitre.mfront
```

Una vez compilado el archivo, si no hay ningún error en él, Mfront genera dos nuevos directorios en el directorio actual para almacenar los archivos generados como se puede ver en la Ilustración 13

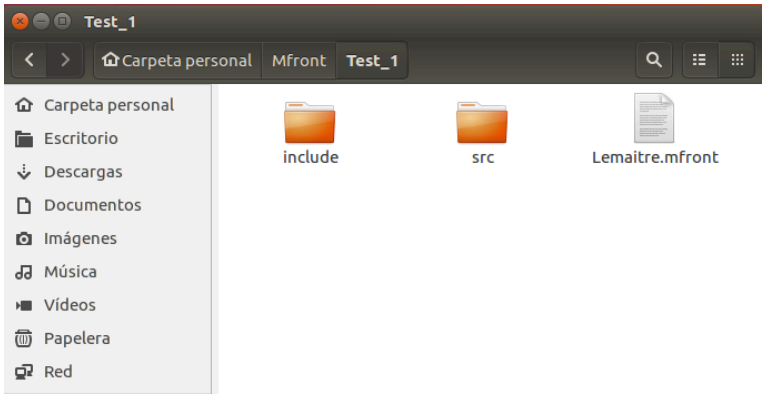


Ilustración 13: Generación de carpetas al compilar

La librería generada necesaria para su uso en Salome-Meca, se encuentra dentro del directorio *“src”* y se llama “***libAsterBehaviour.so***”.

5.2.2 Generación de un modelo de estudio geométrico con Salome Meca

Antes de incluir la librería generada en el punto anterior, se debe generar el modelo que se quiere estudiar en Salome-Meca.

Para ello, se debe ejecutar desde el terminal Salome-Meca desde el directorio donde está instalado (generalmente en */root/salome_meca/appli_V2016/*):

```
:/root/salome_meca/appli_V2016 $ ./salome
```

Una vez se haya cargado Salome-Meca, su pantalla inicial será como la que se muestra en la Ilustración 14, donde se puede ver que en la parte superior se encuentran las herramientas básicas de cualquier programa (*‘nuevo documento’, ‘abrir documento’, ‘guardar’,* etc.), y a la izquierda de estas herramientas, se encuentran los distintos módulos disponibles de Salome-Meca, seleccionables desde el menú desplegable, o directamente desde los botones a la derecha de este.

Estas herramientas son:

- *Aster*
- *Geometry*
- *Mesh*
- *ParaVis*
- *MED*
- *YACS*
- *JobManager*
- *Parametric*
- *Homard*
- *ADAO*
- *Eficas*
- *Europlexus*

Y finalmente, al pie del programa, se puede encontrar una consola Python para poder trabajar en lenguaje Python.

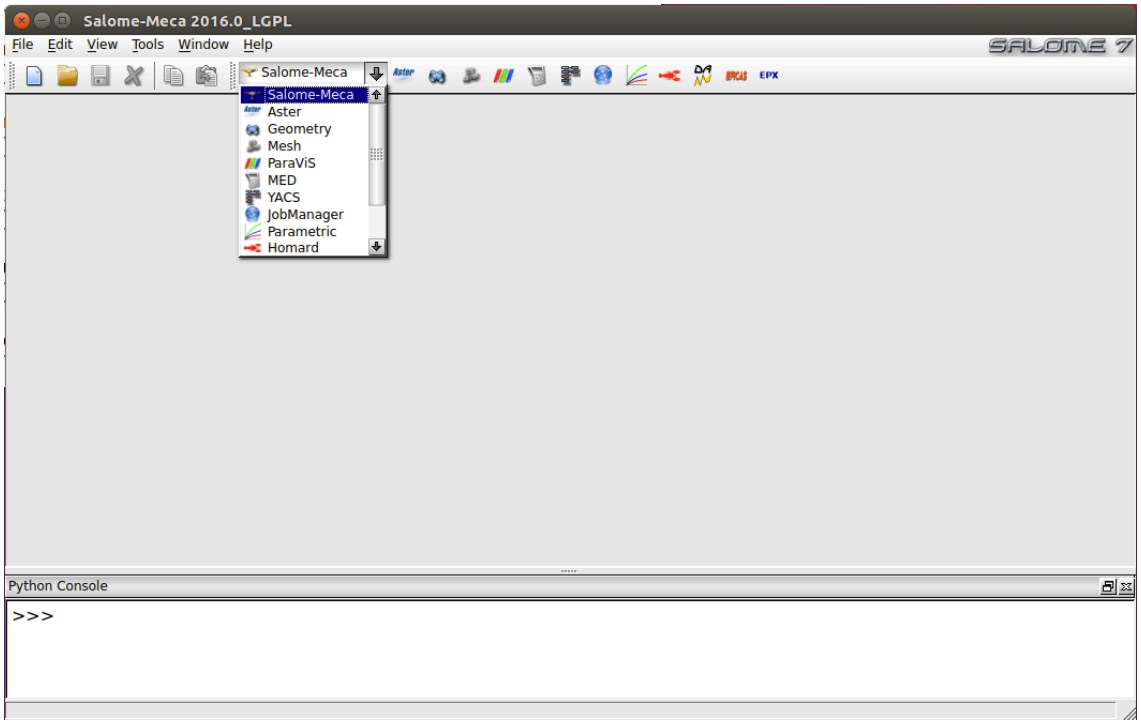


Ilustración 14: Pantalla inicial de Salome-Meca

Para empezar a crear un modelo de estudio útil para el ejemplo actual, se deberá seleccionar el módulo **`Geometry`** donde aparecerá un dialogo donde preguntará si se desea crear un nuevo proyecto, o abrir uno ya existente.

Una vez activado el módulo Geometry, en la barra de menús principal, se clicará sobre el menú `New Entity` → `Primitives` → `Box`, y emergerá una ventana de dialogo en la que se deberá seleccionar el segundo algoritmo del apartado `Box` y se dejará el resto tal y como aparece en la Ilustración 15 y para finalizar se clicará el botón de `Apply and Close`.

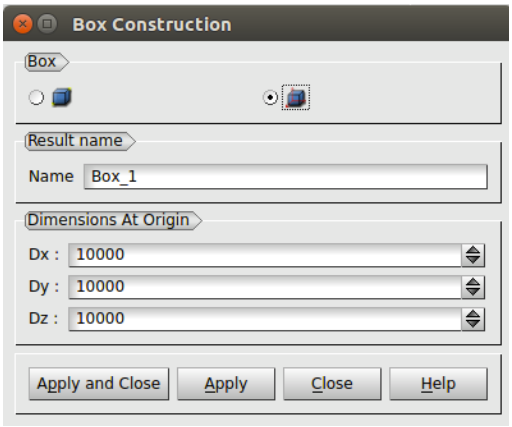


Ilustración 15: Módulo Geometry, construcción de un cubo

Esto generará un cubo de las dimensiones especificadas, teniendo el aspecto de la Ilustración 16.

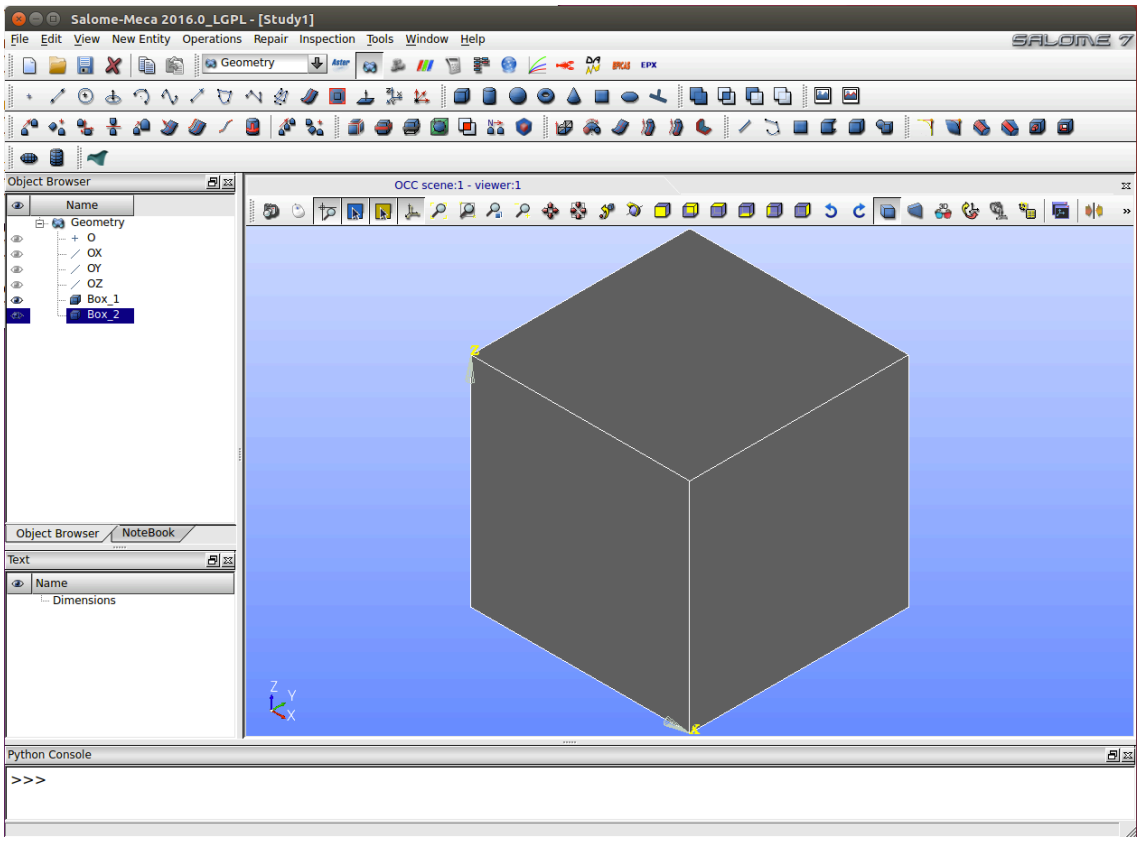


Ilustración 16: Generación de un cubo en el módulo Geometry

El siguiente paso consiste en crear grupos que serán útiles para el análisis de elementos finitos. Para ello se debe seleccionar la opción `New Entity` → `Group` → `Create Group`.

Se deberá seleccionar la tercera opción en `Shape Type` para poder seleccionar una cara entera del cubo. En el campo *Name* se le pondrá el nombre que se le quiera dar al grupo, en este caso "Fix". En el campo `Main Shape`, si la geometría creada ya estaba seleccionada, aparecerá en el campo automáticamente, sino,

tan solo es necesario clicar sobre el botón de la flecha y seleccionar la geometría sobre la que se quieren crear los grupos. A continuación, se rotará el cubo hasta que sea visible la cara inferior de este para poder seleccionarla, y se clicará sobre el botón `Add` para que se pueda añadir la selección como aparece en la Ilustración 17, se clicará sobre el botón inferior `Apply`, y se repetirá este proceso cambiando el campo `Name` a "Press", y seleccionando la cara superior del cubo. Finalmente, ya se puede clicar sobre `Apply and Close`.

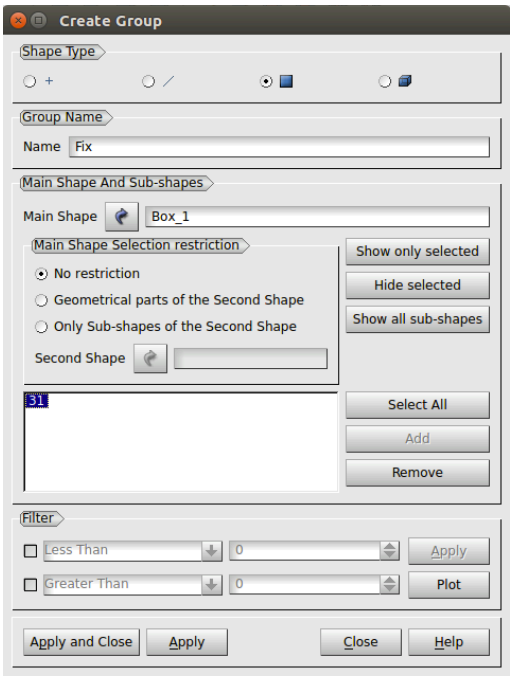


Ilustración 17: Módulo Geometry, creación grupo

Esto habrá creado los dos grupos sobre la geometría generada y el navegador de objetos deberá tener el siguiente aspecto de la Ilustración 18.

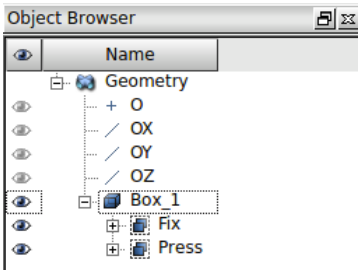


Ilustración 18: Módulo Geometry, Object Browser

Y con ello quedará concluida la creación del objeto de estudio sobre el módulo de geometría.

5.2.3 Mallado del modelo

El siguiente paso ahora, es crear un mallado del objeto creado en el punto anterior para que se pueda hacer el estudio correspondiente, para ello se debe seleccionar el módulo **Mesh** de Salome-Meca.

Una vez cargado el módulo, se creará el mallado desde el menú principal `Mesh` → `Create Mesh` lo cual mostrará la ventana de la Ilustración 19 donde se seleccionará la geometría creada en el punto anterior "`Box_1`", y se seleccionará en el campo `Algorithm` el algoritmo `Netgen 1D-2D-3D`, y en el campo `Hypothesis` se deberá clicar sobre el botón con forma de tuerca a la derecha de este campo, y se seleccionará la opción `NETGEN 3D Parameters` con lo que emergerá otra ventana con una serie de parámetros que se dejarán en su valor predeterminado. Finalmente, se podrá clicar sobre el botón de `Apply and Close`.

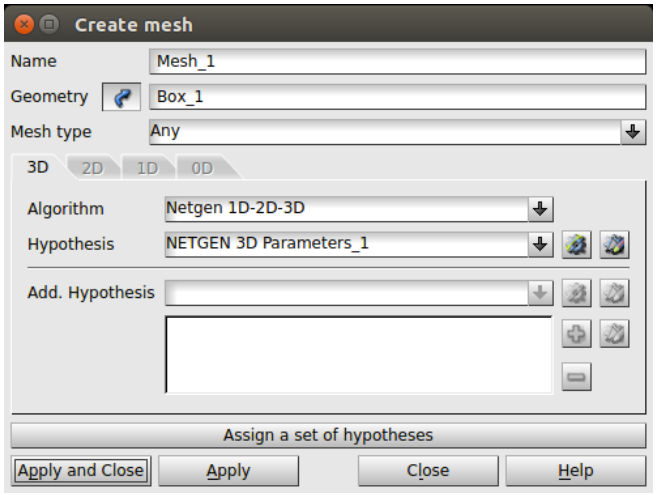


Ilustración 19: Módulo Mesh, crear mallado

Esto añadirá los campos "`Hypotheses`", "`Algorithms`" y "`Mesh_1`" al navegador de objetos.

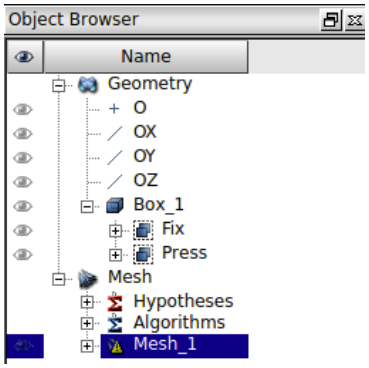
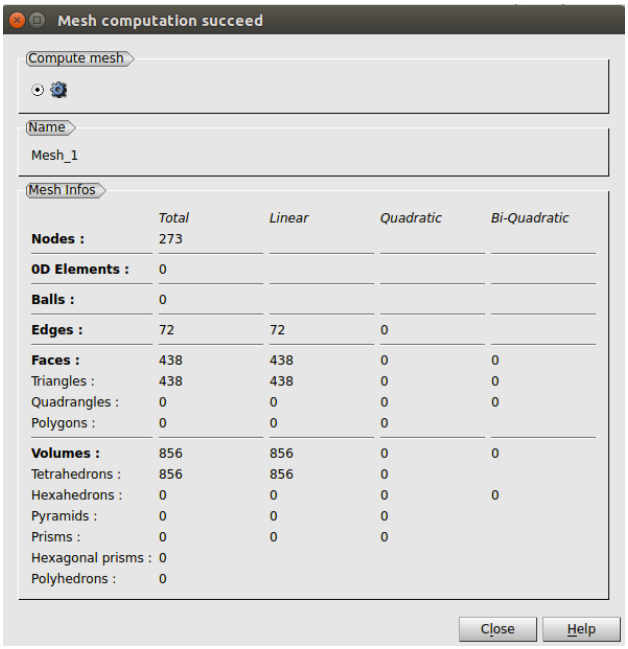


Ilustración 20: Módulo Mesh, Object Browser

Ahora, haciendo clic derecho sobre el campo "`Mesh_1`" que aparece seleccionado en la Ilustración 20, se deberá clicar sobre la opción `Compute` con el dibujo de una tuerca, que también se puede clicar sobre el botón con este mismo dibujo que aparece debajo del menú principal desplegable de los módulos de seleccionables.

Con esto, aparecerá una ventana como la de la Ilustración 21 con los resultados de la computación del mallado.



	Total	Linear	Quadratic	Bi-Quadratic
Nodes :	273			
0D Elements :	0			
Balls :	0			
Edges :	72	72	0	
Faces :	438	438	0	0
Triangles :	438	438	0	0
Quadrangles :	0	0	0	0
Polygons :	0	0	0	
Volumes :	856	856	0	0
Tetrahedrons :	856	856	0	
Hexahedrons :	0	0	0	0
Pyramids :	0	0	0	
Prisms :	0	0	0	
Hexagonal prisms :	0			
Polyhedrons :	0			

Ilustración 21: Módulo Mesh, computación del mallado

Quedando el objeto creado en el módulo de geometría mallado como aparece en la Ilustración 22.

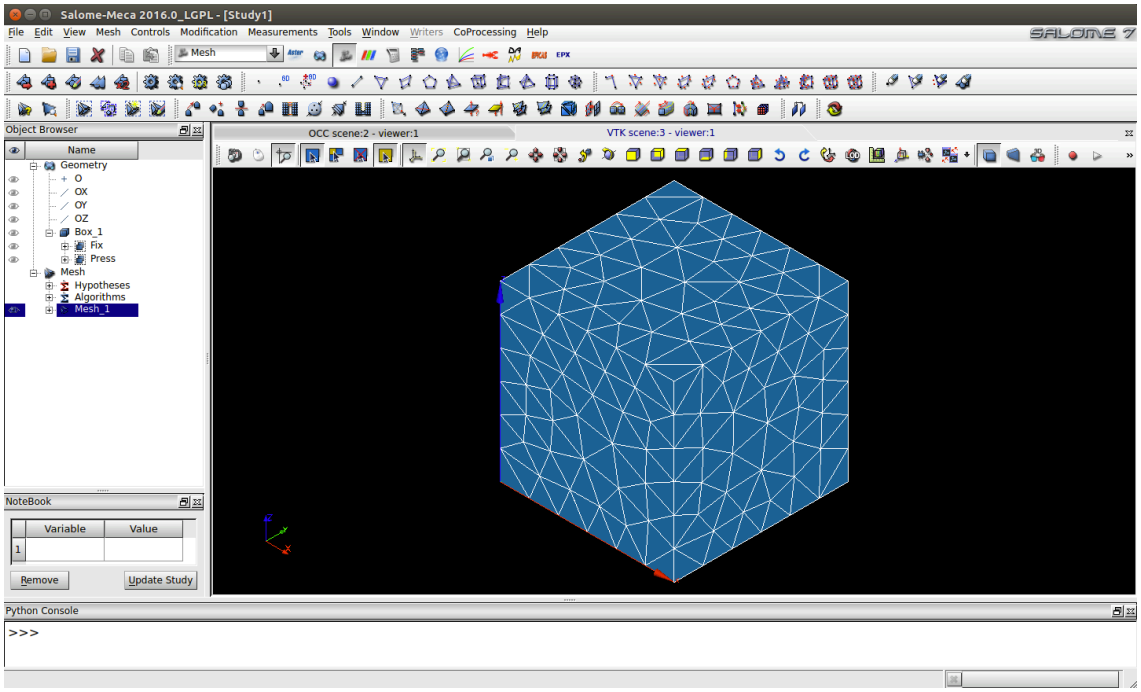


Ilustración 22: Módulo Mesh, resultado

5.2.4 Cálculo mecánico con el módulo Aster

Habiendo creado el modelo geométrico y habiéndole dado grupos geométricos, y luego, habiendo creado un mallado 3D del modelo geométrico que será usado para el análisis de elementos finitos, ahora le toca el turno del módulo Aster de Salome-Meca.

Para ello, se debe seleccionar dicho módulo clicando sobre **`Aster`** en el menú desplegable.

Asegurándose de que "`Mesh_1`" sigue seleccionado, se deberá acceder desde la barra de menús principal a la opción `Aster` → `Wizards` → `Linear elastic`, esto abrirá el cuadro de dialogo de la Ilustración 23 done pide la definición del modelo.

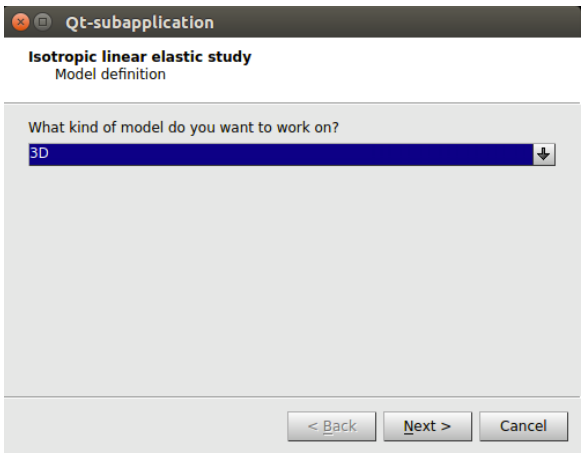


Ilustración 23: Módulo Aster, definición del modelo

En el siguiente paso (Ilustración 24), pide seleccionar el mallado sobre el que se desea hacer el estudio.

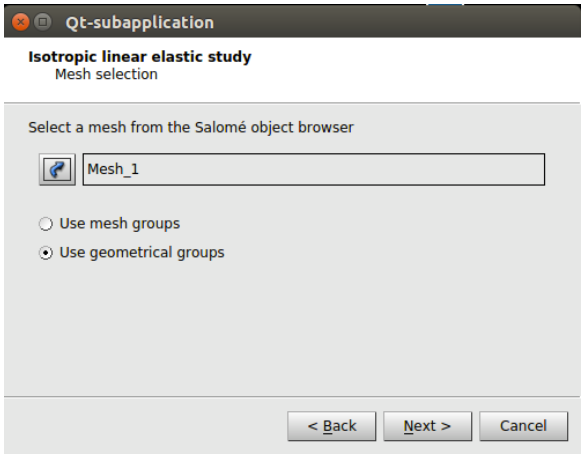


Ilustración 24: Módulo Aster, selección mallado

En el siguiente cuadro de dialogo (Ilustración 25), se deben indicar el valor de las propiedades del material.

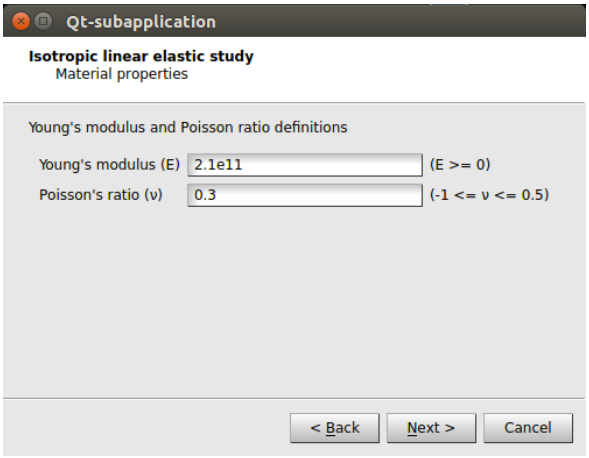


Ilustración 25: Módulo Aster, propiedades del material

En los dos siguientes pasos (Ilustración 26), se pueden añadir condiciones de contorno al estudio.

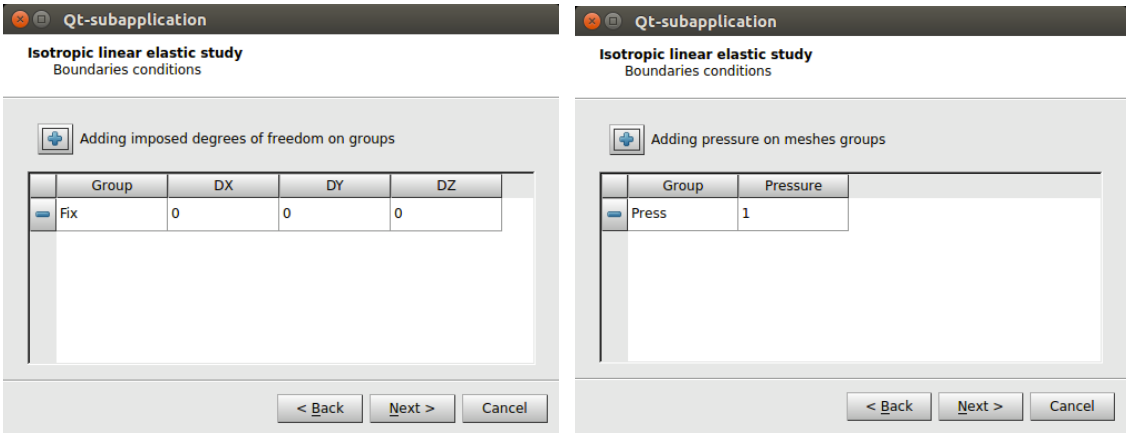


Ilustración 26:Módulo Aster, condiciones de contorno

Y finalmente, en el último paso, se le debe indicar el nombre del archivo de comandos ".comm"

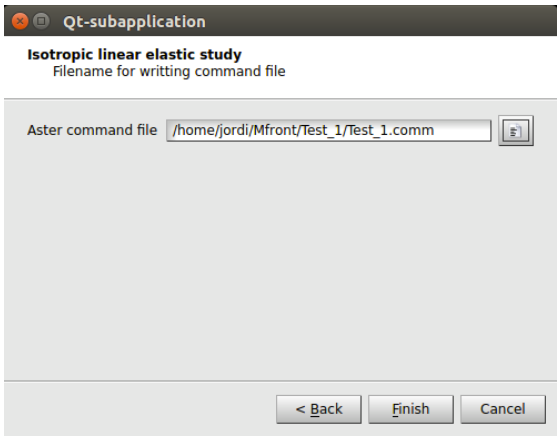


Ilustración 27: Módulo Aster, nombre archivo .comm

Habiendo creado el estudio, aparecerán los nuevos campos (Ilustración 28) en el navegador de objetos.

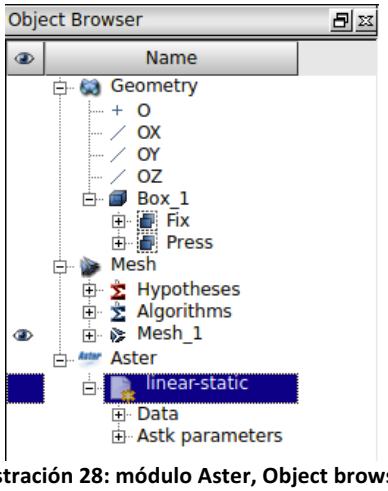


Ilustración 28: módulo Aster, Object browser

Y finalmente, se puede ejecutar el estudio haciendo clic derecho sobre el estudio seleccionado en la ilustración anterior ("`linear-static`"), y haciendo clic sobre la opción "`Run`". Esto entregará (después de pasar unos instantes de computación) un mensaje de información, el cual indicará si todo ha salido bien, o de lo contrario mostrará un mensaje de error. Además, este mensaje indica que, si todo ha salido bien, se podrán ver los resultados de la simulación en el módulo ParaViS.

5.2.5 Visualización de resultados en el módulo ParaViS

Si la ejecución del estudio anterior ha concluido sin errores, se pueden observar sus resultados en el módulo **`ParaViS`**, y para ello se deberá activar dicho módulo desde el menú desplegable.

Si al activar el módulo ParaViS, en el lado izquierdo del programa sigue viéndose tan solo el navegador de objetos, será necesario añadir dos vistas adicionales desde el menú principal `View` → `Windows` → "`Pipeline Browser`" y "`Display`".

Sobre la nueva ventana que se añadirá al lado izquierdo del programa llamada "`Pipeline Browser`", se podrá hacer clic derecho y luego clic sobre la opción `Open` para añadir el archivo de resultados "linear-static.rmed" generado por el módulo Aster como aparece en la Ilustración 29.

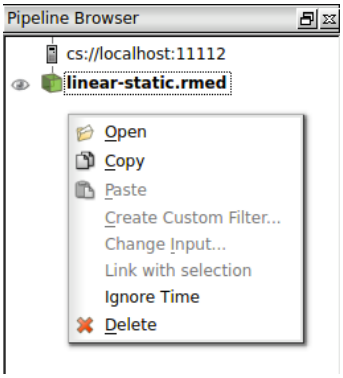


Ilustración 29: Módulo ParaViS, Pipeline browser

Una vez añadido el archivo de resultados, haciendo clic sobre el icono situado a su izquierda con forma de ojo, se podrán ver los resultados seleccionándolos desde el campo "`Coloring`" de la ventana "`Display`" como se muestra en la Ilustración 30.

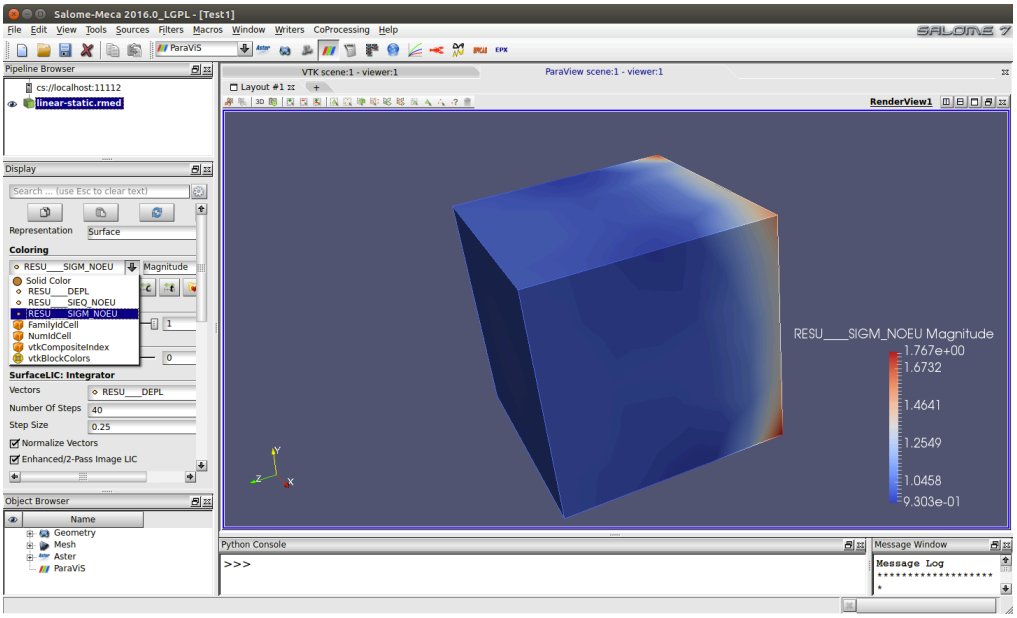


Ilustración 30: Módulo ParaViS, visualización de resultados

5.2.6 Modificación del archivo .comm para incluir la librería

Para poder incluir la librería generada con Mfront, se debe modificar el archivo de comandos ".comm" creado en el apartado '
Cálculo mecánico con el módulo Aster'.

Para ello, hay dos opciones disponibles. La primera es modificar directamente el archivo con un editor de texto. Y la segunda y más recomendable, consiste en modificarlo mediante el programa **EFICAS Aster** el cual brinda la posibilidad de editar el archivo de comandos sin dar opción a errores de edición.

El primer paso para la inclusión de librerías Mfront, es asegurarse que la versión con la que se está trabajando de Aster sea compatible con Mfront, es decir, si la versión instalada de Aster en Salome-Meca es superior a la 13.2 no habrá ningún problema, pero en cambio, en la versión de Salome-Meca instalada para este trabajo, la versión de Aster 13.2 estaba en fase de test, y por defecto trabajaba con una versión anterior no compatible con Mfront.

Para poder trabajar con la versión 13.2, con el módulo **Aster** activado, se deberá hacer clic derecho sobre el estudio *linear-static* en el navegador de objetos y hacer clic sobre la opción `Edit`, con lo que aparecerá la ventana de la Ilustración 31 donde se deberá seleccionar la versión `13.2` en el campo `Aster Version`.

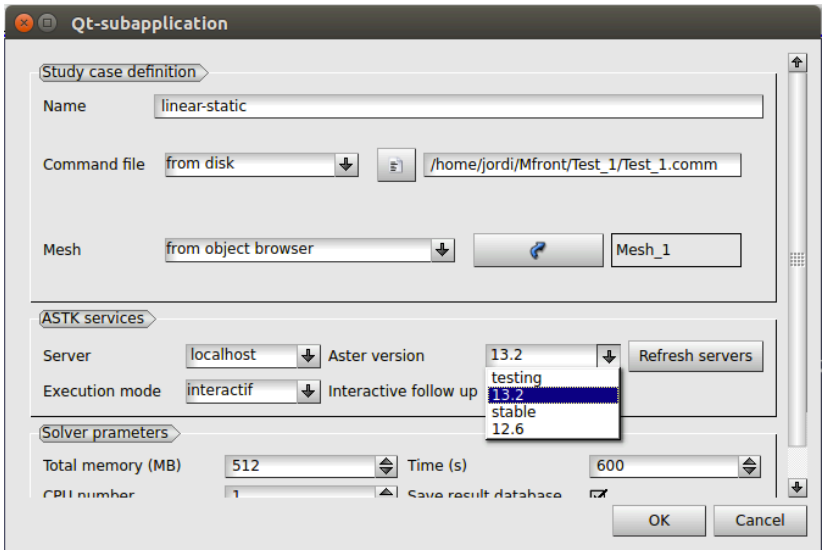


Ilustración 31: Módulo Aster, asignación de la versión Aster

Ahora, clicando sobre el estudio `linear-static` del navegador, aparecerán dos campos relativos a este. Donde desplegando el campo *Data* aparecerá el archivo de comandos referente al estudio configurado en el punto ‘
Cálculo mecánico con el módulo Aster’. Haciendo clic derecho sobre este archivo se deberá hacer clic sobre la opción `Run Eficas` que, mostrará el siguiente mensaje (Ilustración 32), donde se deberá seleccionar la versión `13.2` de Aster.

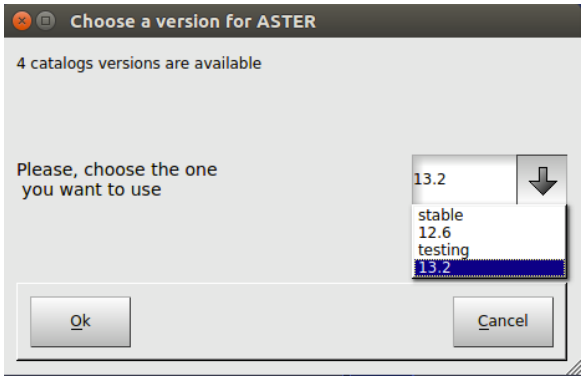


Ilustración 32: Módulo Eficas, selección de versión

Una vez ya se ha seleccionado la opción, se ejecutará el programa **`Eficas`** y tendrá el aspecto de lallustración 33, donde se puede ver en el apartado izquierdo, los comandos incluidos en el archivo actual, cada uno de ellos desplegable para mostrar sus parámetros adicionales, en el apartado central se muestran las instrucciones o parámetros disponibles, y finalmente en el derecho las reglas de uso de la instrucción o parámetro seleccionado.

En la parte superior del bloque derecho aparecen tres pestañas. La primera (`Add Keyword`) es la que indica las instrucciones o parámetros disponibles según el comando seleccionado en la columna izquierda. La función de la segunda pestaña (`Concept’s Name`) es la de asignar un nombre al comando seleccionado. Y finalmente, la función de la última pestaña (`New Command`) es para añadir nuevos comandos.

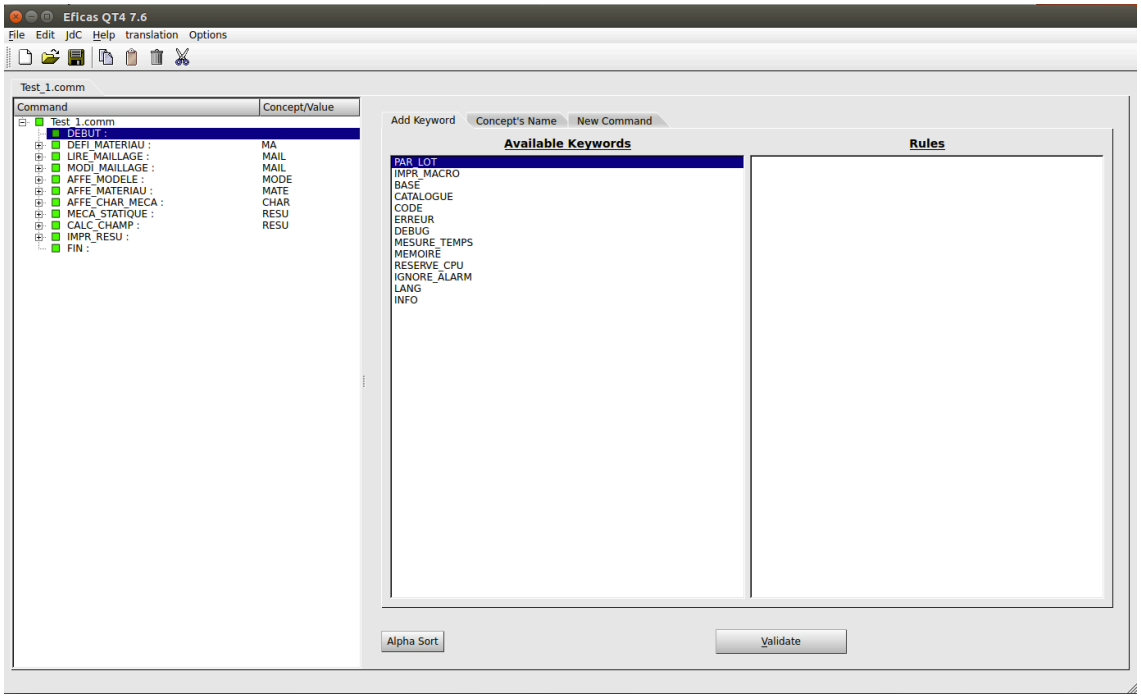


Ilustración 33: Módulo Eficas

Además, haciendo clic derecho sobre la columna izquierda (donde aparecen los comandos) se pueden añadir parámetros o comentarios. Así que se puede empezar añadiendo los parámetros necesarios en el comportamiento preparado con Mfront que se quiera añadir al estudio como se puede ver en la Ilustración 34.

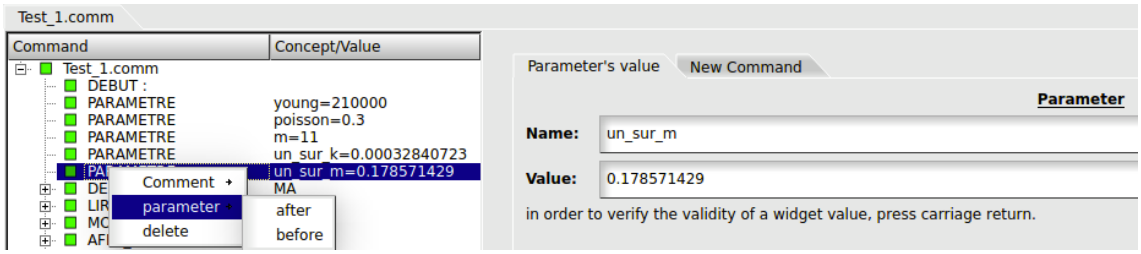


Ilustración 34: Módulo Eficas, inclusión de parámetros

El siguiente comando `DEFI_MATERIAU` que consiste en la definición de los parámetros describiendo el comportamiento de un material, ahora tiene definidos el parámetro `E` (coeficiente de Young) y `NU` (Poisson) que ya se habían definido al crear el estudio lineal elástico con Aster.

En este comando se deberán añadir los parámetros asociados al comportamiento añadido con Mfront, para ello se deberá añadir la instrucción llamada `MFRONT` de la columna central cuando está seleccionado el comando `DEFI_MATERIAU`. Añadida la instrucción, aparecerá en la columna central un solo parámetro disponible (`LISTE_COEF`) el cual se deberá añadir también.

A continuación, se pueden añadir los valores de forma manual, añadiendo los valores a la lista (si no se hubieran definido previamente los parámetros Young, poisson, m, etc…), o se podrán añadir los valores directamente de los parámetros haciendo clic sobre el botón `Parameters`. Esto mostrará una lista de los parámetros definidos anteriormente y se podrán seleccionar los que interese y se deberá hacer clic sobre `Validate` una vez ya estén seleccionados.

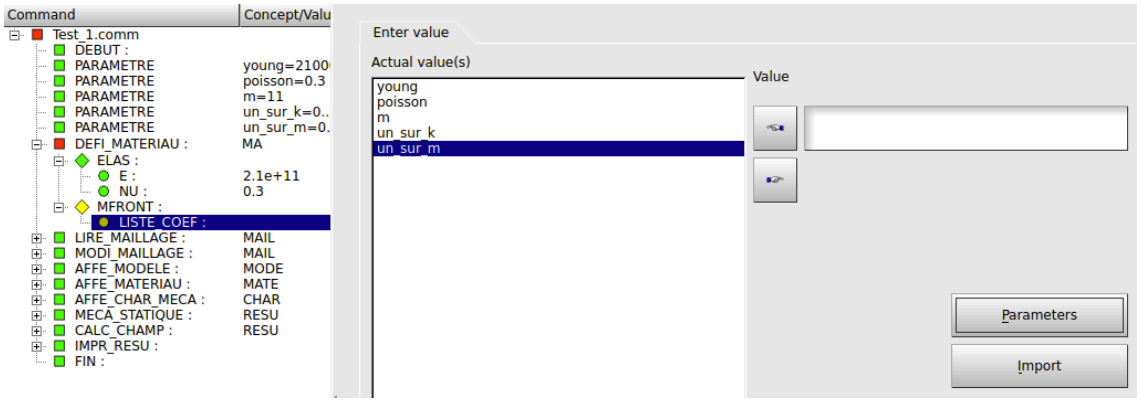


Ilustración 35: Módulo Eficas, DEFI_MATERIAU

Mientras se está editando un comando, las figuras (cuadrados, rombos y círculos) situados a la izquierda de cada parámetro o instrucción aparecen en amarillo y en rojo para indicar que aún no está completa o es errónea la edición del comando como se puede observar en la Ilustración 35. Cuando la edición esté completa y sea correcta, estos elementos aparecerán de color verde. Hay que recordar, que al final de la edición de un nuevo comando, Eficas requiere la asignación de un nombre del comando, en el caso de `DEFI_MATERIAU` viene predefinido como "`MA`".

Ahora, el siguiente punto consiste en añadir al fichero de comandos la librería creada con Mfront.

Para ello, se añadirá un comando de computación no lineal que pueden ser `STAT_NON_LINE`, `DYNA_NON_LINE` o `SIMU_POINT_MAT`. Seleccionando uno de estos comandos, se le deberá añadir la instrucción `COMPORTEMENT` en la que se deberá indicar que se trata de un comportamiento definido por `MFRONT` en el campo `RELATION`. Esto añadirá dos campos adicionales.

En el primero, `LIBRARIE` se le deberá indicar la ruta completa de la librería que se desea añadir al estudio como se muestra en la Ilustración 36.

Y en el segundo campo, `NOM_ROUTINE`, permite especificar el modelo de comportamiento elegido, lo cual es útil si se han compilado varias leyes juntas. Este nombre se construye con la concatenación de "*aster*" con el nombre definido en la instrucción "`@Behaviour`" del archivo Mfront.

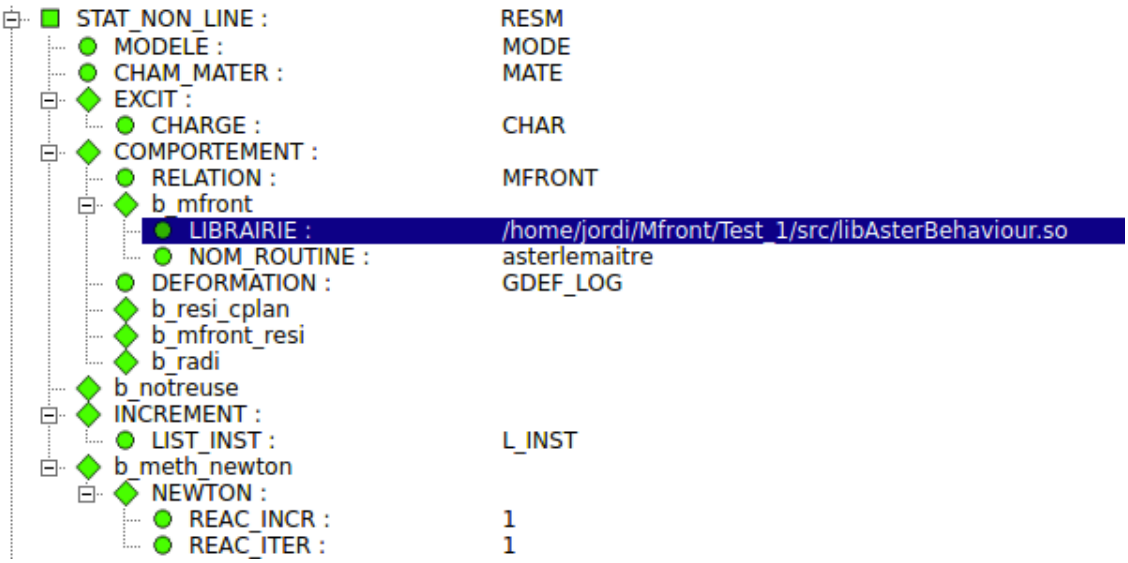


Ilustración 36: Módulo Eficas, STAT_NON_LINE

El último paso será añadir los cálculos que se deseen realizar en el comando `CALC_CHAMP` indicándole en el campo `RESULTAT` que se harán sobre el comportamiento añadido anterior ("`RESM`") e indicándole dichos análisis en el campo `b_non_lin`. Y finalmente se deberán añadir estos análisis a la impresión de resultados en el comando `IMPR_RESU` incluyéndolos en el campo `b_extrac` como se muestra en la Ilustración 37

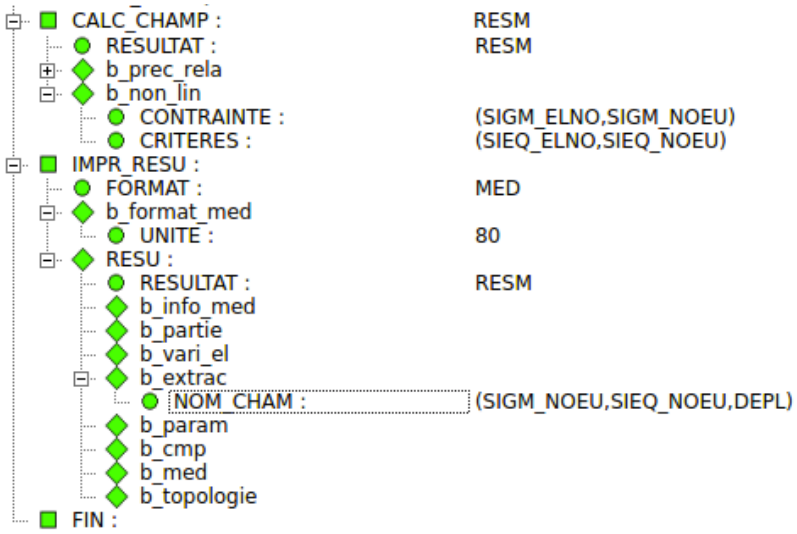


Ilustración 37: Módulo Eficas, CALC_CHAMP y IMPR_RESU

Con esto (guardando el archivo editado ".comm"), se puede dar por concluida la edición básica del archivo de comandos para la inclusión de la librería del comportamiento editado con Mfront, quedando para el usuario la edición del resto de comandos o parámetros del archivo según los intereses de este. (El archivo .comm resultante de este ejemplo está incluido en el "Anexo 5: Archivo de comandos Test_1.")

Una vez editado el archivo de comandos, tan solo queda volver al módulo Aster y ejecutar el análisis.

Si el resultado de la ejecución es satisfactorio (Ilustración 38) tan solo queda ver los resultados en el módulo ParaVis (Ilustración 39)

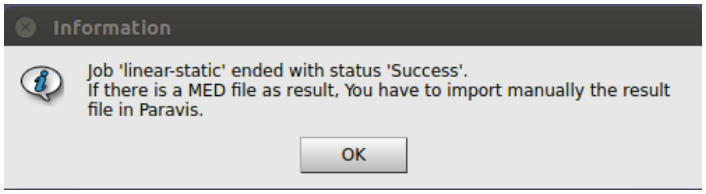


Ilustración 38: Módulo Aster, resultado de la ejecución 'Success'

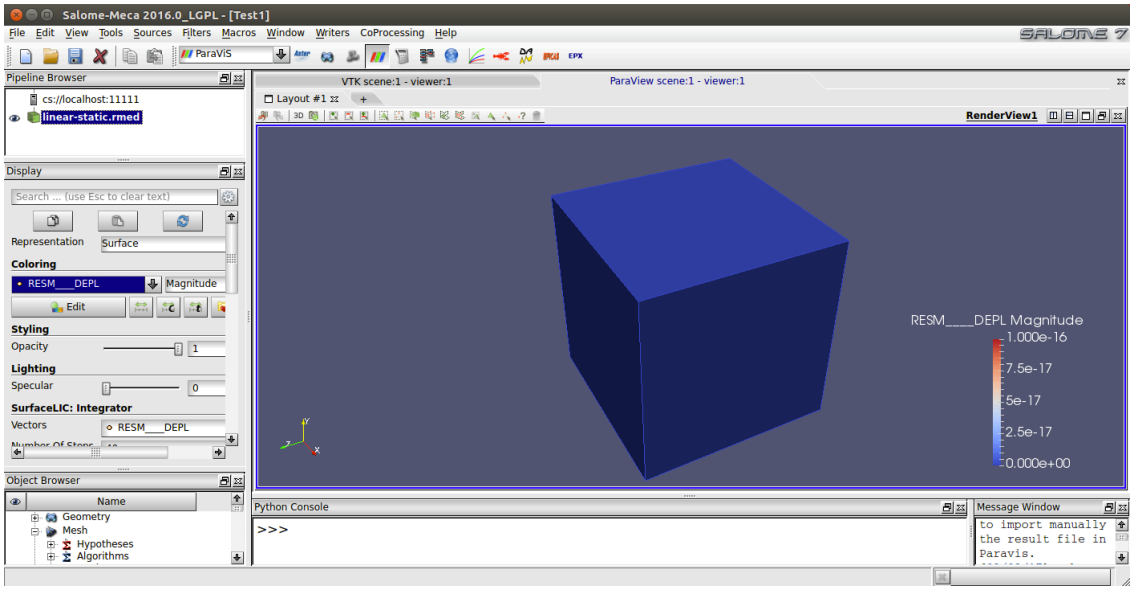


Ilustración 39: Módulo ParaViS, visualización de resultados nuevos

Si la ejecución del análisis reporta un mensaje de error (Ilustración 41), se puede consultar el error cometido en el archivo guardado en el directorio (donde se han guardado el resto de los archivos del estudio) con la extensión ".resu" (Ilustración 41)

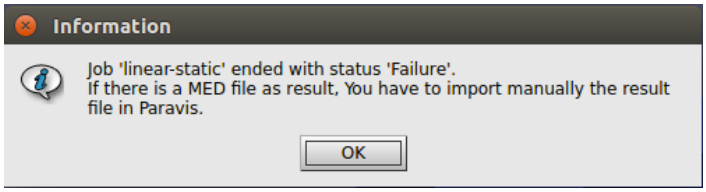


Ilustración 40: Módulo Aster, resultado de la ejecución 'Failure'

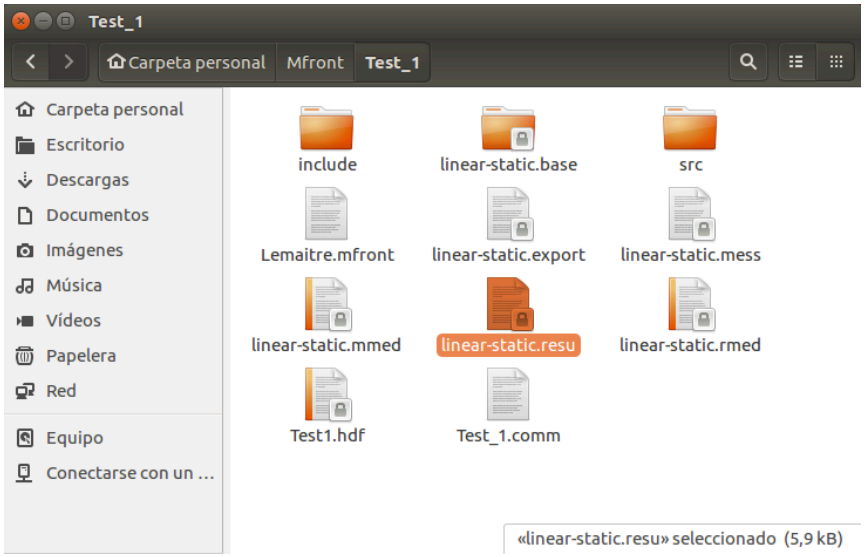


Ilustración 41: Resultados de la ejecución en el archivo 'linear-static.resu'

6 Conclusiones

A nivel personal, durante la elaboración de este trabajo se ha podido aprender la importancia de las características de un material para realizar un estudio, al igual que su complejidad a la hora de diseñarlo. En otras palabras, para realizar un estudio, es evidente que, para aumentar el nivel de credibilidad en el estudio, el nivel de exactitud en las características del comportamiento de un material debe ser lo mayor posible, no obstante, estas características no son siempre muy fáciles de conseguir.

Para ello, Mfront resulta una herramienta muy útil para generar librerías que contendrán las características del material para poder usarlas en programas de cálculo. No obstante, la cantidad de programas con las que serán compatibles estas librerías no es muy extensa.

Por otra parte, aunque el lenguaje de edición de estos archivos es entendible, su generación no es del todo intuitiva y no hay demasiados manuales o ejemplos útiles en la red, y la mayoría de ellos están en francés, lo que dificulta notablemente su estudio, o sino, son ejemplos referentes a versiones del programa más antiguas y se deben modificar considerablemente para hacerlas útiles a la versión actual.

Además, la inclusión de estas librerías en el paquete Salome-Meca no resulta nada fácil.

A modo de reflexión crítica, se podría afirmar que se han conseguido alcanzar los objetivos iniciales de este trabajo los cuales consistían en aprender el funcionamiento de estos programas, aunque por otra parte, personalmente, no sabría generar un código del comportamiento de un material dado debido primero, a la complejidad de cálculo para la resolución de una fórmula de comportamiento del material para que se pueda incluir a Mfront, y por otra parte, la generación del código, usando las instrucciones disponibles en Mfront donde se mezclan bastante con el lenguaje C, hace que sea un tanto confusa y complicada.

En cuanto a la planificación del trabajo, no ha sido complicada seguirla pues esta consistía primero en aprender cómo funcionaba Mfront, luego aprender cómo funcionaba Salome-Meca y finalmente generar un comportamiento con Mfront e introducirlo a Salome-Meca.

Cada punto de la planificación, empezando por la simple instalación de los productos, ha tenido sus complicaciones, aunque se han ido pudiendo cumplir los plazos planeados, aunque el último punto, cargar las librerías cargadas a Salome-Meca se ha complicado más de lo previsto. Esto ha implicado tener que eliminar puntos adicionales previstos para este trabajo como la generación de más ejemplos de comportamientos de material.

Este campo de estudio ofrece muchas líneas de trabajo futuro:

El primero podría ser un manual más extenso con más ejemplos y una explicación más exhaustiva de la generación de archivos con Mfront.

Además, se podría hacer también un manual de uso de los distintos módulos de Salome-Meca, aunque de este ya se pueden encontrar varios en la red.

Incluso se podría llegar a dedicar todo un manual tan solo a la edición de los archivos .comm que seguro podría llegar a ser muy extenso.

Además, aparte de los trabajos del tipo manuales, existen muchas otras líneas de trabajo como podrían ser el estudio o generación de distintos materiales que no se hayan generado aún, como podrían ser el tejido muscular, para poder modelar y evaluar su comportamiento con Salome-Meca.

7 Bibliografia

[1] Página oficial de TFEL / MFRONT: http://tfel.sourceforge.net (última visita 23/2/2017)

[2] Página oficial de Salome: http://www.salome-platform.org (última visita 23/2/2017)

[3] Página oficial de Code-Aster: http://www.code-aster.org (última visita 23/2/2017)

[4] Página oficial de CEA Cadarache: http://www-cadarache.cea.fr (última visita 23/2/2017)

[5] Información de EDF en Wikipedia https://es.wikipedia.org/wiki/Électricité_de_France (última visita 23/2/2017)

[6] Sección de documentos de Mfront: http://tfel.sourceforge.net/documentations.html (última visita 23/2/2017)

[7] Comportamientos mecánicos: http://tfel.sourceforge.net/documents/mfront/behaviours.pdf (última visita 23/2/2017)

[8] Definición de material ortótropo: https://es.wikipedia.org/wiki/Material_ortótropo (última visita 23/2/2017)

[9] Mtest: http://tfel.sourceforge.net/documents/mtest/mtest.pdf (última visita 23/2/2017)

[10] Introducción a Salome y Salome-Meca: http://calculixforwin.blogspot.com.es/2015/12/salome-platform-and-salome-meca.html (última visita 23/2/2017)

[11] Introducción a Code-Aster: http://ingenierialibreyabierta.blogspot.com.es/2016/03/analisis-numerico-estructural-fem-de_26.html#more (última visita 23/2/2017)

[12] Modelo de la ley de Lemaitre: http://code-aster.org/doc/v12/en/man_r/r5/r5.03.08.pdf (última visita 23/2/2017)

[13] Incluir un comportamiento en Code-Aster: http://tfel.sourceforge.net/documents/tp/tp.pdf (última visita 23/2/2017)

[14] Manual ASTK: http://www.code-aster.org/doc/v12/en/man_u/u1/u1.04.00.pdf (última visita 23/2/2017)

[15] Ejemplos de uso de Salome-Meca: http://engineering.moonish.biz/fea.using-open-source-software/ (última visita 23/2/2017)

[16] Guia de uso de Mfront con Code-Aster: http://www.code-aster.org/V2/doc/default/en/man_u/u2/u2.10.02.pdf (última visita 23/2/2017)

[17] Manual de Code-Aster: https://framabook.org/docs/Code_Aster/beginning_with_Code_Aster_JPAubry_20131206.pdf (última visita 23/2/2017)

[18] Foro de TFEL/MFront: https://sourceforge.net/p/tfel/discussion/installation/thread/49ea414b/ (última visita 23/2/2017)

[19] Foro de Code-Aster: http://code-aster.org/forum2/ (última visita 23/2/2017)

Anexo 1: Instalación de los prerequisitos

El primero a tener en cuenta, es que, para utilizar los programas necesarios de este documento, se necesitará trabajar en un entorno Linux, por lo que, en el caso personal, se ha instalado un sistema Ubuntu desde una máquina virtual en un equipo Mac.

En este punto, y los siguientes, para evitar problemas de accesos a determinados archivos o carpetas, se trabajará como *root* desde el Terminal del sistema:

```
$ sudo –i
```

Para el correcto funcionamiento de los programas que se mencionan en este documento, es necesaria la instalación de los siguientes paquetes antes de instalar los programas en cuestión:

- gcc
- cmake
- python
- python-dev
- python-numpy
- python-qt4
- tk
- bison
- flex
- liblapack-dev
- libblas-dev
- zlib1g-dev
- nedit
- geany
- gvim
- ddd
- xmgrace
- grace
- gnuplot

Cada uno de estos paquetes se instalará usando el siguiente comando desde el terminal (trabajando como *root*):

```
$ apt install [nombre_paquete]
```

Anexo 2: Instalación de TFEL/MFRONT

Para la instalación del paquete de TFEL/MFRONT hay que tener en cuenta que TFEL ya forma parte de las versiones superiores a la 12.03 de Code-Aster y a las superiores a la 2015.1 de Salome-Meca, por lo que si ya se dispone de alguno de estos productos no será necesaria su instalación.

Se podrá descargar la última versión lanzada del producto desde la página dedicada a la descarga de archivos de TFEL (https://sourceforge.net/projects/tfel/files/), donde a fecha de realización de este trabajo, la última versión disponible era la **tfel-2.0.4**.

Una vez ya se haya descargado el archivo tfel-2.0.4.tar.bz2, se accederá al directorio de descargas:

```
$ cd /home/[nombre_usuario]/Descargas
```

Y se descomprimirá el archivo descargado:

```
$ tar xvf tfel-2.0.4.tar.bz2
```

Antes de proceder a la instalación del paquete descargado, hay que asegurarse que la versión de *cmake* sea superior a la 2.8:

```
$ cmake --version
```

Si se cumple, ya se puede proceder a la instalación:

```
$ cmake [opciones]
$ make
$ make install
```

Donde las opciones serán según las preferencias del usuario, por ejemplo, una instalación recomendada sería:

```
$ cmake -DCMAKE_BUILD_TYPE=Release -Dlocal-castem-header=ON -Denable-fortran=ON -Denable-aster=ON -DCMAKE_INSTALL_PREFIX= /root/tfel
```

Finalmente, para asegurarse que la instalación se ha realizado correctamente, tan solo queda probarlo:

```
root@jordi-VirtualBox:/home/jordi/Descargas/tfel-2.0.4# mfront --version
tfel
Version : 2.0.4
Compiled with  on  -
Please submit bug at thomas.helfer@cea.fr
```

Anexo 3: Instalación de Salome-Meca

Para la instalación de Salome-Meca se podrá efectuar la descarga del archivo desde la página oficial de Code-Aster (www.code-aster.org) donde en el menú principal se deberá acceder a la sección de descargas (*Download* o *Téléchargement*).

La sección de descargar dispone de un menú a la izquierda desde donde se podrá acceder a la sección *Salome-Meca* y donde ya se podrá descargar las distintas versiones lanzadas de Salome-Meca. La última al día de la elaboración de este documento, “Salome-Meca 2016”.

Entonces, una vez ya descargado el paquete deseado, se accede a la carpeta de descargas y se deberá descomprimir el binario descargado:

```
$ tar xvf SALOME-MECA-2016-LGPL-1.tgz
```

Y cuando se haya descomprimido, se puede ejecutar el instalador:

```
$ ./SMECA_V2016_LGPL.run
```

Cuando se haya instalado se podrá acceder donde se haya instalado (por defecto /root/salome_meca), y desde ese directorio, para ejecutar-lo:

```
$ cd appli_V2016
$ ./salome
```

Anexo 4: Instrucciones disponibles en MFront

A continuación, se detallan el conjunto de instrucciones disponibles en MFront marcando en qué analizadores se pueden usar cada una de ellas.

INSTRUCCIONES	DefaultParser	DefaultCZMParser	DefaultFiniteStrainParser	Implicit	ImplicitFiniteStrain	ImplicitII	IsotropicMisesCreep	IsotropicPlasticMisesFlow	IsotropicStrainHardeningMisesCreep	MaterialLaw	Model	MultipleIsotropicMisesFlows	RungeKutta
@Algorithm				✔	✔	✔							✔
@Author	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔
@AuxiliaryStateVar	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@AuxiliaryStateVariable	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	
@Behaviour	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@Bounds	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔
@Coef	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@CompareToNumericalJacobian				✔	✔	✔							
@ComputedVar				✔	✔	✔							✔
@ComputeFinalStress				✔	✔	✔							
@ComputeStress				✔	✔	✔							✔
@ComputeThermalExpansion	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@Constant										✔			
@ConstantMaterialProperty											✔		
@Date	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔
@Derivative													✔
@Description	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔
@Domain											✔		
@Domains											✔		
@DSL	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@Epsilon				✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@ExternalStateVar	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@ExternalStateVariable	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@FlowRule							✔	✔	✔			✔	
@Function										✔	✔		

@GlobalParameter											✔		
@Import	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔
@Includes	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔
@InitializeJacobian				✔	✔	✔							
@InitializeJacobianInvert				✔	✔	✔							
@InitializeLocalVariables	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@InitJacobian				✔	✔	✔							
@InitJacobianInvert				✔	✔	✔							
@InitLocalVariables	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@InitLocalVars	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@Input										✔	✔		
@IntegerConstant	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@IntegrationVariable				✔	✔	✔							
@Integrator	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@Interface	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔		✔	✔
@IsotropicBehaviour	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@IsotropicElasticBehaviour	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@IsTangentOperatorSymmetric	✔	✔	✔	✔	✔	✔							✔
@IterMax				✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	
@JacobianComparisonCriterion				✔	✔	✔							
@JacobianComparisonCriterium				✔	✔	✔							
@Law										✔			
@Library	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔		✔	✔
@Link	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔		✔	✔
@LocalParameter											✔		
@LocalVar	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@LocalVariable	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@Material	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔
@MaterialLaw	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔
@MaterialProperty	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@MaximumIncrementValuePerIteration				✔	✔	✔							
@MaximumNumberOfIterations				✔	✔	✔							
@Members	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@Mfront	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔		✔	✔
@MinimalTimeStep													✔
@Model											✔		
@ModellingHypotheses	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@OrthotropicBehaviour	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@Output										✔	✔		
@Parameter	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔		✔	✔
@Parser	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔
@PerturbationValueForNumericalJacobianComputation				✔	✔	✔							
@PhysicalBounds	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔

@PredictionOperator	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@Predictor				✔	✔	✔							
@Private	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@Profiling	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@ProvidesSymmetricTangentOperator	✔	✔	✔										
@ProvidesTangentOperator	✔	✔	✔										
@RequireStiffnessOperator	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@RequireStiffnessTensor	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@RequireThermalExpansionCoefficientTensor	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@Sources	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@StateVar	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@StateVariable	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@StaticVar	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔
@StaticVariable	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔
@TangentOperator	✔	✔	✔	✔	✔	✔							✔
@Theta				✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	
@UpdateAuxiliaryStateVariables	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@UpdateAuxiliaryStateVars	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔
@UsableInPurelyImplicitResolution				✔	✔	✔	✔	✔				✔	✔
@UseQt	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔	✔			✔	✔

Anexo 5: Archivo de comandos Test_1.comm

En este anexo se incluye el archivo resultante del apartado “

Modificación del archivo .comm para incluir la librería” donde se modifica un archivo .comm ya generado con la ayuda del programa ‘EFICAS Aster’ para poder incluir en él una librería ya generada con MFRONT.

En él se puede ver que los comandos importantes donde hay que fijarse para la inclusión de una librería en el estudio son:

DEFI_MATERIAU: donde se le deberá indicar que trabajará con unos materiales definidos por MFRONT.

STAT_NON_LINE (o cualquier otro comando de computación): donde se le deberá indicar la ruta completa de donde se encuentra la librería en cuestión.

```
DEBUT();

young = 210000;
poisson = 0.3;
m = 11;
un_sur_k = 0.00032840723;
un_sur_m = 0.178571429;

L_REEL=DEFI_LIST_REEL(DEBUT=0.0,
                      INTERVALLE=(_F(JUSQU_A=0.02,
                                     PAS=0.002,),
                                  _F(JUSQU_A=0.06,
                                     PAS=0.004,),
                                  _F(JUSQU_A=0.24,
                                     PAS=0.01,),),);

L_INST=DEFI_LIST_INST(DEFI_LIST=_F(METHODE='MANUEL',
                                   LIST_INST=L_REEL,),);

MA=DEFI_MATERIAU(ELAS=_F(E=2.1e+11,
                         NU=0.3,),
MFRONT=_F(LISTE_COEF=(young,poisson,m,un_sur_k,un_sur_m,),),);

MAIL=LIRE_MAILLAGE(FORMAT='MED',);

MAIL=MODI_MAILLAGE(reuse =MAIL,
                   MAILLAGE=MAIL,
                   ORIE_PEAU_3D=_F(GROUP_MA='Press',),);

MODE=AFFE_MODELE(MAILLAGE=MAIL,
                 AFFE=_F(TOUT='OUI',
                         PHENOMENE='MECANIQUE',
                         MODELISATION='3D',),);
```

```
MATE=AFFE_MATERIAU(MAILLAGE=MAIL,
                   AFFE=_F(TOUT='OUI',
                           MATER=MA,),);

CHAR=AFFE_CHAR_MECA(MODELE=MODE,
                    DDL_IMPO=_F(GROUP_MA='Fix',
                                DX=0.0,
                                DY=0.0,
                                DZ=0.0,),
                    PRES_REP=_F(GROUP_MA='Press',
                                PRES=1.0,),);

RESM=STAT_NON_LINE(MODELE=MODE,
                   CHAM_MATER=MATE,
                   EXCIT=_F(CHARGE=CHAR,),
                   COMPORTEMENT=_F(RELATION='MFRONT',
LIBRAIRIE='/home/jordi/Mfront/Test_1/src/libAsterBehaviour.so',
                   NOM_ROUTINE='asterlemaitre',),
                   INCREMENT=_F(LIST_INST=L_INST,),
                   NEWTON=_F(REAC_INCR=1,
                             REAC_ITER=1,),);

RESU=MECA_STATIQUE(MODELE=MODE,
                   CHAM_MATER=MATE,
                   EXCIT=_F(CHARGE=CHAR,),);

RESM=CALC_CHAMP(reuse =RESM,
                RESULTAT=RESM,
                PRECISION=1e-06,
                CONTRAINTE=('SIGM_ELNO','SIGM_NOEU',),
                CRITERES=('SIEQ_ELNO','SIEQ_NOEU',),);

IMPR_RESU(FORMAT='MED',
          UNITE=80,
          RESU=_F(RESULTAT=RESM,

NOM_CHAM=('SIGM_NOEU','SIEQ_NOEU','DEPL','SIGM_ELNO','SIEQ_ELNO'
,),),);

FIN();
```