

# Modélisation des composites viscoélastiques par les approches de type ARX

Julien Boisse, Camille Noûs, Stéphane André

# ► To cite this version:

Julien Boisse, Camille Noûs, Stéphane André. Modélisation des composites viscoélastiques par les approches de type ARX. JNC23: Journées Nationales sur les Composites 2023, AMAC, UFC, Supmicrotech-ENSMM, CNRS, Jul 2023, Besançon, France. hal-04606803

# HAL Id: hal-04606803 https://hal.science/hal-04606803v1

Submitted on 10 Jun2024

**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.

# Modélisation des composites viscoélastiques par les approches de type ARX

# The modeling of viscoelastic composite media with ARX approaches

#### Julien Boisse<sup>1</sup>, Camille Noûs<sup>2</sup>, Stéphane André<sup>1,2</sup>

1 : Laboratoire Energies & Mécanique Théorique et Appliquée Université de Lorraine, CNRS, LEMTA, F-54000 Nancy, France e-mail : julien.boisse@univ-lorraine.fr, stephane.andre@univ-lorraine.fr

> 2 : Cogitamus Laboratory, F- 75005 Paris e-mail : <u>camille.nous@cogitamus.fr</u>

#### Résumé

La viscoélasticité linéaire est un phénomène physique qui permet de concevoir le matériau dans son aspect rhéologique comme un système linéaire invariant dans le temps (LTI). Dans le domaine de la théorie du contrôle ou automatique, les modèles dits ARX (pour AutoRegressive with eXogeneous input) ont montré une formidable propension à capturer la dynamique de ces systèmes et ainsi à permettre des opérations de contrôle optimal temps réel. Ces modèles sont très simples, consistant à coupler la réponse d'un système à un instant donné aux valeurs de réponses et d'excitations de quelques instants antérieurs. Cela en fait des substituts de modèles très rapides sur le plan calculatoire, parfaitement adaptés au calcul incrémental. Cette communication montre qu'en effet, dans le cadre de modélisations mécaniques de matériaux composites avec des phases viscoélastiques, ils peuvent se substituer efficacement à des lois de comportement plus complexes (dont l'expression dans le domaine temporel n'existe pas par exemple, si elles sont obtenues directement dans l'espace transformé de Laplace conformément à l'usage du principe d'équivalence) dans des codes de calcul numérique standard. Nous présentons ici une première application de ces modèles dans le cadre de la viscoélasticité hétérogène.

#### Abstract

Linear viscoelasticity is a physical phenomenon that fits with the rheological behavior of a material being a LTI system (Linear Time Invariant). In the field of control theory or automation, ARX (AutoRegressive with eXogeneous input) models have shown a great inclination to capture the dynamics of these systems, thus allowing an optimal control of processes in real time. These models are very simple, consisting in coupling the response of the system at a given time, to the measured values of the response and excitation at previous times. This makes them computationally very fast model substitutes, perfectly suited for incremental computing. This communication shows that in the context of mechanical modeling of composite materials with viscoelastic phases, they can effectively replace more complex behavior laws (whose expression in the time domain does not exist, for example, if they are obtained directly in the Laplace transformed space in accordance with the use of the equivalence principle) in standards codes of numerical computing. We present here a first application of these models in the framework of heterogeneous viscoelasticity.

Mots Clés : Transformées de Laplace, modèles ARX, algorithmes itératifs, Viscoélasticité, Noyaux de relaxation de forme fractionnaire.

Keywords : Laplace transform, ARX models, Iterative algorithm, Viscoelasticity, Fractional relaxation kernels.

#### 1. Introduction

La description d'un comportement de type viscoélastique par un modèle rhéologique reliant fonctionnellement les variables contrainte-déformation fait l'objet d'une grande diversité d'approches, qu'elles soient rhéo-physiques (basées sur des modélisations de phénomènes dynamiques s'exerçant à l'échelle de la microstructure et possiblement révélés par des dispositifs d'observation ad hoc), mathématiques (basées sur le principe d'invariance dans le temps exprimé par le principe de superposition de Boltzman), physiques (basées sur la description de phénomènes de relaxation présentant certains caractères d'universalité) ou thermodynamiques (basées sur des fonctions d'état et des modélisations propres à la cinétique de variables dites internes)... Dans tous les cas, elles se formalisent mathématiquement par une fonction de transfert, reliant mathématiquement variables d'excitation et de réponse dans l'espace de Laplace (ou Laplace-Carson pour des raisons non développées ici mais qui n'apportent rien de plus au discours) et cet angle d'attaque pourrait tout aussi bien être abordé d'emblée pour des modélisations directes de ces fonctions de transfert à l'image des approches "système" pratiquées dans le domaine du contrôle optimal. Ce point d'entrée de la modélisation implique deux choses à nos yeux : d'une part, il pourrait prétendre s'appuyer sur une composante expérimentale fournie par les dispositifs d'analyse dynamique (DMA) puisque à priori capables de sonder les phénomènes de relaxation du matériau sur l'ensemble de son spectre en fréquence (tout comme les expérimentations de relaxation diélectrique par exemple). D'autre part, il peut conduire à l'impossibilité d'exprimer une loi de comportement dans l'espace temporel (pas de transformée inverse existante) et imposerait alors de faire fonctionner les codes de calculs numériques en incluant une transformée de Laplace inverse s'appliquant à chaque pas de temps (calcul incrémental). Ce "souci" a pu conduire à faire usage de la méthode de collocation [1] pour contourner le problème. Basé sur les travaux issus de la recherche en automatique, nous montrons ici que les modèles ARX peuvent constituer une alternative qui se révèle précise et efficace pour contourner ce même problème. Nous tenterons de donner quelques clés de compréhension de l'origine de ces modèles, pour montrer leur propension à décrire divers comportements viscoélastiques, et finalement donner une application académique pour un calcul sur une structure hétérogène viscoélastique 3D mettant en évidence les gains en temps de calcul (à précision égale).

#### 2. De la description de la viscoélasticité par des modèles ARX

Dans la perspective d'une description mathématique par fonction de transfert, on pourrait formuler la loi de comportement comme l'Eq. (1) le suggère

$$\sigma(t) = \mathcal{L}^{-1}\{\overline{H}(p)\overline{\varepsilon}(p)\} = \int_{0}^{t} H(t-\tau)\varepsilon(\tau)d\tau$$
 (Eq. 1)

où  $\varepsilon(t)$  correspond au trajet de déformation imposé et  $\overline{H}(p)$  décrit le comportement en Laplace ou fonction de transfert (LBTF pour Laplace Behavior or Transfer Function). La loi empirique de Davidson-Cole [2] par exemple reflète exactement notre propos liminaire : elle fut obtenue à partir de mesures de relaxations diélectriques dans l'espace des fréquences. On peut aussi considérer des fonctions de transfert du type de l'Eq. (2)

$$\mathcal{L}{H(t)} = \overline{H}(p) = \frac{\overline{\sigma}(p)}{\overline{\varepsilon}(p)} = \frac{\sum_{j=0}^{m} \beta_j p^j}{\sum_{i=0}^{n} \alpha_i p^i}$$
(Eq. 2)

résultant d'une description par équation différentielle ordinaire des deux variables d'entrée-sortie (à laquelle conduisent systématiquement les modèles fondés sur l'analogie électrique et l'usage de schémas de type amortisseur-ressort [3]).

La fonction de transfert correspond à la réponse impulsionnelle du système, en vertu de la propriété d'élément neutre joué par la distribution de Dirac dans l'usage que l'on peut faire du théorème de convolution exprimé par l'Eq. (1).

$$\sigma^{\delta}(t) = \int_{0}^{t} H(t-\tau)\delta(\tau)d\tau = H(t)$$
 (Eq. 3)

La réponse à une excitation de type échelon  $\mathcal{H}(t)$  (fonction de Heaviside) renvoie elle à la caractérisation du module de relaxation R(t).

$$\sigma^{\mathcal{H}}(t) = \int_{0}^{t} H(t-\tau)\mathcal{H}(\tau)d\tau = R(t)$$
 (Eq. 4)

Les équations (1),(3) ou (4) appartiennent à une famille de structures mathématiques propre aux systèmes invariants par translation du temps. Dans ce cas, les modèles paramétriques AutoRégressifs à entrées eXogènes (ARX) sont parfaitement adaptés pour représenter ce type de processus convolutifs selon une structure simplement polynomiale (Eq. (5))

$$\sigma_{ARX}(t) = -\sum_{i=1}^{na} a_i \sigma_{ARX}(t-\tau_i) + \sum_{j=1}^{nb} b_j \varepsilon_{id} \left(t-\tau_{j+nk}\right)$$
(Eq. 5)

On a  $\tau_i = i\Delta t$  pour  $i \ge 1$ ,  $\sigma_{ARX}(t) = 0$  pour  $t \le 0$  et  $\varepsilon_{id}(t)$  figurant l'excitation idéale imposée (en déformation) sur le système (VER matériau). Dans le vocabulaire de la commande des systèmes, la contrainte observée est la sortie du système. Les coefficients  $a_i, b_j$  sont les paramètres de Markov. Le modèle ARX est défini dès lors que ces coefficients sont identifiés pour un choix optimal du triplet d'entiers (na, nb, nk) - d'où la notation classique <math>ARX(na, nb, nk) utilisée. Ces modèles et la procédure d'identification suivis ont été décrits par Ljung [4] à l'origine de la Toolbox Matlab 'Systems Identification'. Ils nécessitent une phase d'identification sur une expérience dite de calibration, correspondant à une excitation d'un certain type et une phase de validation pour vérifier l'opérationnalité du modèle identifié pour décrire la réponse à une excitation d'un autre type. Ces modèles ARX peuvent donc être obtenus (et venir se substituer à) des lois de comportement qui peuvent été prescrites directement dans l'espace de Laplace en établissant le jeu d'expériences de calibration/validation par inversion de Laplace numérique (de très bons algorithmes sont disponibles à cet effet, en particulier l'algorithme de De Hoog et al. [5]). La méthodologie complète est décrite dans un article en preprint [6] accompagné d'un accès aux sources sous forme de document exécutable en format LiveScript (Matlab).

#### 3. Exemple de modèle ARX substitué à une loi de comportement fractionnaire

Parmi les nombreux modèles de viscoélasticité disponibles avec une structure mathématique basée sur des opérateurs de diff-intégration non entiers, nous retenons ici celui proposé par Rabotnov et Scott-Blair [7] correspondant à une fonction de transfert en Laplace définie par

$$\overline{H}(\mathbf{p}) = \frac{\overline{\sigma}(p)}{\overline{\epsilon}(p)} = E^{u} + (E^{r} - E^{u})\mathcal{L}[\exists_{\alpha}^{*} (\beta, t)]$$

$$= E^{u} + (E^{r} - E^{u})\frac{1}{p^{1-\alpha} + \beta}$$
(Eq. 6)

où *α* est un coefficient non entier (généralement  $0 < \alpha < 1$  et *β* l'inverse d'un temps de relaxation caractéristique. Cette LBTF correspond à un noyau de relaxation dont l'expression formelle est connue dans l'espace temporel et fait intervenir la fonction de Mittag-Leffler à 2 paramètres  $E_{\alpha+1,\alpha+1}$  avec  $\Gamma$ , fonction Gamma.

$$\exists_{\alpha}^{*} (\beta, t) = E_{\alpha+1,\alpha+1}(\beta t^{\alpha+1}) = t^{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta t^{1+\alpha})^{n}}{\Gamma[(n+1)(1+\alpha)]}$$
(Eq. 7)

Dans la figure 1 nous comparons la calibration de deux modèles *ARX* à une expérience numérique de référence correspondant à la réponse, calculée de manière 'exacte', à une excitation de type 'Créneau'. La qualité de l'ajustement s'apprécie classiquement selon  $e_{fit} = 100 \left(1 - ||y - y_{ref}||_2/||y - \bar{y}||_2\right)$ . La simulation correspond aux valeurs de  $E^u = 1000 MPa$  (module instantané),  $E^r = 100 MPa$  (module relaxé),  $\beta = 1 s^{-1}$  et une valeur  $\alpha = 0.4$ . On peut vérifier que le modèle ARX(2,5,0) offre une bien meilleure adéquation ( $e_{fit} = 97.16\%$ ) que le modèle ARX(130) ( $e_{fit} = 90.2\%$ ) en raison de la prise en compte de plus d'information antérieure. Dans la figure 2, nous vérifions cette fois l'aptitude relative de ces modèles à prédire la réponse obtenue pour une toute autre excitation (ici une séquence de 3 rampes, suivie d'un palier en déformation). Il est intéressant de remarquer que l'information capturée par ARX(130) est de même nature que celle issue du modèle ARX(250), voire même meilleure dans ce cas ! Les deux modèles présentent une aptitude évidente à prédire la réponse avec une adéquation globale  $e_{fit}$  proche de 100% (cf Tab.1).



Fig. 1 : Modèles ARX identifiés sur une expérience numérique (modèle exact de l'Eq. X) pour une excitation de type créneau.



Fig. 2 : Comparaison des réponses de ces modèles ARX pour une expérience de validation basée sur la réponse en contrainte à une excitation de type 3 rampes suivie d'un palier.

Le Tab.1 présente les données issues de ces calculs pour un pas de temps  $\Delta t = 0.01s$  en termes de temps CPU, erreur RMS (en MPa) sur la réponse comparée au calcul de référence (Step-LBTF) et d'erreur de fit (définie précédemment). Dans la perspective d'une application de modèles ARX dans un code numérique (EF ou à solver FFT) avec schéma incrémental en temps pour résoudre des problèmes 3D hétérogènes, le gain de temps obtenu par les modèles ARX est un premier avantage. Le second est que les modèles basés sur les inversions de Laplace numérique sont dans les deux cas (et pour différentes raisons) impraticables dès lors qu'il s'agira de les appliquer à un nombre de nœuds ou voxels très importants (voir les explications en section 4, Tab.2). Les calculs homogènes correspondent de fait à un calcul sur un voxel ou un nœud.

Modèle	$\Delta t(s)$	CPU time (s)	<i>e<sub>RMS</sub></i> (MPa)	<i>e<sub>fit</sub></i> (%)
Full-LBTF (DeHoog)	0.01	0.073	1.42	99.998
Step-LBTF (incremental)	0.01	0.0097		
Step-ARX(1,3,0)	0.01	0.0048	10.26	99.8
Step-ARX(2,5,0)	0.01	0.009	11.2	99.76

Tab.1: Comparaison des performances des modèles ARX en référence aux calculs exacts (full-LBTF = algorithme d'inversion de Laplace pratiquée sur le vecteur temps global, Step-LBTF = algorithme fondé sur une inversion de Laplace numérique intégrée dans un schéma incrémental [8])

Il convient par contre de mentionner que les paramètres du modèle ARX ne sont valables que pour ce jeu de paramètres de la loi originelle et pour le même pas de temps que celui retenu pour les expériences de calibration/expérimentation. Ceci peut constituer un obstacle à l'utilisation de pas de

temps variables par exemple. Evidemment l'approche par modèle ARX pratiquée ici sur un modèle VE particulier peut être opérée sur toute autre approche de modélisation comme nous allons le voir dans l'application faite ci-dessous à un calcul composite.

# 4. Application au cas d'une structure VE hétérogène

Evidemment un modèle ARX représenté par l'Eq. (5) conduit de facto à une écriture incrémentale, directement opérationnelle pour s'intégrer à un code de calcul numérique (routine UMAT pour le code EF Abaqus ou pour le <u>code FFT AMITEX</u> développé par L. Gélébart au CEA). Nous montrons ici un exemple d'application de modèle ARX à un calcul sur une structure hétérogène composée de 30% de sphères élastiques avec une distribution de taille fixée et une matrice viscoélastique.



Fig. 3. Microstructure utilisée pour une simulation par un code FFT (AMITEX)

Les paramètres 'modèle' de la matrice sont  $E^u = 1000 MPa$ ,  $E^r = 100 MPa$ ,  $\tau^{max} = 1 s$ , et le modèle de comportement retenu pour les expériences numériques est cette fois l'approche DLR ([\*]) avec un spectre de relaxation borné par  $\tau^{max}$  et composé de 50 modes équi-distribués logarithmiquement sur 6 décades. Ce modèle correspond, dans sa structure, à un modèle de collocation et il est intéressant de l'examiner à ce titre. Il permet l'identification d'un modèle ARX(130) de la phase viscoélastique. La sollicitation imposée au VER est de type cisaillement. Le Tab.2 et la Fig.4 ci-dessous permettent de juger des performances obtenues pour le calcul hétérogène, en considérant différentes résolutions spatiales de microstructure (voxels<sup>3</sup>) pour 1000 pas de temps (dt = 0.01). Le calcul mené avec l'approche DLR est implémenté numériquement selon l'algorithme semi-analytique [8]. Nous donnons en comparaison et lorsque cela reste possible, le calcul mené avec l'approche incrémentale (Step-LBTF) basée sur transformée de Laplace inverse de la loi de comportement DLR.

Si le temps de calcul devient déraisonnable pour l'approche DLR à 50 modes (méthode de collocation à 50 temps de relaxation) alors que l'algorithme incrémental (semi-analytique - sa) découle d'une solution formelle exacte, de même que pour l'approche incrémentale basée sur la transformée de Laplace inverse d'une réponse unitaire (Step-LBTF), il reste praticable avec un modèle ARX (4 heures pour une simulation à 256<sup>3</sup> et sur 24 processeurs).

Concernant la précision des calculs, la Fig.4 donne les résultats de simulation obtenus pour une excitation correspondant à une rampe suivie d'un palier. L'effet de précision accrue liée à l'accroissement de la résolution est clair. Il révèle l'aptitude des modèles ARX à garantir l'obtention d'une solution précise en toute circonstance et dans des temps records, lorsque les autres approches finissent par buter sur une résolution trop élevée.

Approche	Résolution (Voxels)	machine (nb. proc.)	time – s (h)
arx130		apollo (24)	23.31 (0.0065)
Step-LBTF	32x32x32	apollo (24)	1015 (0.28)
Exact (sa)		apollo (24)	222.3 (0.061)
arx130		apollo (24)	1421 (0.39)
Step-LBTF(*)	128x128x128	apollo (24)	~62000* (~17*)
Exact (sa)		apollo (24)	13273 (3.7)
arx130		apollo (24)	13678 (3.8)
Step-LBTF(*)	256x256x256	apollo (24)	(~165h* = ~6-7j)
Exact (sa)		apollo (24)	122567 (34)

Tab.2 : temps CPU fonction de la résolution spatiale de la microstructure 3D de la Fig.3 selon les différentes approches "Loi de comportement" adoptées dans le code de calcul AMITEX. (\*) temps estimés par extrapolation. (Machine apollo : Intel Xeon Gold 5118 CPU @ 2.30 GHz x2 x12, 128 Go de RAM, Ubuntu LTS 22.04)



Fig.4 : Réponse en contrainte à une excitation de cisaillement de type rampe+palier. Comparaison des solutions numériques exacte (DLR-sa), basée sur inversion de Laplace (Step-LBTF), et par modèle ARX (arx130). La réponse basée sur inversion de Laplace (Step-LBTF) pour la résolution 128<sup>3</sup> a été effectuée sur 750 pas de temps uniquement (temps de calcul d'environ 10h) en raison de la limite de mémoire vive disponible sur la machine apollo.

### 5. Conclusion.

Nous montrons essentiellement ici l'apport qui pourrait être attendu de l'implantation de modèles ARX en lieu et place des modèles physiques retenus pour le comportement viscoélastique, dans des schémas temporels de codes de calcul numériques. L'intérêt majeur est qu'ils offrent un excellent rapport qualité-temps de calcul et ne nécessitent la mise en mémoire des variables explicatives (composantes du tenseur des contraintes/déformations) que pour un faible nombre de pas de temps précédents celui du calcul en cours.

# Références

- [1] R. A. Schapery, « Approximation methods of transform inversion for viscoelastic stress analysis », *Proc Fourth* USNat Congr Appl Mech, 1962, vol. 2, p. 1075, 1962.
- [2] D. W. Davidson et R. H. Cole, « Dielectric Relaxation in Glycerol, Propylene Glycol, and *n* -Propanol », *The Journal of Chemical Physics*, vol. 19, nº 12, p. 1484-1490, déc. 1951, doi: 10.1063/1.1748105.
- [3] N. W. Tschoegl, *The Phenomenological Theory of Linear Viscoelastic Behavior*. Berlin, Heidelberg: Springer, 1989. doi: 10.1007/978-3-642-73602-5.
- [4] L. Ljung, « System Identification », in Signal Analysis and Prediction, A. Procházka, J. Uhlíř, P. W. J. Rayner, et N. G. Kingsbury, Éd., in Applied and Numerical Harmonic Analysis. Boston, MA: Birkhäuser, 1998, p. 163-173. doi: 10.1007/978-1-4612-1768-8\_11.
- [5] F. R. de Hoog, J. H. Knight, et A. N. Stokes, «An Improved Method for Numerical Inversion of Laplace Transforms », SIAM J. Sci. and Stat. Comput., vol. 3, nº 3, p. 357-366, sept. 1982, doi: 10.1137/0903022.
- [6] S. André et C. Noûs, « Solving viscoelastic problems in a step-inverse Laplace transform approach supplanted with ARX models: a way to upgrade Finite Element or spectral codes ». 9 novembre 2022. Consulté le: 5 mai 2023. [En ligne]. Disponible sur: https://hal.univ-lorraine.fr/hal-03845394
- [7] I. Sevostianov, V. Levin, et E. Radi, « Effective properties of linear viscoelastic microcracked materials: Application of Maxwell homogenization scheme », *Mechanics of Materials*, vol. 84, p. 28-43, mai 2015, doi: 10.1016/j.mechmat.2015.01.004.
- [8] J. Sorvari et J. Hämäläinen, « Time integration in linear viscoelasticity—a comparative study », Mech Time-Depend Mater, vol. 14, nº 3, p. 307-328, août 2010, doi: 10.1007/s11043-010-9108-7.