



HAL
open science

Sur le calcul des variables internes cachées à partir des données expérimentales pour les matériaux à mémoire.

Paul-William Gerbaud, Pierre Ladevèze, David Néron

► To cite this version:

Paul-William Gerbaud, Pierre Ladevèze, David Néron. Sur le calcul des variables internes cachées à partir des données expérimentales pour les matériaux à mémoire.. 15ème colloque national en calcul des structures, Université Polytechnique Hauts-de-France [UPHF], May 2022, 83400 Hyères-les-Palmiers, France. hal-03717879

HAL Id: hal-03717879

<https://hal.science/hal-03717879>

Submitted on 8 Jul 2022

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Sur le calcul des variables internes cachées à partir des données expérimentales pour les matériaux à mémoire

P.-W. Gerbaud¹, P. Ladevèze¹, D. Néron¹

¹ LMT (ENS Paris-Saclay) / CNRS / Université Paris-Saclay, {pgerbaud,ladeveze,neron}@ens-paris-saclay.fr

Résumé — L'approche "data-driven" considérée ici traite des matériaux dont la mémoire peut-être décrite par un certain nombre de variables internes cachées. Leur calcul à partir des seuls essais expérimentaux constitue le "Problème Central" qui est l'objet de ce travail.

Mots clés — Pilotage par les données, matériaux à mémoire, calcul de structure.

1 Introduction

Les méthodes de calcul de structure pilotés par les données font leur chemin en mécanique du solide. Depuis les travaux pionniers d'Ortiz, Chinesta et leur équipes [1–4], où la Science des Matériaux est supprimée ou fortement diminuée, de nombreuses contributions ont vu le jour, préservant plus ou moins de sens physique [5–22]. Tous ces travaux présentent des formulations originales, très efficaces pour traiter certains cas particuliers, mais sont encore limitées à des situations ou à des matériaux très spécifiques.

La méthode de calcul piloté par les données a déjà été présentée, [5], et on met en place ici le traitement numérique du noeud de cette méthode, à savoir, le calcul des variables internes cachées, afin d'obtenir une "Variété Constitutive Expérimentale" (VCE), qui est un modèle mathématique exploitable pour faire du calcul de structure. C'est ce qu'on appelle le "Problème Central".

2 Principes de la méthode de calcul piloté par les données

La méthode de calcul piloté par les données repose sur la séparation des équations sur l'espace-temps en deux groupes : les équations d'équilibre et de compatibilité d'une part, la relation de comportement d'autre part. Classiquement en Science des Matériaux, la relation de comportement est un modèle mathématique, dérivé des observations expérimentales. Ici, cette partie est remplacée par les données expérimentales directement. On utilise la méthode LATIN [23, 24] pour calculer l'état d'un point matériau à un instant donné, le seul changement étant qu'au lieu de résoudre les équations du comportement, on interpole entre les points expérimentaux. La méthode itérative est représentée en figure 1. Dans ce schéma, la variété (\mathbf{Ad}) correspond à l'admissibilité, c'est-à-dire le groupe d'équations réputées exactes, alors que la variété (Γ) est discrète. Sa taille est directement liée au nombre d'essais, et certaines composantes (les variables cachées) ont été calculée en utilisant la Science des Matériaux. Le calcul de structure en lui-

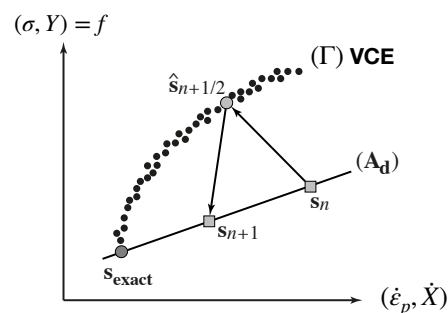


FIGURE 1 – Le schéma de résolution itérative.

même ne pose pas de difficultés particulières. Le détail est visible dans [5] pour plus de détails. Quand à l'interpolation, on observe qu'avec un nombre réduit de points expérimentaux, on obtient d'excellent résultats. L'unique difficulté à lever est donc l'obtention de la VCE complète, c'est-à-dire le calcul des variables cachées.

3 Problème Central : une première formulation

3.1 La variété comme modèle mathématique

Prenons $\mathcal{H}^{(0,P)}$, une famille d'histoires de chargements. Résoudre le Problème Central consiste à trouver $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^q$ tel que chaque histoire de $\mathcal{H}^{(0,P)}$ satisfait, avec une certaine tolérance,

$$\begin{aligned}\varepsilon_{p,p} &= g(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{X}, p) \quad \dot{p} > 0, \\ \mathbf{X}_{,p} &= \mathbf{h}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{X}, p) \quad \dot{p} > 0, \\ \dot{p} &= f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{X}, p) \quad \dot{p} \geq 0.\end{aligned}\tag{1}$$

Dans une optique de simplification, on n'ajoute pas ici de les contraintes supplémentaires issues de la vérification des deux principes de la Thermodynamique des Processus Irréversibles. La famille des histoires $\mathcal{H}^{(0,P)}$ doit permettre de définir les fonctions g, h, f afin quelles constituent un modèle de comportement. Par exemple, pour une histoire de chargement en contrainte donnée sur $[0, T]$, la VCE doit permettre de calculer la déformation inélastique ε sur tout $[0, T]$. Il est donc possible, en utilisant un schéma incrémental et connaissant l'état matériau à t_n , ainsi que l'incrément de contrainte $\Delta\boldsymbol{\sigma}$, de prédire l'état matériau à $t_{n+1} = t_n + \Delta t$:

- état à t_n : $p_n, \varepsilon_{p,n}, \boldsymbol{\sigma}_n, \mathbf{X}_n$
- état à t_{n+1} : $p_{n+1}, \varepsilon_{p,n+1}, \boldsymbol{\sigma}_{n+1}, \mathbf{X}_{n+1}$

On a

$$\begin{aligned}p_{n+1} &= p_n + f(\boldsymbol{\sigma}_n, \mathbf{X}_n, p_n)\Delta t \\ \varepsilon_{p,n+1} &= \varepsilon_{p,n} + g(\boldsymbol{\sigma}_n, \mathbf{X}_n, p_n) \cdot (p_{n+1} - p_n) \\ \mathbf{X}_{n+1} &= \mathbf{X}_n + \mathbf{h}(\boldsymbol{\sigma}_n, \mathbf{X}_n, p_n) \cdot (p_{n+1} - p_n)\end{aligned}$$

La contrainte sur les fonctions g, h, f est leur univocité. Cette propriété d'univocité est la pierre angulaire de la méthode de construction de la variable interne cachée $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^q$.

3.2 Formulation dans un cas simple

Avant d'utiliser le jeu d'équation (1), on étudie une équation simplifiée 1D où l'unique fonction f est supposée régulière

$$z = f(x, y).$$

x, y, z sont normalisés et appartiennent à $[0, 1]$. On connaît l'ensemble des $(z, x)^n, n \in I_N$ et le Problème Central est ici de trouver $y^n, n \in I_N$ tel que la fonction

$$f : (x, y)^n \rightarrow z^n, \quad n \in I_N$$

soit univoque. On introduit la notation $x_{ij} = x^i - x^j$ la distance entre deux points d'un champ. Pour quantifier le caractère univoque ou non de la fonction f , on introduit le voisinage autour d'un point i : $(x^i, y^i), i \in I_N$

$$I(x^i, y^i; \epsilon) = \left\{ j \in I_N \mid |x_{ij}|^2 + |y_{ij}|^2 \leq \epsilon^2 \right\}$$

où ϵ est un paramètre scalaire petit ($\epsilon \ll 1$). Calculons

$$J(y) = \sup_{i \in I_N} N \sup_{i \in I_N} \left\| z^i - z^j \right\| \epsilon$$

On peut-être confronté à deux cas

$$\begin{aligned} J(0) &= O(1) && \text{pas de variable cachée nécessaire,} \\ J(0) &\gg 1 && \text{une variable cachée est nécessaire.} \end{aligned}$$

Dans le dernier cas, une variable y devrait satisfaire $J(y) = O(1)$. Il est facile de construire une solution dans ce cas précis. Par exemple, si $J(0) \gg 1$, on peut choisir y tel que

$$y^i = z^i - \sum_{j \in I_N} P_{ij}(x) z^j$$

où

$$P_{ij} = \frac{\Gamma_{ij}}{\sum_{j \in I_N} \Gamma_{ij}}, \quad \Gamma_{ij} = \exp\left(-\frac{|x_{ij}|^2}{\epsilon^2}\right)$$

Dans cette expression, on enlève les variations du champ z imputables à celles de x . Une dernière étape consisterait à effectuer une réduction sur $\{y^i \mid i \in I_N\}$ en utilisant une technique comme la KPCA. Il n'y a pas de solution unique ici, même sous la contrainte (y, x) indépendantes. Une telle solution ne peut pas être étendue au problème (1) qui nous intéresse, c'est pourquoi on établit une autre formulation dans le but de le résoudre. Le potentiel d'univocité s'écrit

$$U(y) = \sum_{i \in I_N} \sum_{j \in I_N} P_{ij}(\alpha) I(\alpha_{ij}) / D$$

avec

$$\begin{aligned} \alpha_{ij} &= |x_{ij}|^2 + |y_{ij}|^2 - |z_{ij}|^2 \\ D &= \sum_{i \in I_N} \sum_{j \in I_N} P_{ij}(x) \\ I(\alpha) &= (1 - \exp(-\alpha)) \cdot (-\alpha) \end{aligned}$$

La fonction $I(\alpha)$ est représenté en figure 2. On peut-être confronté à deux cas

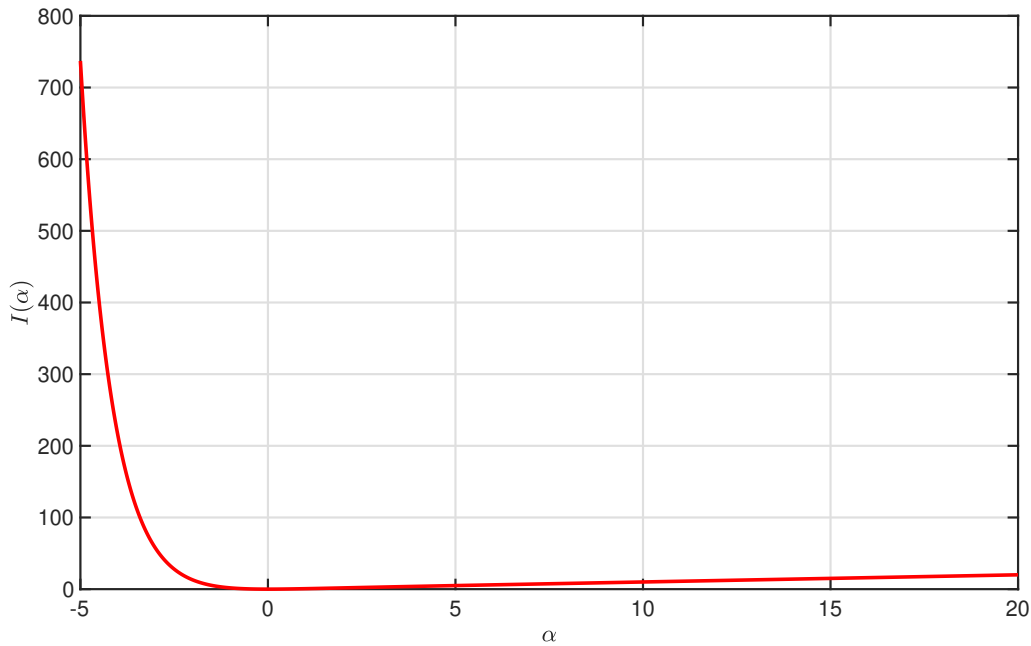


FIGURE 2 – La fonction $I(\alpha)$

$$\begin{aligned} U(0) &= O(1) \quad \text{pas de variable cachée nécessaire,} \\ U(0) &\gg 1 \quad \text{une variable cachée est nécessaire,} \end{aligned}$$

et dans le dernier cas

$$\{y^i \mid i \in I_N\} = \underset{\{y^i \mid i \in I_N\}}{\operatorname{arg\,min}} U(y')$$

En utilisant une propriété remarquable sur la forme de la fonction I , on réécrit le problème comme un problème de minimisation des termes α_{ij} sous la contrainte $\alpha_{ij} > 0$ (méthode Lagrangienne augmentée). Une méthode itérative est mise en place pour le résoudre. Une étape locale traite la contrainte tandis que la minimisation se traduit sous la forme d'un système linéaire à inverser, donc y est la solution. Cette méthode donne d'excellents résultats dans le cadre d'une équation non linéaire en 1D, la convergence vers une solution admissible est obtenue en quelques itérations.

3.3 Formulation pour un matériau élastoplastique

La mise en oeuvre de la méthode précédente dans le cadre des équations 1 est plus délicate. Dans ce cas ci, ce n'est pas un mais trois sous potentiels qu'il faut prendre en compte, le potentiel final étant leur somme, et les fonctions dépendent également du temps matériau p . Les trois sous potentiels sont

$$\begin{aligned} U_g &= \int_0^P \sum_{i,j \in N(p)} P_{ij}(p) \cdot I(\alpha_{ij}^g(p)) dp, \\ U_h &= \int_0^P \sum_{i,j \in N(p)} P_{ij}(p) \cdot I(\alpha_{ij}^h(p)) dp, \\ U_f &= \sum_{i,j \in N} \bar{P}_{ij} \cdot I(\alpha_{ij}^f), \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} \alpha_{ij}^g &= \left[\sigma_{ij}^2 + |X_{ij}|^2 - \varepsilon_{p,p,ij}^2 \right] / \epsilon^2, \\ \alpha_{ij}^h &= \left[|\sigma_{ij}|^2 + |X_{ij}|^2 - |X_{p,ij}|^2 \right] / \epsilon^2, \\ \alpha_{ij}^f &= \left[|\sigma_{ij}|^2 + |X_{ij}|^2 - |p_{ij}|^2 \right] / \epsilon^2. \end{aligned}$$

Les essais nous donnent comme données brutes

$$(\varepsilon_p(p), \sigma(p)), \quad p \in [0, P],$$

qui seront utilisées pour construire le comportement. On peut alors utiliser la méthode PGD et réécrire

$$(\varepsilon_p(p), \sigma(p)) = \sum_{r=1}^r \phi_r(p) (\bar{\varepsilon}_{p,r}, \bar{\sigma}_{p,r}),$$

avec $\phi_r(p)$ des fonctions scalaires, en petit nombre. On effectue une décomposition PGD par famille d'essais (au sens du type d'essai : proportionnel, cyclique, etc). Dans le but de réduire la complexité et la taille du problème, on recherche alors la solution X sous la forme décomposée

$$X(p) = \sum_{r=1}^r \gamma_r \cdot \phi_r(p),$$

où les γ_r sont nos inconnus. Cette formulation présente l'avantage d'obtenir une solution régulière en p pour X , tout en divisant la taille du problème par la taille de la discrétisation sur $[0, P]$.

3.4 Le programme d'essai

On s'intéresse ici à un matériau élastoplastique isotrope sous l'hypothèse des contraintes planes. Les données expérimentales sont générées à partir de modèles élastoplastiques standards. Trois types d'essais sont utilisés ici : des essais proportionnels (voir Fig. 3), des essais en deux temps (voir Fig. 4), et des essais cyclés (voir Fig. 5).

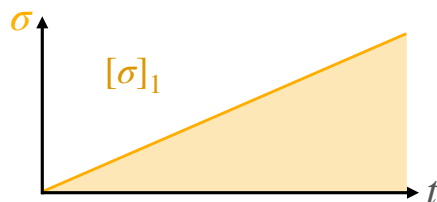


FIGURE 3 – Scenario à chargement proportionnel.

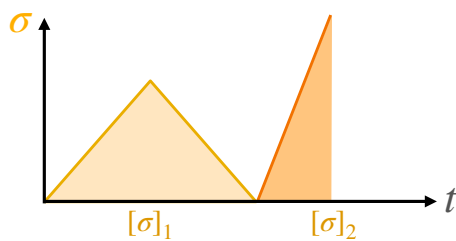


FIGURE 4 – Scenario à chargement en deux temps.

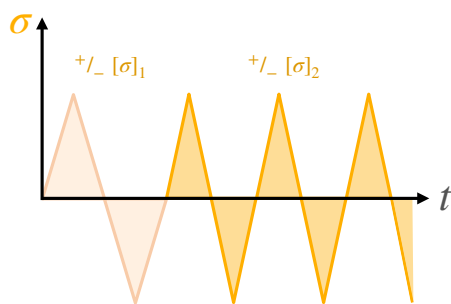


FIGURE 5 – Scenario à chargement cyclé.

Ces trois types de chargements sont tous biaxiaux, avec différents coefficients de biaxialité, et la direction de chargement est donnée en contrainte principale (σ_{nn}, σ_{tt}). Dans le cas des essais en deux temps, on effectue une rotation d'angle $\theta \in [-45, +45]$ sur la partie $[0, P/5]$ du chargement. Au total, le nombre d'essais est de

- 150 essais proportionnels,
- 867 essais deux temps,
- 150 essais cyclés,

soit un total de 1167 essais.

On regarde trois types de données :

- données générées par un modèle elastoplastique avec écrouissage isotrope,
- données générées par un modèle elastoplastique avec écrouissage cinématique linéaire et isotrope,
- données générées par un modèle elastoplastique avec écrouissage cinématique non linéaire et isotrope.

Dans le premier cas, le domaine d'élasticité s'écrit simplement

$$f = \|\sigma_D\| - \sigma_y - R(p),$$

$$R(p) = R_{\text{inf}}(1 - \exp(-b \cdot p)),$$

aucune variable interne supplémentaire n'est nécessaire, et le calcul du potentiel le confirme

$$U(0) = 1.08.$$

Dans le deuxième cas, le domaine d'élasticité s'écrit

$$f = \|\sigma_D - \mathbf{X}\| - \sigma_y - R(p),$$

$$R(p) = R_{\text{inf}}(1 - \exp(-b \cdot p))$$

il faut une variable interne supplémentaire, et le calcul du potentiel le confirme

$$U(0) = 5.87 \cdot 10^{137} \gg O(1).$$

Il est facile de voir ici que ε_p est la variable manquante, et en effet, on mesure

$$U(\varepsilon_p) = 1.52 \sim O(1).$$

Dans le troisième cas, le domaine d'élasticité s'écrit

$$f = \|\sigma_D - \mathbf{X}\| - a\mathbf{X} : \mathbf{X}\sigma_y - R(p),$$

$$R(p) = h \cdot p.$$

Sans variable supplémentaire, on obtient

$$U(0) \gg 10^{150} \gg O(1),$$

et si on utilise ε_p on mesure cette fois

$$U(\varepsilon_p) = 7.46 \cdot 10^{20}.$$

dans ce troisième cas, on résout le problème central pour calculer la variable cachée exacte, en partant de ε_p comme solution initiale.

3.5 Interpolation pour le calcul piloté par les données

Une fois la VCE calculée, on peut l'utiliser pour calculer un chargement qui ne fait pas partie du jeu de données expérimentales. En pratique, le nombre de points expérimentaux qui définissent la variété est petit. C'est pourquoi une procédure d'interpolation est vitale. Elle est utilisée les méthodes basées sur l'Espace de Hilbert à Noyau Reproduisant (Reproducing Kernel Hilbert Space, ou RKHS en anglais). Ici, on utilise un noyau Gaussien.

À partir des points expérimentaux $(\varepsilon_{p,p}, \mathbf{X}_{p,p}, \sigma, \mathbf{X})^i$ $i \in N(p)$, on calcule les fonctions interpolées qui définissent le modèle de matériau

$$\begin{aligned} \varepsilon_{p,p} &= g(\sigma, \mathbf{X}, p) \quad \dot{p} > 0, \\ \mathbf{X}_{p,p} &= h(\sigma, \mathbf{X}, p) \quad \dot{p} > 0, \\ p &= f(\sigma, \mathbf{X}, p) \quad \dot{p} > 0. \\ \dot{p} &\geq 0, \quad f(\sigma, \mathbf{X}, p) - p \leq 0, \quad \dot{p} \cdot (f(\sigma, \mathbf{X}, p) - p) = 0 \end{aligned}$$

Il est simple d'écrire un algorithme en plasticité qui exploite les fonctions précédentes, et ainsi, par incréments, on peut calculer l'état du matériau en tout temps pour une histoire de chargement donnée. L'interpolation donne de très bons résultats pour des types de chargements et des directions de contraintes n'appartenant pas aux essais initiaux.

4 Conclusion

Ce travail présente une première méthode pour traiter le Problème Central. En le résolvant dans cadre de matériaux à histoire, on résout le point difficile de la méthode de calcul piloté par les données présentée dans [5]. D'autres approches nécessitant moins de points expérimentaux suivront, mais cette méthode à le mérite de démontrer la faisabilité de l'approche globale. Il faudra également étoffer la fiabilité et la robustesse de la procédure, et la problématique de l'obtention des essais pourra alors être prise en compte. On ouvre également la voie à d'autres applications. Le traitement de problèmes multi-échelles en est une, où la construction de la VCE homogénéisée d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER) permet de transformer le problème initial, impliquant des calculs Eléments Finis (EF) imbriqués (une résolution EF sur un VER sur chaque élément du système macroscopique), en un unique problème EF sur le système macroscopique, dont le comportement en chaque élément est représenté par la VCE. La VCE étant calculée au préalable, la phase de calcul online devient plus rapide.

Références

- [1] T. Kirchdoerfer and M. Ortiz. Data-driven computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 304 :81–101, 2016.
- [2] R. Ibañez, D. Borzacchiello, J. V. Aguado, E. Abisset-Chavanne, E. Cueto, P. Ladevèze, and F. Chinesta. Data-driven non-linear elasticity : constitutive manifold construction and problem discretization. *Computational Mechanics*, 60(5) :813–826, 2017.
- [3] T. Kirchdoerfer and M. Ortiz. Data Driven Computing with noisy material data sets. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 326 :622–641, 2017.
- [4] F. Chinesta, P. Ladevèze, R. Ibañez, J. V. Aguado, E. Abisset-Chavanne, and E. Cueto. Data-Driven Computational Plasticity. In *Procedia Engineering*, volume 207, pages 209–214, 2017.
- [5] P. Ladevèze, David Néron, and P.-W. Gerbaud. Data-driven computation for history-dependent materials. *Comptes Rendus - Mécanique*, 347(11) :831–844, 2019.
- [6] P. Ladevèze, P.-W. Gerbaud, and David Néron. On a physics-compatible approach for data-driven computational mechanics. (*to appear*), 2021.
- [7] T. Kirchdoerfer and M. Ortiz. Data-driven computing in dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 113(11) :1697–1710, 2018.
- [8] R. Ibañez, E. Abisset-Chavanne, D. Gonzalez, J. L. Duval, E. Cueto, and F. Chinesta. Hybrid constitutive modeling : data-driven learning of corrections to plasticity models. *International Journal of Material Forming*, 12(4) :717–725, 2019.
- [9] R. Eggersmann, T. Kirchdoerfer, S. Reese, L. Stainier, and M. Ortiz. Model-Free Data-Driven inelasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 350 :81–99, 2019.
- [10] L. Stainier, Adrien Leygue, and M. Ortiz. Model-free data-driven methods in mechanics : material data identification and solvers. *Computational Mechanics*, 64(2) :381–393, 2019.
- [11] D. Gonzalez, F. Chinesta, and E. Cueto. Thermodynamically consistent data-driven computational mechanics. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 31(1) :239–253, 2019.
- [12] P. Carrara, L. De Lorenzis, L. Stainier, and Michael Ortiz. Data-driven fracture mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 372 :113390, 2020.
- [13] R. Ibañez, Pierre Gilormini, E. Cueto, and F. Chinesta. Numerical experiments on unsupervised manifold learning applied to mechanical modeling of materials and structures. *Comptes Rendus. Mécanique*, 348(10-11) :937–958, 2021.
- [14] Daniele Versino, Alberto Tonda, and Curt A. Bronkhorst. Data driven modeling of plastic deformation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 318 :981–1004, 2017.
- [15] R. Ibañez, E. Abisset-Chavanne, J. V. Aguado, D. Gonzalez, E. Cueto, and F. Chinesta. A Manifold Learning Approach to Data-Driven Computational Elasticity and Inelasticity. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 25(1) :47–57, 2018.
- [16] E. Lopez, D. Gonzalez, J. V. Aguado, E. Abisset-Chavanne, E. Cueto, C. Binetruy, and F. Chinesta. A Manifold Learning Approach for Integrated Computational Materials Engineering. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 25(1) :59–68, 2018.
- [17] Mengwu Guo and Jan S. Hesthaven. Data-driven reduced order modeling for time-dependent problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 345 :75–99, 2019.

- [18] Daniel Z. Huang, Kailai Xu, Charbel Farhat, and Eric Darve. Learning constitutive relations from indirect observations using deep neural networks. *Journal of Computational Physics*, 416, 2020.
- [19] Zeliang Liu, M. A. Bessa, and Wing Kam Liu. Self-consistent clustering analysis : An efficient multi-scale scheme for inelastic heterogeneous materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 306 :319–341, 2016.
- [20] Florent Pled, Christophe Desceliers, and Tianyu Zhang. A robust solution of a statistical inverse problem in multiscale computational mechanics using an artificial neural network. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 373, 2021.
- [21] W Sha and K L Edwards. The use of artificial neural networks in materials science based research. *Materials and Design*, 28(6) :1747–1752, 2007.
- [22] Ghaboussi J., Garrett J H., and Wu X. Knowledge-Based Modeling of Material Behavior with Neural Networks. *Journal of Engineering Mechanics*, 117(1) :132–153, jan 1991.
- [23] P. Ladevèze. The large time increment method for the analyse of structures with nonlinear constitutive relation described by internal variables. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences*, 309 :1095–1099, 1989.
- [24] P. Ladevèze. *Nonlinear computational structural mechanics : new approaches and non-incremental methods of calculation*. Springer New York, 1999.