

Nouvelles approches basées sur la réduction de modèle pour le calcul multi-échelles des matériaux hyperélastiques en grandes déformations

Julien Yvonnet⁽¹⁾, Qi-Chang He⁽¹⁾, Michel Potier-Ferry⁽²⁾ & Hamid Zahrouni⁽²⁾

⁽¹⁾ Université de Marne-la-Vallée
Laboratoire de Mécanique, EA 2545
5 Bd Descartes, F-77454 Marne-la-Vallée Cedex 2, France

⁽²⁾ Université de Metz
LPMM, UMR CNRS 7554 ISGMP
Ile de Saulcy 57045, Metz Cedex 01 France
jyvonnet@univ-mlv.fr

Résumé :

Dans cette étude, nous présentons une méthode multi-échelle pour l'homogénéisation des matériaux hétérogènes, hyperélastiques, en grandes déformations. Une méthode d'éléments finis multi niveaux est utilisée en tandem avec une méthode de réduction de modèle de type POD pour alléger les coûts liés aux nombreux problèmes non linéaires qu'il est nécessaire de résoudre aux points de Gauss. Une extension de cette technique en vue de traiter les instabilités au niveau microscopique est proposée, par le biais d'une technique de perturbation avec continuation. Dans les différentes approches, chaque problème non linéaire associé à l'échelle microscopique est remplacé par un problème de petite taille (quelques dizaines de degrés de liberté). Des gains significatifs en temps de calculs liés à l'assemblage et la décomposition des matrices tangentes sont obtenus, ainsi qu'un gain de place mémoire lié à la réduction de la taille de la base décrivant l'histoire des différents domaines micro.

Abstract :

In this work, a multi-scale method for homogenization of nonlinear heterogeneous elastic solids undergoing finite strains is presented. We use a classical computational homogenization technique in tandem with a model reduction based on POD to alleviate the costs associated with the nested nonlinear problems. An extension of the technique for handling buckling and snap-through in microstructures is provided by introducing a perturbation technique with continuation. In the different techniques, the full nonlinear problems are reduced to a few degrees of freedom problems, and significant gains associated with storage, assembly, and decomposition of the tangent matrices are obtained, as well as the size of the database describing the history of the microscopic domains.

Mots-clefs :

Réduction de modèle ; multi-échelles ; grandes déformations

1 Introduction

Le calcul des propriétés effectives des matériaux hétérogènes hyperélastiques en grandes déformations est crucial dans certaines applications, telles que l'étude des tissus biologiques ou des mousses polymères. Récemment, le développement des calculs multi niveaux (FE²) Feyel *et al.* (2000), a offert de nouvelles perspectives pour obtenir à la fois une description détaillée de l'échelle microscopique et macroscopique. Dans ce type de technique, les propriétés homogénéisées sont obtenues en résolvant des problèmes éléments finis non-linéaires imbriqués aux différentes échelles, incluant l'échelle où le comportement est connu dans les différentes phases. Cependant ce type d'approche nécessite un effort de calcul important. Dans l'approche proposée, nous projetons les équations du problème linéarisé associé au problème non linéaire microscopique sur une base réduite, obtenue par le biais de la méthode POD (Proper Orthogonal

Decomposition) Holmes *et al.* (1996). Ceci permet de réduire radicalement la taille (nombre de degrés de liberté) du problème, de même que la place mémoire nécessaire pour stocker l'histoire associée à chacun des points de Gauss. Dans cette étude, nous présentons la méthode multi-échelle avec réduction de modèle et proposons une extension dans le contexte d'une méthode de perturbation pour gérer les éventuelles instabilités et points limites au niveau microscopique.

2 Formulation hyperélastique multi-échelles en grandes déformations

Nous considérons un solide hétérogène de comportement hyperélastique occupant dans la configuration de référence un domaine $\bar{\Omega}_0$ dont le bord $\partial\bar{\Omega}_0$ est composé d'une partie où les conditions de Dirichlet sont imposées, ainsi que d'une partie associée aux conditions de Neumann. La microstructure est supposée périodique et caractérisée par un volume élémentaire représentatif (VER) Ω_0 dans la configuration de référence.

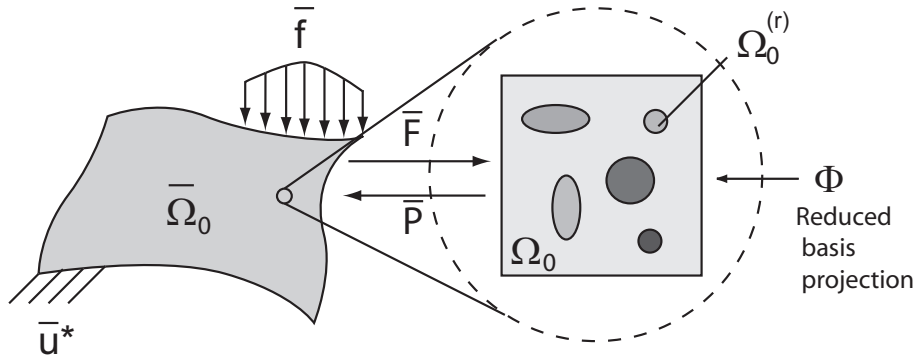


FIG. 1 – Représentation schématique de la stratégie multi-échelles avec réduction de modèle.

Nous utilisons une procédure de type éléments finis multi-niveaux (FE²), telle que chaque point matériel de la structure macroscopique (point de Gauss) est associé à un modèle élément fini de VER. Au niveau microscopique, la loi de comportement est connue dans chaque phase $\Omega_0^{(r)}$ et supposée suivre une loi de comportement hyperélastique de type Mooney-Rivlin compressible dont la fonction densité d'énergie de déformation est exprimée par :

$$\Psi^{(r)} = c^{(r)}(J - 1)^2 - d^{(r)} \log(J) + c_1^{(r)}(I_1 - 3) + c_2^{(r)}(I_2 - 3) \quad (1)$$

tel que le premier tenseur de Piola-Kirchhoff microscopique \mathbf{P} soit donnée par $\mathbf{P}(\mathbf{X}) = \partial\Psi^{(r)}(\mathbf{F})/\partial\mathbf{F}$ et où les différents coefficients $c^{(r)}$, $d^{(r)}$, $c_1^{(r)}$ et $c_2^{(r)}$ caractérisent la phase (r) . Dans le contexte d'une procédure multi-niveaux, le tenseur des contraintes macroscopique recherché $\bar{\mathbf{P}}$ est obtenu en chaque point de Gauss en appliquant des conditions aux limites appropriées faisant intervenir le tenseur macroscopique du gradient de la déformation $\bar{\mathbf{F}}$ sur le VER et en résolvant le problème non-linéaire associé au VER. Les contraintes macroscopiques $\bar{\mathbf{P}}$ sont alors obtenues par moyenne sur le VER. Les différentes équations associées au problème multi-échelles sont résumées dans la Table 1.

	Échelle macro	Échelle micro (point de Gauss)
Forme faible	$\int_{\bar{\Omega}_0} \bar{\mathbf{P}}(\mathbf{u}) : \nabla_{\mathbf{X}}(\delta\mathbf{u}) = \delta\bar{W}_{ext}$	$\int_{\Omega_0} \mathbf{P}(\mathbf{u}_\mu) : \nabla_{\mathbf{X}}(\delta\mathbf{u}) = \delta W_{ext}^\mu$
Couplage	$\bar{\mathbf{P}} = \frac{1}{\bar{\Omega}_0} \int_{\bar{\Omega}_0} \mathbf{P}(\mathbf{u}_\mu) d\Omega$	Boundary conditions on $\partial\Omega_0$ via $\bar{\mathbf{F}}(\mathbf{X})$

TAB. 1 – Equations du modèle multi-échelles

3 Méthode multi-échelle avec réduction de modèle et extension pour les problèmes de flambement

3.1 Procédure basée sur l'algorithme de Newton-Raphson

Dans le contexte de l'approche proposée, chaque problème non-linéaire associé à l'échelle microscopique est remplacé par un problème de taille réduite n'impliquant qu'un faible nombre de degrés de liberté (d.d.l). Les degrés de libertés (déplacements) d'un problème microscopique particulier sont exprimés sous forme de série en utilisant la décomposition propre orthogonale (Proper Orthogonal Decomposition ou POD) sous la forme :

$$\mathbf{q}^R(t) = \phi_0 + \sum_{m=1}^M \phi_m \xi_m(t) \quad (2)$$

où $\xi_m(t)$ sont des coefficients arbitraire et $\phi_i, i = 1, \dots, M$ sont les M premiers vecteurs propres de la matrice de corrélation \mathbf{Q} construite à partir de vecteurs solutions $\mathbf{q}(t)$ "échantillonnés" au cours de simulations préliminaires pour des conditions aux limites représentant différents états de chargement "représentatifs" (voir Yvonnet *et al.* (2007)) pour plus de détails) :

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{S} \mathbf{U} \mathbf{U}^T \quad (3)$$

$$\mathbf{U} = \{\mathbf{q}(\zeta_1) - \bar{\mathbf{q}}, \mathbf{q}(\zeta_2) - \bar{\mathbf{q}}, \dots, \mathbf{q}(\zeta_S) - \bar{\mathbf{q}}\} \quad (4)$$

où $\zeta_i, i = 1, \dots, S$, sont des vecteurs associés à des paramètres décrivant le modèle (temps, conditions aux limites, etc.). En introduisant l'approximation POD pour les incréments de déplacements

$$\Delta \mathbf{q}^{k+1} = \sum_{m=1}^M \phi_m \Delta \xi_m^{k+1} \quad (5)$$

et pour les fonctions test dans la forme faible linéarisée du problème à l'échelle microscopique, on obtient un système de la forme :

$$\Phi^T \mathbf{K}_\mu^k \Phi \Delta \xi^{k+1} = \Phi^T [\mathbf{f}_{ext}(\mu) - \mathbf{f}_{int}^k(\mathbf{q}_\mu)] \quad (6)$$

où la matrice $\Phi^T \mathbf{K}_\mu^k \Phi$ est seulement de taille $M \times M$, avec $M \ll N$, N étant le nombre total de degrés de liberté du problème complet à l'échelle microscopique et ξ sont des coefficients arbitraires, actualisés par $\xi^{k+1} = \xi^k + \Delta \xi^{k+1}$. Si l'on considère le nombre de points d'intégration du modèle éléments finis macroscopique et le nombre de degrés de liberté N du modèle microscopique, l'introduction de la POD permet une réduction drastique du nombre de d.d.l. total induit par la procédure multi-échelle. On évite ainsi d'assembler et de décomposer des matrices de tailles importantes en chaque point de Gauss. De plus, la taille de la base de donnée décrivant l'histoire de tous les domaines microscopiques \mathbf{q}^n nécessaire pour l'incrément de Newton-Raphson macroscopique suivant est aussi réduite, car on ne stocke alors plus que les variables réduites ξ^k . De nombreux exemples numériques illustrant la méthode peuvent être trouvés dans Yvonnet *et al.* (2007) ou Monteiro *et al.* (2007).

3.2 Approche par méthode asymptotique

La méthode asymptotique numérique (MAN) offre un cadre pratique pour traiter les problèmes d'instabilités et de points limites. Ainsi, les différentes variables du problème $\hat{\mathbf{q}} = \{\mathbf{u}, \mathbf{P}, \lambda\}$, où λ est un paramètre de chargement, sont développées en séries sous la forme :

$$\hat{\mathbf{q}}^{n+1}(a) = \hat{\mathbf{q}}^n + \sum_{p=1}^N a^p \hat{\mathbf{q}}_p \quad (7)$$

En introduisant l'approximation (7) dans la forme faible associée au problème à l'échelle microscopique, on obtient une série de problèmes linéaires qui à l'ordre p prennent la forme $\mathcal{L}(\mathbf{u}_p, \delta \mathbf{u}) = \lambda_p \Psi_{ext}(\delta \mathbf{u}) + \mathcal{F}_p^{nl}(\delta \mathbf{u})$. En développant les termes asymptotiques \mathbf{u}_p et $\delta \mathbf{u}$ par la POD, on obtient une approximation de la forme $\mathbf{u}^{n+1}(a) = \Phi \left\{ \boldsymbol{\xi}^n + \sum_{p=1}^N a^p \boldsymbol{\xi}_p \right\}$ qui conduit à une série de problèmes linéaires de tailles réduites pouvant être résolus par la procédure décrite ci-dessous :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{ordre 1} \\ \hat{\boldsymbol{\xi}} = \left\{ \Phi^T \mathbf{K}_t \Phi \right\}^{-1} \Phi^T \mathbf{f} \\ \lambda_1 = \frac{\pm 1}{\sqrt{\hat{\boldsymbol{\xi}}^T \hat{\boldsymbol{\xi}} + \beta}} \\ \boldsymbol{\xi}_1 = \lambda_1 \hat{\boldsymbol{\xi}} \\ \hat{\mathbf{u}} = \Phi \hat{\boldsymbol{\xi}}, \quad \hat{\mathbf{u}}|_{\partial\Omega_u} = 1, \quad \mathbf{u}_1 = \lambda_1 \boldsymbol{\xi}_1 \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{ordre } p \\ \boldsymbol{\xi}_p^{nl} = \left\{ \Phi^T \mathbf{K}_t \Phi \right\}^{-1} \Phi^T \mathbf{f}_p^{nl} \\ \lambda_p = -\lambda_1 \left\{ \boldsymbol{\xi}_p^{nl} \right\}^T \boldsymbol{\xi}_1 \\ \boldsymbol{\xi}_p = \frac{\lambda_p}{\lambda_1} \boldsymbol{\xi}_1 + \boldsymbol{\xi}_p^{nl} \\ \mathbf{u}_p = \Phi \boldsymbol{\xi}_p, \quad \mathbf{u}_p|_{\partial\Omega_u} = 0 \end{array} \right. \quad (8)$$

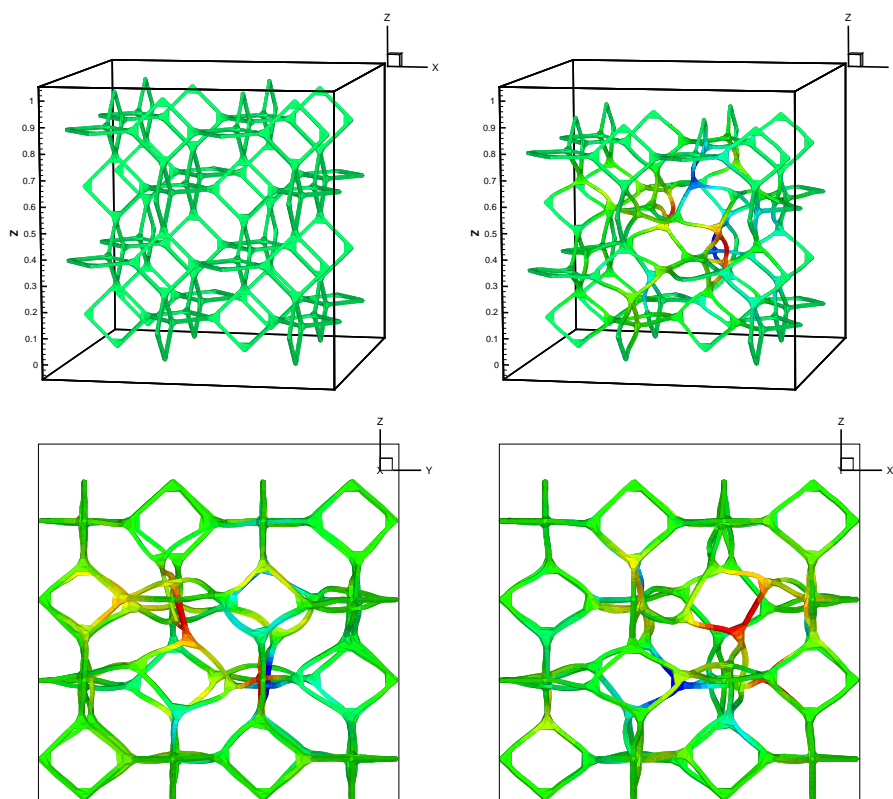
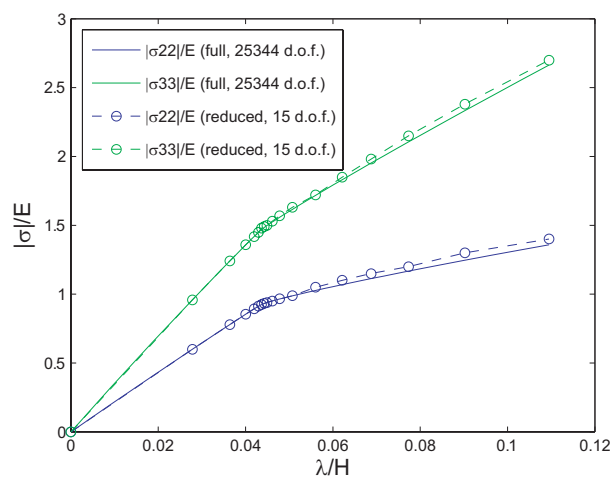
4 Exemple numérique

La figure 2 montre la compression d'une microstructure cellulaire de type Kelvin. Le modèle élément fini implique 25344 d.d.l.. Nous testons ici la qualité de la solution avec réduction de modèle en présence de flambement. Dans cet exemple, seulement 15 modes ont été retenus par la procédure de type POD. Les réponses homogénéisées des deux solutions sont comparées dans la figure 3.

Dans la figure 4 un exemple de calcul en base réduite sur une structure cellulaire est représenté. On étudie ici la réponse macroscopique (homogénéisée) de la cellule en contraintes pour des modes de chargement notés A,B,C et D, induisant le flambement élastique des parois des cellules. Ces modes combinent de la compression, du cisaillement, et de la traction dans les différentes directions spatiales et ne coïncident pas avec les modes utilisés pour construire la base réduite. Nous comparons la solution du modèle réduit (22 d.d.l) avec la solution du modèle complet (4064 d.o.f.). Nous reproduisons la solution de référence avec une qualité raisonnable, au vu du gain en terme de degrés de libertés. D'importantes réductions de temps de calculs (jusqu'à 90 % sont obtenues, associées à l'assemblage et à la décomposition des matrices tangentes.

5 Conclusions

Une procédure multi-échelle avec réduction de modèle de type POD a été présentée. La technique permet des gains significatifs en termes de place mémoire associée au stockage de l'histoire des problèmes microscopiques, et des gains en temps de calculs associés à l'assemblage et à la décomposition des matrices tangentes des problèmes microscopiques. Une extension permettant l'analyse du flambement au niveau microscopique en introduisant un développement asymptotique a également été proposée.

FIG. 2 – Flambement de $2 \times 2 \times 2$ cellules de Kelvin en compression uniaxiale.FIG. 3 – Contraintes homogénéisés ; Comparaison entre solutions complètes et réduites pour le problème impliquant $2 \times 2 \times 2$ cellules de Kelvin en compression uniaxiale.

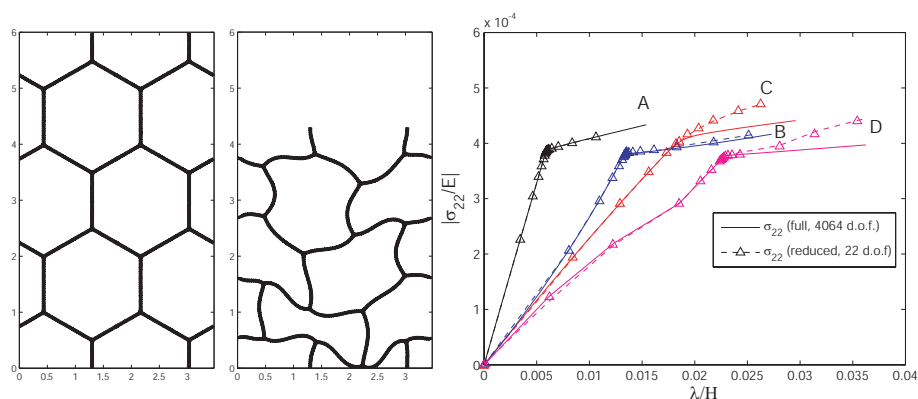


FIG. 4 – Réponse macroscopique en contraintes pour une microstructure de type nid d'abeille pour différents modes de chargements notés A,B,C et D ; comparaison entre la solution en base réduite et la solution du problème complet.

Références

- Feyel, F., Chaboche, J.-L. 2000 FE² multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fiber SiC/Ti composite materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **183** 309-330
- Holmes, P., Lumley, J.L., Berkooz, G. 1996 Turbulence, Coherent Structures, Dynamical Systems and Symmetry *Cambridge University Press, Cambridge*
- Yvonnet, J., He., Q.-C. 2007 The Reduced Model Multiscale Method (R3M) for the non-linear homogenization of hyperelastic media at finite strains *Journal of Computational Physics* in press.
- Monteiro, E., Yvonnet J., He., Q.-C. 2007 Computational homogenization for nonlinear conduction in heterogeneous materials using model reduction, submitted.