



N° d'ordre NNT : 2023ISAL0001

**THESE de DOCTORAT DE L'INSA LYON,
membre de l'Université de Lyon**

Ecole Doctorale N° 162

Mécanique, Energétique, Génie Civil, Acoustique

Spécialité/ discipline de doctorat :

Génie Mécanique

Soutenue publiquement le 10/01/2023, par :

Duc Khai Nguyen PHAM

**Mécanique computationnelle pilotée par
des données
Extension pour l'élasto-plasticité et
application thermomécanique**

Devant le jury composé de :

David NERON	Professeur des Universités	ENS Paris Saclay	Examineur
Laurent STAINIER	Professeur des Universités	Centrale Nantes	Rapporteur
David RYCKELYNCK	Professeur des Universités	MINES ParisTech	Rapporteur
Delphine BRANCHERIE	Professeure des Universités	UTC Compiègne	Examinatrice
Josselin DELMAS	Ingénieur - Docteur	EDF R&D	Invité
Vincent ROBIN	Ingénieur - Docteur	EDF DT	Invité
Alexandre BROSE	Ingénieur - Docteur	Framatome	Invité
Anthony GRAVOUIL	Professeur des Universités	INSA Lyon	Directeur de thèse
Nawfal BLAL	Maitre de Conférences HDR	INSA Lyon	Co-directeur de thèse

Département FEDORA – INSA Lyon - Ecoles Doctorales

SIGLE	ECOLE DOCTORALE	NOM ET COORDONNEES DU RESPONSABLE
CHIMIE	CHIMIE DE LYON https://www.edchimie-lyon.fr Sec. : Renée EL MELHEM Bât. Blaise PASCAL, 3e étage secretariat@edchimie-lyon.fr	M. Stéphane DANIELE C2P2-CPE LYON-UMR 5265 Bâtiment F308, BP 2077 43 Boulevard du 11 novembre 1918 69616 Villeurbanne directeur@edchimie-lyon.fr
E.E.A.	ÉLECTRONIQUE, ÉLECTROTECHNIQUE, AUTOMATIQUE https://edeea.universite-lyon.fr Sec. : Stéphanie CAUVIN Bâtiment Direction INSA Lyon Tél : 04.72.43.71.70 secretariat.edeea@insa-lyon.fr	M. Philippe DELACHARTRE INSA LYON Laboratoire CREATIS Bâtiment Blaise Pascal, 7 avenue Jean Capelle 69621 Villeurbanne CEDEX Tél : 04.72.43.88.63 philippe.delachartre@insa-lyon.fr
E2M2	ÉVOLUTION, ÉCOSYSTÈME, MICROBIOLOGIE, MODÉLISATION http://e2m2.universite-lyon.fr Sec. : Bénédicte LANZA Bât. Atrium, UCB Lyon 1 Tél : 04.72.44.83.62 secretariat.e2m2@univ-lyon1.fr	Mme Sandrine CHARLES Université Claude Bernard Lyon 1 UFR Biosciences Bâtiment Mendel 43, boulevard du 11 Novembre 1918 69622 Villeurbanne CEDEX sandrine.charles@univ-lyon1.fr
EDISS	INTERDISCIPLINAIRE SCIENCES-SANTÉ http://ediss.universite-lyon.fr Sec. : Bénédicte LANZA Bât. Atrium, UCB Lyon 1 Tél : 04.72.44.83.62 secretariat.ediss@univ-lyon1.fr	Mme Sylvie RICARD-BLUM Institut de Chimie et Biochimie Moléculaires et Supramoléculaires (ICBMS) - UMR 5246 CNRS - Université Lyon 1 Bâtiment Raulin - 2ème étage Nord 43 Boulevard du 11 novembre 1918 69622 Villeurbanne Cedex Tél : +33(0)4 72 44 82 32 sylvie.ricard-blum@univ-lyon1.fr
INFOMATHS	INFORMATIQUE ET MATHÉMATIQUES http://edinfomaths.universite-lyon.fr Sec. : Renée EL MELHEM Bât. Blaise PASCAL, 3e étage Tél : 04.72.43.80.46 infomaths@univ-lyon1.fr	M. Hamamache KHEDDOUCI Université Claude Bernard Lyon 1 Bât. Nautibus 43, Boulevard du 11 novembre 1918 69 622 Villeurbanne Cedex France Tél : 04.72.44.83.69 hamamache.kheddouci@univ-lyon1.fr
Matériaux	MATÉRIAUX DE LYON http://ed34.universite-lyon.fr Sec. : Yann DE ORDENANA Tél : 04.72.18.62.44 yann.de-ordenana@ec-lyon.fr	M. Stéphane BENAYOUN Ecole Centrale de Lyon Laboratoire LTDS 36 avenue Guy de Collongue 69134 Ecully CEDEX Tél : 04.72.18.64.37 stephane.benayoun@ec-lyon.fr
MEGA	MÉCANIQUE, ÉNERGÉTIQUE, GÉNIE CIVIL, ACOUSTIQUE http://edmega.universite-lyon.fr Sec. : Stéphanie CAUVIN Tél : 04.72.43.71.70 Bâtiment Direction INSA Lyon mega@insa-lyon.fr	M. Jocelyn BONJOUR INSA Lyon Laboratoire CETHIL Bâtiment Sadi-Carnot 9, rue de la Physique 69621 Villeurbanne CEDEX jocelyn.bonjour@insa-lyon.fr
ScSo	ScSo* https://edsciencessociales.universite-lyon.fr Sec. : Mélina FAVETON INSA : J.Y. TOUSSAINT Tél : 04.78.69.77.79 melina.faveton@univ-lyon2.fr	M. Bruno MILLY Université Lumière Lyon 2 86 Rue Pasteur 69365 Lyon CEDEX 07 bruno.milly@univ-lyon2.fr

*ScSo : Histoire, Géographie, Aménagement, Urbanisme, Archéologie, Science politique, Sociologie, Anthropologie

Abstract

The simulation of thermomechanical processes such as welding requires a detailed description of the material's behavior in order to take into account various multi-physical phenomena. Due to the multiparametric aspect of the chosen law, the identification and calibration of the parameters become difficult under certain extreme conditions where the assumptions are no longer valid.

Today, experimental techniques of full field measurement and multi-scale computational strategies allow access to an unprecedented large amount of data on material response. Modeling material behavior is becoming a bottleneck in the data flow. Instead, Kirchdoefer and Ortiz proposed a new approach, called Data Driven Computational Mechanics [KIR 16], to incorporate material behavior data into predictive simulation. The material response is represented only by discrete data in the form of tensor strain-stress pairs. The standard boundary problem is reformulated as a distance minimization between the physically admissible states of the solid body and the database. In this thesis, we explore this approach in order to develop a first proof of concept for welding simulation applications. First, we represent the original ideas of Kirchdoefer and Ortiz in a variational framework to facilitate understanding and implementation in standard finite element software. Secondly, we propose an extension for elasto-plasticity whose material response contains irreversible phenomena by exploiting the tangent space of the hidden constitutive manifold and the transition rules in the form of threshold laws. Finally, a new approach to govern the transition of databases, derived from the Thermodynamics of Irreversible Processes (TIP) is presented. The verification is carried out by academic test cases and a benchmark that simulates a thermomechanical test of Satoh type.

KEYWORDS Data Driven, Elasto-Plasticity, Thermomechanic, Tangent Space, TIP

Résumé

La simulation des procédés thermomécaniques tels que le soudage demande une description fine des comportements du matériau afin de prendre en compte divers phénomènes multi-physiques. Vu l'aspect multiparamétrique de la loi retenue, l'identification et la calibration des paramètres deviennent difficiles dans certaines conditions extrêmes où les hypothèses ne sont plus valables.

Aujourd'hui, les techniques de mesure de champ complet et les stratégies de calcul multi-échelle permettent d'accéder à une large quantité sans précédent de données sur la réponse matérielle. La modélisation des comportements de matériau devient un goulot d'étranglement dans le flux des données. Au contraire, Kirchdoefer et Ortiz ont proposé une nouvelle approche, dénommée Data Driven Computational Mechanics [KIR 16], permettant d'incorporer les données du comportement du matériau dans la simulation prédictive. La réponse matérielle est représentée seulement par des données discrètes sous forme des couples tensoriels de déformation - contrainte. Le problème aux limites standard est reformulé en tant qu'une minimisation de distance entre les états physiquement admissibles du corps solide et la base de données. Dans cette thèse, nous explorons cette approche dans l'optique de développer une première preuve de concept visant des applications de la simulation du soudage. Premièrement, nous représentons les idées originales de Kirchdoefer et Ortiz dans un cadre variationnel pour faciliter la compréhension et l'implémentation dans les logiciels de calcul par éléments finis standards. Deuxièmement, nous proposons une extension pour l'élasto-plasticité dont la réponse matérielle contient des phénomènes irréversibles en exploitant l'espace tangent de la variété constitutive cachée et les lois de transition sous forme des lois à seuil. Finalement, une nouvelle approche pour gouverner la transition des bases de données, dérivée de la Thermodynamique des Processus Irréversibles (TPI) est présentée. La vérification se réalise par des cas tests académiques et un benchmark qui simule un essai thermomécanique de type Satoh.

MOTS CLÉS: Data Driven, Elasto-Plasticité, Thermomécanique, Espace tangent, TPI

Table des matières

Table des matières	i
Table des figures	iii
Introduction	1
1 Etat de l'art sur les approches pilotées par les données pour la mécanique	5
1.1 La science pilotée par les données	6
1.2 Approches pilotées par les données pour la mécanique	6
1.3 Classification des approches	7
1.3.1 Approches avec modèle	7
1.3.2 Approches sans modèle	8
1.4 Bilan et orientation du travail	9
2 Mécanique computationnelle pilotée par les données pour l'élasticité	11
2.1 Structure d'un problème aux limites standard	13
2.2 Définition du problème Data Driven	14
2.2.1 Idée générale	14
2.2.2 Espace de phase et sa métrique. Variété des états physiquement admissibles et variété comportementale	15
2.2.3 Énoncé du problème Data Driven	16
2.3 Méthode de résolution	17
2.3.1 Minimisation de distance par projection alternée	17
2.3.2 Projection sur la variété des états physiquement admissibles. Problème variationnel continu	17
2.3.3 Projection sur la variété des états matériellement admissibles. Problème du voisin le plus proche	21
2.4 Critère de saturation	30
2.5 Résultats	30
2.5.1 Description du cas test	30
2.5.2 Comparaison calcul DDCM versus calcul standard	31
2.5.3 Influence du choix du tenseur artificiel sur la précision et la conver- gence	33

2.6	Conclusions et Perspectives	36
2.6.1	Palier le problème des minima locaux ou des données bruitées	36
2.6.2	Construction de la base de données. <i>Data Driven Identification</i>	37
2.6.3	Extension pour d'autres types de comportement	38
2.6.4	Paramétrisation des paramètres artificiels	38
2.7	Bilan et Orientation du travail	39
3	Mécanique computationnelle pilotée par les données pour l'élasto-plasticité	41
3.1	Formulation quasi-statique du problème DDCM	43
3.2	Espace tangent et opérateur tangent	43
3.3	Formulation variationnelle	44
3.4	Règles de transition pour des comportements à seuil	47
3.4.1	Classification de la base de données pour le comportement élasto-plastique	48
3.4.2	Règle de transition de comportement basée sur des lois à seuil	48
3.4.3	Schéma de prédiction-correction	49
3.5	Convergence de l'algorithme de minimisation	52
3.6	Algorithme DDCM pour l'élasto-plasticité	53
3.7	Cas test	57
3.7.1	Génération des données synthétiques	57
3.7.2	Résultats et discussions	60
3.8	Conclusions	69
4	Application à un modèle thermomécanique	71
4.1	Rappels sur la thermodynamique des milieux continus	73
4.1.1	Premier principe de la thermodynamique	73
4.1.2	Second principe de la thermodynamique	74
4.2	Nouvelle règle de transition basée sur la dissipation intrinsèque	75
4.3	Cas test	76
4.3.1	Principe et Modélisation de l'essai à dilatométrie bloquée	76
4.3.2	Calcul DDCM	78
4.3.3	Résultat	79
4.4	Conclusions	81
	Bilan et perspectives	85
	Annexe - Aspect pratique d'implémentation du solveur DDCM	89
	Bibliographie	93

Table des figures

2.1	Résultat de la méthode K-means sur une base de données 50^3 points avec 10 clusters	26
2.2	Méthode elbow appliquée sur la base de données 50^3 points en exemple	27
2.3	Exemple de k-d tree (Bahmani et WaiChingSun, 2021 [BAH 21])	28
2.4	Configuration géométrique du cas test	31
2.5	Carte d'erreur sur les champs de déformation et contrainte en fonction des données	32
2.6	Convergence du résultat DDCM lorsque la densité des données augmente	33
2.7	Nombre d'itérations effectuées en fonction de γ	35
2.8	Erreur relative en fonction de γ	35
3.1	Illustration de la variété constitutive \mathcal{M} . L'espace tangent \mathcal{T} est une approximation du premier ordre de la variété au tour d'un point local \mathbf{z}_j^*	44
3.2	Aucune transition du comportement matériel n'a été détectée.	50
3.3	La prédiction DDCM est en dehors de la surface de charge, ce qui est généralement un état non admissible.	51
3.4	Le résultat de la prédiction DDCM va de la surface de charge vers l'intérieur. La prédiction n'est pas acceptée et le solveur DDCM sera appelé à nouveau.	52
3.5	Procédure DDCM avec l'opérateur tangent pour un incrément de chargement	54
3.6	Configuration géométrique et trajet de chargement	57
3.7	Trajet de chargement pour le test virtuel	58
3.8	Distribution des états matériels dans l'espace de phase après l'enrichissement de données	59
3.9	Evolution des indicateurs d'erreur dans le temps. Les résultats sont obtenus avec la base de données brute et celles augmentées pour différentes valeurs de N_s	60
3.10	Champ de déplacement à fin de la relaxation. Les valeurs de déplacements sont multipliées par 100 pour visualisation	61
3.11	Champ de déplacement au chargement max	61
3.12	Courbe de contrainte-déformation équivalente dans la zone de concentration de contrainte	62
3.13	Convergence de la solution DDCM vers la loi de comportement cachée	62

3.14	Comparaison des erreurs en contrainte et déformation, à $t_n = 22$ pour solution Data Driven avec la base sans augmentation	63
3.15	Distribution des données sans augmentation, zone élastique	64
3.16	Distribution des données sans augmentation, zone plastique	64
3.17	Comparaison des erreurs en contrainte et déformation, à $t_n = 22$ pour la solution Data Driven avec la base augmentée $N_s = 100$	65
3.18	Distribution des données plastiques au début de pas de temps	66
3.19	Distribution des données plastiques à la fin de la procédure	66
3.20	Variation du critère de convergence. Un taux de convergence linéaire a été observé	66
3.21	Courbe d'écrouissage donnée par la loi (3.29).	67
3.22	Un cycle de chargement complet	67
3.23	Contrainte résiduelle à la fin du cycle	68
3.24	Résultat DDCM avec chargement cyclique	68
4.1	Essai Satoh réalisé avec le système GLEEBLE à l'INSA de Lyon. Source : www.mecanium.fr	76
4.2	Configuration de l'essai Satoh	77
4.3	Évolution de la contrainte uniaxiale - température. Écrouissage isotrope	79
4.4	Évolution de la contrainte uniaxiale - température. Écrouissage cinématique	79
4.5	Comparaison de dissipation et taux d'énergie libre - Écrouissage isotrope	80
4.6	Comparaison de dissipation et taux d'énergie libre - Écrouissage cinématique	80
4.7	Bilan énergétique - Écrouissage isotrope	81
4.8	Bilan énergétique - Écrouissage cinématique	81
4.9	Evolution de contrainte - température dans l'essai Satoh sur l'acier 316L. Photo extraite de la thèse de Depradeux [DEP 04]	82
4.10	Classification des données par la comparaison de l'opérateur tangent	89
4.11	Matrice de transformation euclidienne	90
4.12	Sauvegarde des données sous format binaire	91
4.13	Création de la cartographie des données	91
4.14	Création de la structure de recherche k-d tree	92
4.15	Etape de minimisation locale réalisée par la fonction <i>knnsearch</i>	92

Introduction

Ce premier chapitre introduit le contexte et l'objectif industriel de la thèse. Ainsi, une brève introduction de la technique de simulation pilotée par des données et les premières tentatives qui ont inspiré ces travaux sont abordées.

L'étude des procédés de fabrication et de réparation par simulation numérique présente des enjeux capitaux communs entre deux sociétés : Framatome, acteur mondial dans la construction nucléaire et Électricité de France (EDF), premier producteur et premier fournisseur d'électricité en France et en Europe. Dans ce contexte, le laboratoire commun Soudage et Réparation (SnR) entre Framatome, EDF et INSA de Lyon est né avec une équipe de recherche académique pluridisciplinaire dans le réseau académique de l'Université de Lyon (Lyon/Saint-Etienne) : niveau d'excellence scientifique très élevé et reconnu sur la thématique procédés du soudage (programme INZAT, chaire AREVA-SAFRAN sur la fabrication et la durée de vie, Fabrication Additive (consortium IMPRESS 3D), usinage, traitement de surface innovant (billage, cavitation, impulsions électromagnétiques...)). Ce projet permet de répondre à plusieurs enjeux stratégiques

- Evoluer vers de meilleures techniques de fabrication pour un cahier des charges donné : Etendre aux procédés de finition (usinage, surfaçage, mitigation) et à de nouvelles technologies de fabrication, dont la fabrication additive, et aux autres procédés thermomécaniques.
- Disposer de modèles facilement substituables par matériau, procédé ou structure : Construction de méta-modèles / abaques numériques pour le soudage pour permettre un suivi en temps réel couplé à l'instrumentation (capteur et visualisation); Améliorer le contrôle en cours de fabrication pour réduire les risques de défaut et les contrôles post-soudage.
- Soutenir la codification pour l'utilisation de la simulation des procédés qui nécessite de considérer les conséquences de la fabrication sur la durée de vie : Définir les marges pour les dommages associés aux soudures (corrosion, fatigue, rupture); Rendre compte de l'hétérogénéité matériau (CND, résistance mécanique) .

Le soudage, connu comme un procédé d'assemblage des pièces ou de réparation, est omniprésent aujourd'hui dans plusieurs secteurs industriels (le transport, l'énergie, et l'aéronautique, etc). EDF et Framatome sont responsables de la robustesse des installations et la sécurité dans l'opération et la maintenance des parcs nucléaires. Le soudage fait intervenir de nombreux phénomènes multiphysiques qui sont encore difficiles à comprendre et par conséquence, à contrôler les défauts. Le standard élevé dans l'industrie nucléaire demande un contrôle de qualité équivalent des procédés de soudage. La prédiction par simulation numérique des contraintes résiduelles et distorsions induites par ce procédé semble indispensable. Cette thèse est ainsi opérée dans le Laboratoire de Mécanique de Contacts et de Structure (LaMCoS), financée par le laboratoire commun SnR et consacrée à étudier les méthodes numériques avancées pour la simulation de soudage et thermo-mécanique en général.

La difficulté majeure de la simulation de soudage se présente sur la prise en compte des phénomènes multiphysiques, complexes. Généralement, cela nécessite premièrement une modélisation du couplage des phénomènes thermiques, métallurgiques et mécaniques dans la zone affectée thermiquement des structures soudées, et deuxièmement une modélisation de la source de la chaleur ainsi qu'une modélisation du bain de fusion [TRI 08]. Le deuxième aspect porte un rôle primordial dans la détermination de la quan-

tité d'énergie apportée et la prédiction de la forme du bain de fusion. La littérature sur cet aspect arrive aujourd'hui à une grande maturité : [ROG 00, GOL 84, HU 08] pour en citer quelques uns.

D'autre part, nous nous intéressons à la prise en compte du comportement thermomécanique et métallurgique des matériaux. De manière classique elle peut se réaliser par deux méthodes : soit par un calcul multiéchelle avec le passage micro-macro, les lois macroscopiques seront obtenues en connaissant les paramètres et le mécanisme de déformation micro-structurale, ou soit la cadre des matériaux standards généralisés s'inspirant de la thermodynamique des processus irréversibles (TPI). De tout façon, l'identification et la calibration des paramètres avec la référence des données expérimentales issue des essais thermo-mécaniques standardisés (e.g les Task Groups TG4, TG6 du réseau NET réalisés par nos partenaires industriels) du modèle semble difficile et souvent de nature ad-hoc. Cela a été tenté dans le cadre des travaux antérieurs au sein du LaMCoS [LU 17]. Il s'agissait de la construction et l'utilisation d'abaques numériques construits par les simulations haute-fidélité et la réduction de modèle [LU 18a, LU 18b], qui sont capables de fournir des réponses en temps-réel avec une précision contrôlée. Avec les abaques numériques, nous arrivons à identifier différentes quantités d'intérêt dans l'espace multiparamétrique des paramètres matériaux [LU 19]. Ainsi, les abaques construits de cette façon sont **physiquement fondés**. C'est-à-dire la physique des phénomènes est toujours portée par la description des lois de comportement élasto-plastique dans les snapshots, les simulations éléments finis à haute fidélité. Néanmoins, nous arrivons à des difficultés lors de la calibration des paramètres sur une plage de température élevée où les hypothèses d'élaboration de ces lois, qui sont souvent plus ou moins contraignantes, ne sont plus valables.

Récemment, un nouveau paradigme de la mécanique numérique a émergé, intitulé **Data Driven Computational Mechanics**, ou la mécanique computationnelle pilotée par des données. Originellement proposé par Kirchdoefer et Ortiz [KIR 16], il s'agit d'une reformulation complète du problème aux limites standard en utilisant directement des données expérimentales et contourner complètement l'étape de modélisation et élaboration des lois de comportement. L'objectif fondamental de ces travaux de thèse est l'extension et l'application de ce nouveau paradigme pour la simulation thermo-mécanique avec des comportements irréversibles gouvernés par des lois à seuil tel que l'élasto-plasticité couramment utilisée dans la simulation de soudage. Le manuscrit est organisé comme suit :

- Premièrement, nous fournissons un état de l'art sur les techniques de simulation pilotée par des données. Nous allons catégoriser des techniques et nous positionner parmi diverses techniques de traitement et utilisation des données au cours de la simulation mécanique.
- Le second chapitre sera dédié à rappeler les travaux préliminaires de Kirchdoefer et Ortiz sur ce nouveau paradigme de mécanique numérique. Ainsi, nous apportons de nouvelles contributions pour faciliter la compréhension et l'implémentation de la méthode avec un cadre de travail variationnel. Les avantages et les inconvénients seront aussi discutés à travers des exemples, dans un

premier temps, en élasticité, notamment sa dépendance sur la densité des données en entrée et le choix des hyper-paramètres

- Dans le troisième chapitre, nous levons le verrou le plus important de la thèse, qui est l'application pour des comportements irréversibles. Nous nous sommes basés sur une extension de la base de données par des opérateurs tangents locaux et sur les règles de transition de comportement sous forme des lois à seuil. Dans l'optique de construire une preuve de faisabilité, nous prenons des exemples sur des données synthétiques, fabriquées artificiellement par des lois de comportement cachées et une stratégie d'enrichissement de données pour satisfaire la dépendance de données
- Dans le dernier chapitre, nous abordons l'application de la méthode sur une simulation thermomécanique au couplage faible. Une extension de la formulation tangentielle présentée dans le troisième chapitre pour aller plus loin que l'écrouissage isotrope est présentée. L'approche sera testée contre un benchmark modélisant un essai de caractérisation typique dans l'étude du soudage, qui est l'essai à dilatométrie bloquée (essai Satoh).

Enfin, des conclusions et perspectives a ces travaux sont proposées

Chapitre 1

Etat de l'art sur les approches pilotées par les données pour la mécanique

*Nous fournissons un état de l'art sur les techniques de simulation mécanique pilotée par les données. Nous allons catégoriser des techniques et nous positionner parmi diverses techniques de traitement et utilisation des données au cours de la simulation mécanique. La méthode retenue est le nouveau paradigme **Data Driven Computational Mechanics**. Un bilan et orientation du travail est ainsi fourni.*

Sommaire

1.1	La science pilotée par les données	6
1.2	Approches pilotées par les données pour la mécanique	6
1.3	Classification des approches	7
1.3.1	Approches avec modèle	7
1.3.2	Approches sans modèle	8
1.4	Bilan et orientation du travail	9

1.1 La science pilotée par les données

L'augmentation rapide de la puissance de calcul aujourd'hui ouvre de nombreuses perspectives dans les domaines des statistiques et l'apprentissage automatique (*machine learning*) [BIS 06]. Des algorithmes et méthodes d'acquisition et exploitation des données, qui sont développés en conséquence, ont formé l'architecture mathématique de base de l'intelligence artificielle (IA). Bien que les éléments de l'IA aient déjà une trace d'histoire assez longue [LAN 89], les approches pilotées par les données sont accessibles récemment avec la puissance des ordinateurs modernes, le coût en baisse des capteurs et les moyens de stockage des données. En effet, ces grandes quantités de données nous offrent de nouvelles possibilités de découverte guidée par les données, qui, comme nous l'avons mentionné, a été qualifiée de quatrième paradigme de la science [MON 19, HEY 09].

Dans plusieurs applications de la science et l'ingénierie, un ensemble d'équations constitutives, des relations différentielles en espace-temps, des systèmes dynamiques est souvent utilisé pour décrire la physique du système. Le paradigme "Découvert par les données" est construit dans l'optique de découvrir ces relations dans de nombreuses domaines d'application [Ste 19], de la biologie [GAU 16, ANG 16] et science de la vie [MER 16], la surveillance de la santé [KON 01], l'informatique des matériaux [RAM 17] et autres. L'objectif final est toujours l'extraction des physiques significatives à partir des données avec une grande diversité de stratégies. Malgré tout, ces travaux démontrent aussi que l'apprentissage automatique et l'IA peuvent être capable d'apprendre la physique et permettre éventuellement soit d'imposer la physique sur les modèles induits par les données ou soit d'assimiler des données dans le but d'améliorer la compréhension des systèmes où il y a la méconnaissance de la physique [KAI 18].

1.2 Approches pilotées par les données pour la mécanique

Bien que les applications basées sur les données (souvent massives, *big data*) soient largement utilisées dans de nombreux domaines tels que le marketing, la publicité, le diagnostic médical, la finance ou les sciences sociales depuis plus d'une décennie, l'intérêt dans le domaine de la mécanique est assez récent. La raison principale est que, traditionnellement, la mécanique des solides a suivi une approche déterministe dans laquelle, avec relativement peu de données expérimentales disponibles, des prédictions significatives ont été obtenues dans des situations générales et complexes. De plus, les informations sur le comportement d'un matériau ont traditionnellement été diffusées par la donnée des paramètres matériaux associés à un modèle paramétrique spécifique. Cependant, la situation aujourd'hui est changée avec la disponibilité abondante des données pour une diversité de classe de matériaux. Il est donc nécessaire de disposer d'une modélisation non nécessairement structurée et capable d'assimiler ces données, éventuellement obtenues à partir de divers types d'essais ou d'observations dans des conditions différentes. Un

exemple représentatif est la diversité des matériaux biologiques, y compris des matériaux vivants. Cette diversité représente une difficulté dans la caractérisation due à la variation dans des échantillons avec le vieillissement et le temps. Il est souhaitable de trouver des outils de modélisation qui ne sont pas basés seulement sur une fonction ou une structure mathématique spécifique mais peuvent représenter une large catégorie de matériaux similaires de façon conceptuelle mais avec un large spectre des scénarios possibles.

Une autre raison de l'intérêt des approches pilotées par les données est la généralisation du paradigme de l'ingénierie par simulation (*Simulation Based Engineering Service*). Avec la puissance de calcul aujourd'hui, les simulations linéaires ou non linéaires sont réalisées tous les jours non seulement dans le milieu académique mais aussi dans l'industrie. Comme le cas des partenaires industriels du laboratoire commun SnR, qui assurent la conformité et la sécurité du parc nucléaire, un grand intérêt est porté sur la simulation des matériaux complexes, en même temps que ces derniers sont élaborés et optimisés afin d'atteindre des objectifs spécifiques. Pour réduire le temps de calcul et aller vers la simulation en temps réels, des techniques de réduction de modèle sont appliquées et permettent de construire des abaques de solution pré-calculées offline. L'information peut être donc facilement transmise de la R&D vers l'ingénierie et utilisée pour reconstruire des solutions spécifiques à un moment donné [LU 17].

1.3 Classification des approches

Il y a aussi une diversité des approches pilotées par les données pour la mécanique, telles que l'apprentissage de loi de comportement ou loi de substitution [HAS 04, WU 20, LIN 21], modèle de turbulence pour la mécanique des fluides [LIN 16, SCH 21] ou même le remplacement des lois de conservation par celle extraite des données [BRU 16]. Cependant, nous pouvons classer ces approches dans deux catégories, que nous allons présenter ensuite, enfin de se positionner.

1.3.1 Approches avec modèle

Fort est de constater qu'une approche purement pilotée par les données, c'est-à-dire l'utilisation seule des données et des outils de traitement mathématique dans le cadre de la mécanique des solides est plus ou moins inefficace dans une certaine mesure. En effet, un problème aux limites standard de la mécanique se compose de 3 ingrédients : (i) les lois de conservation et les conditions de Neumann, (ii) les compatibilités cinématiques et les conditions de Dirichlet et (iii) la loi de comportement du matériau. D'une part, les deux premières sont universellement valables, ou sans incertitude, car elles reposent sur des principes physiques généraux. D'autre part, les équations constitutives, ou lois matérielles, sont plus discutables. Le point crucial ici est la nécessité des données pour calibrer les modèles. Une application typique de la science des données dans le domaine de la mécanique computationnelle est alors la modélisation de la réponse des matériaux à partir d'une relation mathématique prédictive basée sur des connaissances extraites de

données non structurées.

Généralement, il y a deux directions pour ce genre d'approches. La première consiste à remplacer les modèles constitutifs, physiquement fondés par les modèles d'apprentissage supervisés tels que les réseaux de neurones [GHA 91, WAN 18, WU 20] renforcés par les contraintes physiques. L'une des techniques d'apprentissage automatique les plus populaires et les plus simples est probablement la réduction dimensionnelle [VAN 09, LEE 07], qui consiste à rechercher des structures significatives à faible dimension cachées dans des données à haute dimension. représentées par exemple par des mesures expérimentales à champs complets ou des simulations à l'échelle micro. Une étude comparative sur différentes techniques non-linéaires dans l'analyse multi-échelle est donnée dans [MAT 17].

Au contraire, la deuxième consiste à enrichir les modèles physiquement fondés par les données. Ce cadre général est utilisé pour obtenir des modèles à haute fidélité [IBA 19] où construire des modèles à ordre réduit. Ces derniers peuvent être considérés comme des méta-modèles de la réponse du matériau et de la structure dans un problème donné. Ils sont construits par chercher des échantillonnages et représentation réduits par différentes techniques telles que la Décomposition Propre Orthogonale (*Proper Orthogonal Decomposition*) [HUA 20], l'hyper réduction [RYC 09, RYC 12] ou le Décomposition Propre Généralisée (*Proper Generalized Decomposition*) [GON 17, LU 18b, CHI 13, LU 19].

1.3.2 Approches sans modèle

Dans toutes les méthodes et approches de pilotage par les données mentionnées au-dessus (bien sûr la liste est effectivement non-exhaustive), le point commun est que, quelque soit la technique utilisée, un modèle (que ce soit physiquement ou empiriquement fondé) est encore soit appris sous contrainte, soit postulé et calibré avec des données. En inspirant des arguments donnés par Michael Ortiz pendant la conférence *International Conference on Computational Plasticity COMPLAS* en 2021, les critiques du paradigme *Model Based Computing* sont les suivants :

- **Perte de l'information.** En assumant que les erreurs dans les mesures expérimentales sont négligeables, les données sont des vérités absolues. La modélisation des données consiste en toutes opérations de modification sur les données, telles que l'interpolation, la régression, la réduction... Elles sont susceptibles d'introduire des erreurs de modélisation et des biais à cause des simplifications plus ou moins importantes par rapport à la physique réelle (la méconnaissance épistémologique)
- **Aspect empirique.** La sélection des variables et de la technique associée est souvent basée sur les phénomènes qu'on veut modéliser, de manière *ad hoc*. Il n'y a pas de garantie sur la convergence. Ce terme est à interpréter dans le sens qu'à partir d'un degré de complexité (en terme de nombre de paramètres, nombre de variables, forme analytique...), la modélisation arrive à représenter exactement la physique. Un exemple de cette difficulté est la calibration des réseaux de neurones dont la paramétrisation de l'entraînement par les données et l'architecture des hy-

perparamètres n'est pas évidente. Le sur-apprentissage (*over-fitting*) conduit souvent à l'instabilité numérique. L'interprétation des paramètres est aussi discutable. Suite à ces considérations, les approches sans modèles hybride, dans le sens où les lois physiques axiomatiques sont gardées et les données sont utilisées directement pour la prédiction, deviennent plus attractives. Dans ce cadre, Kirchdoefer et Ortiz ont proposé une approche sans modèle, dénommée mécanique computationnelle pilotée par les données (*Data Driven Computational Mechanics - DDCM*) [KIR 16]. L'idée est d'incorporer les données directement, sous forme des couples tensoriels de déformation-contrainte pour le problème réversible, en élasticité. L'équilibre et la compatibilité cinématique sont imposés aux données dans un cadre variationnel. Ce problème est résolu par une minimisation de distance mesurée par une métrique co-énergétique entre l'ensemble des états qui satisfont l'équilibre et la compatibilité cinématique, et un ensemble des données discrètes. Une approche très similaire est proposée par Ibanez et al. [IBA 18, IBA 17] où les techniques d'apprentissage de variété sont utilisées sur les données pour construire approximativement la rigidité tangente de la variété constitutive cachée. La solution est trouvée par un solveur itératif de type LATIN [LAD 10]. En bref, avec ces méthodes, la sélection des données est réalisée à la volée du calcul et donc contourne complètement le goulot de la modélisation du matériau. L'objectif est trouver l'intersection de la variété constitutive cachée, représenté seulement par les données et la variété des états physiquement admissibles en utilisant des solveurs directs.

1.4 Bilan et orientation du travail

Pour conclure, bien que la liste soit non exhaustive, nous avons identifié dans la littérature de nouvelles applications de la sciences des données pour la mécanique. Basée sur la façon d'utiliser des données, nous avons classifié ces approches en deux catégories : avec modèle et sans modèle.

L'approche sans modèle proposée par Kirchdoefer et Ortiz paraît plus attractive car les erreurs et les méconnaissances de la physique du matériau sont contournées complètement par l'inclusion directe des données dans le calcul prédictive. Ce point rend cette approche un bon candidat potentiel vu notre application éventuelle dans le calcul thermomécanique où les paramètres du matériau dépendent de la température et où leur calibration n'est pas facile à réaliser.

Depuis la première formulation dédiée à l'élasticité linéaire, elle a été étendue à une vaste classe de problèmes, tels que la dynamique [KIR 17a], l'élasticité en grande transformation [NGU 18, PLA 21], l'identification des matériaux [LEY 18], la complétion des données [AYE 19]. Cependant, il se pose deux questions avec le paradigme DDCM. La première concerne la disponibilité des données sous format tensoriel. La deuxième est l'application de ce paradigme pour les comportements irréversibles et éventuellement non-réguliers, dont l'élasto-plasticité.

Au regard de la première question, bien que les techniques de mesure de champ complet soient capables de fournir des champs observables, par exemple la corrélation

tridimensionnelle des images par tomographie rayon X pour le champ de déformation [BAY 99], la mesure des grandeurs duales (contraintes) n'est pas évident [RÉT 18, DAL 19]. De plus, l'obtention d'une base de données avec uniquement des mesures expérimentales en grande quantité pour un matériau spécifique demande un coût conséquent et n'est pas nécessairement applicable à l'échelle industrielle. Dans l'optique de développer une première preuve de concept, tout au long de cette thèse, on ne considère que des bases de données synthétiques, fabriquées artificiellement par l'échantillonnage sur un domaine spécifique de l'espace de phase et une loi de comportement de référence. Cette loi n'est utilisée que pour la génération des données et puis oubliée pendant la simulation DDCM. On revient sur ce point dans le chapitre suivant.

La deuxième question est effectivement le verrou scientifique le plus important de la thèse. Nous allons l'explorer en détail dans le chapitre 3 de ce manuscrit.

Chapitre 2

Mécanique computationnelle pilotée par les données pour l'élasticité

Dans ce chapitre, nous présentons le paradigme du pilotage par les données, introduit en premier par [KIR 16]. Nous l'introduisons dans un cadre variationnel, suffisamment généralisable pour l'implémentation dans des logiciels de calcul par éléments finis. Des discussions sur l'aspect pratique et les perspectives de la méthode seront abordées ensuite. Nous concluons par un bilan et des orientations de travail.

Sommaire

2.1	Structure d'un problème aux limites standard	13
2.2	Définition du problème Data Driven	14
2.2.1	Idée générale	14
2.2.2	Espace de phase et sa métrique. Variété des états physiquement admissibles et variété comportementale	15
2.2.3	Énoncé du problème Data Driven	16
2.3	Méthode de résolution	17
2.3.1	Minimisation de distance par projection alternée	17
2.3.2	Projection sur la variété des états physiquement admissibles. Problème variationnel continu	17
2.3.3	Projection sur la variété des états matériellement admissibles. Problème du voisin le plus proche	21
2.4	Critère de saturation	30
2.5	Résultats	30
2.5.1	Description du cas test	30
2.5.2	Comparaison calcul DDCM versus calcul standard	31
2.5.3	Influence du choix du tenseur artificiel sur la précision et la convergence	33
2.6	Conclusions et Perspectives	36
2.6.1	Palier le problème des minima locaux ou des données bruitées	36
2.6.2	Construction de la base de données. <i>Data Driven Identification</i>	37
2.6.3	Extension pour d'autres types de comportement	38
2.6.4	Paramétrisation des paramètres artificiels	38
2.7	Bilan et Orientation du travail	39

2.1 Structure d'un problème aux limites standard

Considérant un corps $\Omega \in \mathbb{R}^3$ en état d'équilibre quasi-statique, soumis à un champ de déplacement imposé \mathbf{u}_D sur la frontière $\Gamma_D \subset \partial\Omega$ et des forces surfaciques \mathbf{t}_N sur la frontière $\Gamma_N \subset \partial\Omega$ et volumiques \mathbf{f} , son état mécanique est déterminé par des champs d'état (*state fields*)

- Champ primal, le champ sur lequel les conditions Dirichlet sont imposées
- Champ dual, conjuguée de la variable primale dans le sens énergétique.
- Champ gradient défini par le gradient du champ primal.

Dans ce chapitre, on travaille avec l'hypothèse des petites perturbations (HPP) de la Mécanique des Solides. Par conséquent, les champs gradient, primal et dual seront le déplacements, le tenseur de déformation linéarisé et le tenseur de contrainte de Cauchy, respectivement. La notation tensorielle sera aussi utilisée.

Sans compter les conditions aux limites, il y a trois ingrédients pour un problème aux limites standard

- Loi de conservation, ou d'équilibre
- Condition de compatibilité
- Loi de comportement

La condition de compatibilité fournit une définition du champ primal comme une reconstruction du champ gradient. Précisément, la déformation est définie par le gradient symétrique du déplacement

$$\boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) = \nabla^s \mathbf{u} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) \quad (2.1)$$

L'équation d'équilibre est déduite par les principes fondamentaux de la Physique, et fournit des conditions sur le champ de contraintes (variable duale). Dans la configuration quasi-statique elle est donnée par la forme forte suivante :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad \text{in } \Omega \quad (2.2)$$

Afin de clôturer le système, il faut relier le champ primal et sa partie duale par une loi qui décrit le comportement du matériau. De manière générale, la contrainte est une fonctionnelle dépendante de l'histoire. On détaillera la méthode de l'état local avec des variables internes dans le chapitre 4

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\epsilon}_\tau | \tau \leq t) \quad (2.3)$$

Le système est maintenant complet, avec les conditions aux limites

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ \boldsymbol{\epsilon} = \nabla^s \mathbf{u} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) \\ \boldsymbol{\sigma}(t) = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\epsilon}_\tau | \tau \leq t) \\ \mathbf{u} = \mathbf{u}_D, \forall \mathbf{x} \in \Gamma_D \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t}_N, \forall \mathbf{x} \in \Gamma_N \end{array} \right. \quad (2.4)$$

2.2 Définition du problème Data Driven

2.2.1 Idée générale

Dans le système (2.4), les équations sur la compatibilité et l'équilibre sont de nature axiomatique, c'est-à-dire déduites par des lois Physiques universelles et doivent être satisfaites tout le temps. En revanche, la loi de comportement est issue de la modélisation des observations de réponses matérielles sous sollicitations et la calibration de paramètres. Elle est donc susceptible d'être une source d'erreur et d'incertitude. Le paradigme classique de la mécanique numérique revient à la calibration empirique des modèles multi-paramétriques en utilisant les données issues des essais et l'utilisation des modèles calibrés pour le calcul. Cette procédure rajoute l'erreur et l'incertitude dans la solution, surtout pour des problèmes multi-physiques. Ce fait est majoritairement dû à la méconnaissance épistémologique des phénomènes physiques et l'imperfection dans la mesure et stockage des données d'essai. Malgré l'existence d'un cadre de travail tel que les matériaux standards généralisés, la sélection des formes fonctionnelles, le choix des variables internes sont souvent *ad hoc*.

Dans ce contexte, l'approche DDCM a été proposée par Kirchoerfer et Ortiz [KIR 16] comme un "nouveau paradigme" qui permet de contourner l'utilisation des lois comportements empiriques. A la place des fonctionnelles mathématiques explicites, la réponse mécanique du matériau sous sollicitations est représentée par une base de données de couples tensoriels déformation-contrainte. L'ensemble des équations d'un problème aux limites est découpé en deux parties distinctes : les contraintes issues des principes physiques fondamentaux et les caractéristiques de la réponse matérielle. Dans le paradigme classique, la solution du problème aux limites peut être considérée comme une intersection entre ces deux parties. En revanche, dans ce nouveau paradigme, la réponse matérielle est donnée sous forme de couples discrets, donc l'intersection peut être vide. Alors la solution DDCM doit être reformulée comme une minimisation de distance entre deux champs d'états : l'état *matériellement admissible* qui concerne la réponse mécanique du corps déformable et l'état *physiquement admissible* qui vérifie les contraintes des lois physiques. Ce sont les deux sous ensembles d'un même espace de phase (*phase space*) qui est l'espace des champs d'états possibles pour un problème donné. Finalement, le solveur DDCM consiste à affecter pour chaque point matériel du domaine un état qui : (i) vérifie les contraintes de compatibilité et d'équilibre du problème dans l'espace physiquement admissible, et (ii) est le plus proche d'une base de données préétablie dans l'espace de phase. Il est aussi important de prendre en compte qu'une autre interprétation est possible : affectation d'un état matériellement admissible issu de la base de données tout en minimisant la violation des lois physiques.

L'approche DDCM a été introduite en premier par Kirchoerfer et Ortiz [KIR 16] avec une formulation discrète qui est dédiée au calcul des structures de treillis et puis étendue aux milieux continus en élasticité. Après, Conti et al. [CON 17] a introduit une formulation continue et fourni des preuves mathématiques sur le caractère bien-posé du problème et la convergence de solution DDCM quand les données se rapprochent de la loi de com-

portement. Dans la suite, afin de garder la généralité et l'indépendance des méthodes de discrétisation, nous nous appuyerons sur la formulation variationnelle introduite par Nguyen et al. [NGU 20], avant de rappeler la méthode et discuter sur l'ensemble des résultats numériques de Kirchdoerfer et Ortiz.

2.2.2 Espace de phase et sa métrique. Variété des états physiquement admissibles et variété comportementale

Premièrement, introduisons la notion de **l'espace de phase** \mathcal{Z} (*phase space*) comme un espace des paires de fonction $\mathbf{z} = (\boldsymbol{\epsilon}; \boldsymbol{\sigma})$. Un élément $\mathbf{z} \in \mathcal{Z}$ est en effet une paire des applications

$$\begin{aligned} \mathbf{z}: \Omega &\rightarrow L^2(\mathbb{R}^q) \times L^2(\mathbb{R}^q) \\ \mathbf{x} &\mapsto (\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{x}), \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) \end{aligned}$$

où q est la dimension de $\boldsymbol{\epsilon}$ ou $\boldsymbol{\sigma}$, par exemple dans la configuration 3D, $q = 6$ pour 6 composantes indépendantes du tenseur de déformation/contrainte.

Une paire de fonction $\mathbf{z}_s = (\boldsymbol{\epsilon}_s; \boldsymbol{\sigma}_s)$ qui satisfait à la fois les contraintes physiques (la compatibilité et l'équation d'équilibre) et la loi de comportement est la solution du problème aux limites. Dans le contexte Data-Driven, l'équation de loi de comportement n'existe ni sous la forme explicite ni implicite. Ce qui est donné est un ensemble de données D_n , contenant n couples *discrets* $(\boldsymbol{\epsilon}_i; \boldsymbol{\sigma}_i)$ qui interprète la relation entre le champ dual et le champ primal. Normalement, les lois de comportement sont élaborées depuis cet ensemble d'après certains traitements mathématiques et l'application des principes de la thermodynamique dans le cadre de la théorie des matériaux standards généralisés. Par conséquent, une nouvelle définition de la solution Data Driven doit être énoncée.

Espace de données matérielles L'espace fonctionnel des données \mathcal{D} est un sous ensemble de l'espace de phase \mathcal{Z} , de fonctions continues basées sur des couples tensoriels de la base de données D_n . Cet espace fonctionnel est un espace abstrait dont on a besoin uniquement pour introduire le formalisme variationnel DDCM comme présenté dans [NGU 20, NGU 22]. D'un point de vue pratique, seulement l'ensemble D_n est utilisé dans l'étape de recherche locale de l'algorithme DDCM. Ce point va être détaillé dans la suite. Pour l'instant, en supposant que le domaine Ω va être discrétisé par la méthode des éléments finis standards, on emploie la notation utilisée dans [NGU 22] pour décrire cet espace fonctionnel comme suit :

$$\mathcal{D} = \left\{ \mathbf{z}^* = \prod_{g=1}^M (\boldsymbol{\epsilon}_g, \boldsymbol{\sigma}_g) \quad \text{avec } (\boldsymbol{\epsilon}_g, \boldsymbol{\sigma}_g) \in D_n \right\} \quad (2.5)$$

où M est le nombre total des points de Gauss dans le domaine. Cet espace de données matérielles s'interprète comme une combinaison des lois de comportement inconnues décrites par (2.3). La variété comportementale est donc définie par

$$\mathcal{M} = \{ \mathbf{z} = (\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\sigma}) \quad \text{avec (2.3)} \} \quad (2.6)$$

Il s'agit d'un ensemble des éléments dans l'espace de phase qui suit la loi de comportement inconnue. On finit par la notion de l'**Espace des contraintes physiques** $\mathcal{C} \subset \mathcal{Z}$ contenant des éléments qui satisfont à la fois (2.1), (2.2) et des conditions aux limites diverses.

La notion de **proximité** dans un espace fonctionnel nécessite une métrique. On peut maintenant munir une métrique co-énergétique pour l'espace de phase

$$\|(\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\sigma})\|_{\mathcal{Z}}^2 = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\mathbb{C} : \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\epsilon} + \mathbb{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\sigma}) dV \quad (2.7)$$

avec \mathbb{C} est un tenseur numérique d'ordre 4 choisi arbitrairement et ne représente aucune propriété du matériau. En effet, la sélection de ce tenseur doit satisfaire quelques propriétés suivantes :

- Positif, semi-défini pour que (2.7) soit à une norme
- Symétrique mineur et majeur

On peut faire une remarque mineure sur la partie liée aux contraintes. D'un point de vue numérique, le choix de \mathbb{C}^{-1} semble facultatif. En réalité, ce choix est fait pour conserver l'homogénéité d'unité entre deux contributions de déformation et contrainte dans cette métrique multivariable. L'influence de cet hyperparamètre va être réservée pour la discussion sur des résultats.

2.2.3 Énoncé du problème Data Driven

Avec ces notions, le problème DDCM est défini par une double minimisation

$$\mathbf{z}^{\text{sol}} = \arg \min_{\mathbf{z}^* \in \mathcal{D}} \min_{\mathbf{z} \in \mathcal{C}} \|\mathbf{z} - \mathbf{z}^*\|_{\mathcal{Z}}^2 \quad (2.8)$$

Ce problème s'interprète comme suit : on cherche parmi toutes les distributions de champs déformation-contrainte \mathbf{z}^* dans l'espace de données matérielles un couple de champ qui est le plus proches par rapport à la variété physiquement admissible. Un autre point de vue est que l'on veut trouver une distribution des états physiquement admissibles qui est le plus proche par rapport à la variété comportementale. La solution au sens DDCM peut être choisi librement soit dans \mathcal{D} ou \mathcal{C} . Dans le premier cas, on cherche littéralement une distribution de déformation-contrainte qui existe déjà dans l'espace de données matérielles en minimisant le non respect des lois physiques universelles. Dans l'autre cas, on force la satisfaction des lois physiques universelles et permettre à ce couple de fonctionnelle de rester le plus proche possible par rapport à l'ensemble des états *atteignables*, la variété comportementale. Les deux interprétations sont possibles en général et l'utilisateur peut choisir puisque l'étape de minimisation dans le problème (2.8) est interchangeable. Cependant, en pratique on privilégie une solution dans l'espace \mathcal{C} pour éviter des bruits de mesure expérimentale présentés dans D_n .

2.3 Méthode de résolution

2.3.1 Minimisation de distance par projection alternée

Supposons que la métrique a été bien définie sur l'espace de phase \mathcal{Z} , la solution Data Driven (2.8) peut être trouvée par une procédure itérative de projection successive entre deux sous-ensembles \mathcal{C} et \mathcal{D} . La double minimisation est décomposée en une série de problèmes de minimisation. Commençons avec un champ d'état matériel, i.e choisir un élément $\mathbf{z}_d^{(0)}$ dans l'espace de données matérielles \mathcal{D} et calculer de manière successive pour $k = 0, 1, 2, 3, \dots$ une série de problèmes

$$\mathbf{z}_c^{(k)} = \arg \left\{ \min_{\mathbf{z}_c \in \mathcal{C}} \left\| \mathbf{z}_c - \mathbf{z}_d^{(k)} \right\|_{\mathcal{Z}} \right\} \quad (2.9a)$$

$$\mathbf{z}_d^{(k+1)} = \arg \left\{ \min_{\mathbf{z}_d \in \mathcal{D}} \left\| \mathbf{z}_c^{(k)} - \mathbf{z}_d \right\|_{\mathcal{Z}} \right\} \quad (2.9b)$$

Pratiquement, puisque l'espace fonctionnel \mathcal{D} est construit par l'interpolation des données discrètes, le fait de choisir un élément $\mathbf{z}_d^{(0)} = (\boldsymbol{\epsilon}^*, \boldsymbol{\sigma}^*)^{[0]}$ dans l'espace fonctionnel \mathcal{D} , revient donc, dans le formalisme de la méthode des éléments finis, à affecter des couples de données sur tous les points d'intégration du domaine. La procédure itérative est faite jusqu'à ce que une condition de saturation soit satisfaite. La première minimisation sur \mathbf{z}_c est un problème sur des champs continus, il s'agit donc d'un problème variationnel qui va être résolu sur la discrétisation éléments finis tandis que la seconde minimisation concerne un problème au niveau des points d'intégration locaux. Désormais on les appelle le problème global et local, respectivement. On va les détailler pour la suite.

2.3.2 Projection sur la variété des états physiquement admissibles. Problème variationnel continu

On emploie la méthode des multiplicateurs de Lagrange pour prendre en compte les contraintes d'équilibre et les conditions aux limites sur la minimisation globale.

Etant donné $(\boldsymbol{\epsilon}^*, \boldsymbol{\sigma}^*)$, chercher $(\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\sigma})$ qui minimise la fonctionnelle :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\lambda}_1, \boldsymbol{\lambda}_2) &= \|(\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^*, \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^*)\|_{\mathcal{Z}}^2 \\ &+ \int_{\Omega} \boldsymbol{\mu}_1 : (\nabla^s \mathbf{u} - \boldsymbol{\epsilon}) dV - \int_{\Gamma_D} \boldsymbol{\mu}_2 \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{u}_D) dA \\ &- \int_{\Omega} \boldsymbol{\lambda}_1 \cdot (\nabla \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}) dV + \int_{\Gamma_N} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{t}_N) \cdot \boldsymbol{\lambda}_2 dA \end{aligned} \quad (2.10)$$

avec $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\lambda}_1, \boldsymbol{\lambda}_2) \in H^1(\Omega) \times L^2(\Omega) \times V_{\boldsymbol{\mu}_1} \times V_{\boldsymbol{\mu}_2} \times V_{\boldsymbol{\lambda}_1} \times V_{\boldsymbol{\lambda}_2}$. L'indice d'itérations k a été omis pour alléger la notation. Notons que les espaces fonctionnels sur les multiplicateurs de Lagrange $\boldsymbol{\mu}$ et $\boldsymbol{\lambda}$ ne sont pas encore définis pour bien poser le problème.

En appliquant le théorème de la divergence sur le terme $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}$, on obtient

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\lambda}_1, \boldsymbol{\lambda}_2) = & \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\mathbb{C} : (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^*) : (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^*) + \mathbb{C}^{-1} : (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^*) : (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^*)) \\ & + \int_{\Omega} (\nabla^s \boldsymbol{\lambda}_1 : \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\lambda}_1 \mathbf{f}) dV + \int_{\Omega} \boldsymbol{\mu}_1 : (\nabla^s \mathbf{u} - \boldsymbol{\epsilon}) dV \\ & - \int_{\Gamma_D} [(\mathbf{u} - \mathbf{u}_D) \boldsymbol{\mu}_2 + \boldsymbol{\lambda}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}] dA + \int_{\Gamma_N} [(\boldsymbol{\lambda}_1 - \boldsymbol{\lambda}_2) \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} - \boldsymbol{\lambda}_2 \mathbf{t}_N] dA \end{aligned} \quad (2.11)$$

Les équations d'Euler Lagrange peuvent être obtenues par la stationnarisation de la fonctionnelle . En dérivant le Lagrangien (2.11) selon les champs et rassemblant les termes on obtient

$$\delta \boldsymbol{\epsilon} \rightarrow \int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\epsilon} : [\mathbb{C} : (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^*) - \boldsymbol{\mu}_1] dV = 0 \quad (2.12a)$$

$$\delta \boldsymbol{\sigma} \rightarrow \int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\sigma} [\mathbb{C}^{-1} : (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^*) + \nabla^s \boldsymbol{\lambda}_1] dV - \int_{\Gamma_D} \delta \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\lambda}_1 dA + \int_{\Gamma_N} \delta \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\lambda}_1 - \boldsymbol{\lambda}_2) = 0 \quad (2.12b)$$

$$\delta \mathbf{u} \rightarrow - \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \nabla^s \boldsymbol{\mu}_1 dV + \int_{\Gamma_N} \boldsymbol{\mu}_1 \cdot \mathbf{n} \delta \mathbf{u} dA + \int_{\Gamma_D} \delta \mathbf{u} (\boldsymbol{\mu}_1 \cdot \mathbf{n} - \boldsymbol{\mu}_2) dA = 0 \quad (2.12c)$$

Les équations différentielles dérivées à partir de la variation arbitraire de $\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{u}$ sont données par

$$[\mathbb{C} : (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^*) - \boldsymbol{\mu}_1 = 0, \mathbb{C}^{-1} : (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^*) + \nabla^s \boldsymbol{\lambda} = 0, \nabla^s \boldsymbol{\mu}_1 = 0 \quad (2.13)$$

En analysant les intégrales sur les bords, on peut déduire des conditions aux limites essentielles associées avec ce principe variationnel. Puisque $\delta \mathbf{u}$ et $\delta \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ peuvent varier arbitrairement sur Γ_N et Γ_D , l'utilisation de deux multiplicateurs Lagrange distincts pour l'équation d'équilibre et la condition de Neumann n'est pas nécessaire. Une conclusion similaire est aussi valable pour la compatibilité et la condition de Dirichlet. De plus, les conditions aux limites suivantes peuvent être tirées

$$\boldsymbol{\lambda}_1 = 0 \text{ sur } \Gamma_D, \boldsymbol{\mu}_1 \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_N \quad (2.14)$$

L'équation (2.14) nous propose l'avantage énorme suivant : on peut désormais utiliser deux multiplicateurs de Lagrange, un pour l'équilibre et les conditions Neumann et l'autre pour les conditions Dirichlet. Il est aussi souhaitable de passer directement la compatibilité par la substitution directe dans l'écriture de principe variationnel. Ainsi, l'espace fonctionnel des multiplicateurs de Lagrange est maintenant complètement défini

$$\begin{aligned} V_{\boldsymbol{\lambda}} = H_{0, \Gamma_D}^1 & := \{ \boldsymbol{\lambda} \in H^1(\Omega) : \boldsymbol{\lambda} = 0 \text{ on } \Gamma_D \} \\ V_{\boldsymbol{\mu}} = \mathbf{H}_{0, \Gamma_N}^1 & := \left\{ \boldsymbol{\mu} \in (H^1(\Omega))^q : \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ on } \Gamma_N \right\} \end{aligned} \quad (2.15)$$

On peut écrire le Lagrangien réduit

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}, \mu, \boldsymbol{\lambda}) = & \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\mathbb{C} : (\nabla^s \mathbf{u} - \boldsymbol{\epsilon}^*) : (\nabla^s \mathbf{u} - \boldsymbol{\epsilon}^*) + \mathbb{C}^{-1} : (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^*) : (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^*)) dV \\ & + \int_{\Omega} \boldsymbol{\lambda} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) dV - \int_{\Gamma_D} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_D) \mu dA + \int_{\Gamma_N} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{t}_N) dA \end{aligned} \quad (2.16)$$

avec l'espace fonctionnel $H = H^1(\Omega) \times L^2(\Omega) \times V_{\mu} \times V_{\boldsymbol{\lambda}}$. Toujours en appliquant le théorème de la divergence en prenant en compte des conditions essentielles pour $\boldsymbol{\lambda}$ et le principe de stationnarité on obtient

$$\delta \mathbf{u} \rightarrow \int_{\Omega} \mathbb{C} : \nabla^s \mathbf{u} : \nabla^s \delta \mathbf{u} = \int_{\Omega} \mathbb{C} : \boldsymbol{\epsilon}^* : \nabla^s \delta \mathbf{u} - \int_{\Gamma_D} \mu \delta \mathbf{u} dA \quad (2.17a)$$

$$\delta \boldsymbol{\sigma} \rightarrow \int_{\Omega} (\mathbb{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma} + \nabla^s \boldsymbol{\lambda}) : \delta \boldsymbol{\sigma} = \int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{C}^{-1} : \delta \boldsymbol{\sigma}^* dV \quad (2.17b)$$

$$\delta \boldsymbol{\lambda} \rightarrow \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} \delta \nabla^s \boldsymbol{\lambda} dV = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta \boldsymbol{\lambda} dV + \int_{\Gamma_N} \mathbf{t}_N \delta \boldsymbol{\lambda} dV \quad (2.17c)$$

$$\delta \mu \rightarrow \int_{\Gamma_D} \delta \mu (\mathbf{u} - \mathbf{u}_D) dA = 0 \quad (2.17d)$$

L'équation (2.17b) donne le schéma de mise à jour de l'état de contrainte

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^* + \mathbb{C} : \nabla^s \boldsymbol{\lambda} \quad (2.18)$$

En remplaçant ce schéma dans l'équation (2.17c) on obtient le premier système à résoudre, pour le multiplicateur de Lagrange $\boldsymbol{\lambda}$

$$\int_{\Omega} \mathbb{C} : \nabla^s \boldsymbol{\lambda} : \nabla^s \delta \boldsymbol{\lambda} = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}^* : \nabla^s \delta \boldsymbol{\lambda} - \int_{\Omega} \mathbf{f} \delta \boldsymbol{\lambda} dV - \int_{\Gamma_N} \mathbf{t}_N \delta \boldsymbol{\lambda} dA \quad (2.19)$$

En conclusion, on obtient le système d'équations à 4 inconnues $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}, \mu, \boldsymbol{\lambda})$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mathbb{C} : \nabla^s \mathbf{u} : \nabla^s \delta \mathbf{u} = & \int_{\Omega} \mathbb{C} : \boldsymbol{\epsilon}^* : \nabla^s \delta \mathbf{u} - \int_{\Gamma_D} \mu \delta \mathbf{u} dA \\ \int_{\Gamma_D} & \delta \mu (\mathbf{u} - \mathbf{u}_D) dA = 0 \end{aligned} \quad (2.20a)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mathbb{C} : \nabla^s \boldsymbol{\lambda} : \nabla^s \delta \boldsymbol{\lambda} = & \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}^* : \nabla^s \delta \boldsymbol{\lambda} - \int_{\Omega} \mathbf{f} \delta \boldsymbol{\lambda} dV - \int_{\Gamma_N} \mathbf{t}_N \delta \boldsymbol{\lambda} dA \\ \boldsymbol{\sigma} = & \boldsymbol{\sigma}^* + \mathbb{C} : \nabla^s \boldsymbol{\lambda} \end{aligned} \quad (2.20b)$$

Le système d'équations (2.20) ressemble à celui d'un problème en élasticité linéaire avec la même pseudo-matrice de rigidité. Le système (2.20a) est piloté par la déformation optimale au sens faible, tandis que le multiplicateur de Lagrange $\boldsymbol{\lambda}$ peut être interprété

comme un déplacement fictif correspondant au décalage entre l'état de contrainte physiquement admissible, matériellement admissible, i.e $\boldsymbol{\sigma}$ et $\boldsymbol{\sigma}^*$ avec les sollicitations externes. D'après Stainier et al. [STA 19], d'un point de vue pratique, les problèmes ci-dessus pourraient être traités de manière classique avec un matériau élastique artificiel et soumis à des déformations et contraintes résiduelles (*eigenstrain, eigenstress*)(cf. [KIN 71]). Le système (2.20a) correspond à un problème en élasticité linéaire où la condition de Dirichlet est imposée et le seul chargement concerne le champ de déformation résiduelle pilotée par $\boldsymbol{\epsilon}^*$. Tout autre chargement extérieur et les conditions Neumann sont négligés. Au contraire, le système (2.20b) correspond à un problème avec condition de Dirichlet homogène avec le chargement extérieur et la contrainte résiduelle. Idéalement, les deux champs de contraintes doivent vérifier le bilan d'effort avec les sollicitations extérieures et effectivement rendre nul le multiplicateur $\boldsymbol{\lambda}$. On veut souligner une remarque sur la connexion entre ce cadre de travail variationnel avec la formulation discrète originalement proposée par Kirchdoefer et Ortiz [KIR 16]. Pour rappel,

$$\begin{aligned} \sum_{b=1}^n \left[\sum_{e=1}^m w_e \mathbf{B}_{ea}^T \mathbb{C}_e \mathbf{B}_{eb} \right] \mathbf{u}_b &= \sum_{e=1}^m w_e \mathbf{B}_{ea}^T \mathbb{C}_e \boldsymbol{\epsilon}_e^*, \\ \sum_{b=1}^n \left[\sum_{e=1}^m w_e \mathbf{B}_{eb}^T \mathbb{C}_e \mathbf{B}_{eb} \right] \boldsymbol{\eta}_b &= \mathbf{f}_a - \sum_{e=1}^m w_e \mathbf{B}_{ea}^T \boldsymbol{\sigma}_e^*, \end{aligned}$$

où w_e sont les coefficients d'intégration aux points de Gauss, \mathbf{f}_a est le vecteur de force nodale appliqué à un nœud, \mathbf{B} est la matrice de gradient standard dans la discrétisation par éléments finis, et $\boldsymbol{\epsilon}_e^*$, $\boldsymbol{\sigma}_e^*$ sont la déformation et la contrainte matériellement admissibles, affectées aux points d'intégration. Dans ce schéma, le terme d'intégrale sur les conditions essentielles est absent. Par conséquent, la matrice de rigidité pour les deux problèmes est singulière. Pour le problème sur le déplacement, il peut être traité par application des conditions de Dirichlet directement dans le processus de résolution. Néanmoins, il manque toujours d'information pour le multiplicateur de Lagrange et il faut des arguments complémentaires dans le but d'enlever les modes du corps rigide. D'après Nguyen et al. [NGU 20], le choix approprié est que le multiplicateur de Lagrange s'annule sur le bord Dirichlet.

Ce type de restriction peut être relaxé par le rajout d'une intégrale complémentaire. D'après les développements ci-dessus, la condition $\boldsymbol{\lambda} = 0$ est imposée au sens faible par l'équation (2.12b). En comparaison avec l'équation (2.20), on s'aperçoit que le système discrétisé proposé par Ortiz est une projection de (2.20) sur un espace à dimension finie dans la procédure éléments finis standard.

2.3.3 Projection sur la variété des états matériellement admissibles. Problème du voisin le plus proche

2.3.3.1 Caractère locale du problème

Après avoir résolu le problème variationnel global (2.9a), le champ d'état physiquement admissible est connu pour un champ d'état matériellement admissible donné. Autrement dit, le problème (2.9a) est résolu avec $\mathbf{z}_d^{(k)}$ fixé. On va porter maintenant l'attention sur le problème (2.9b) pour compléter la procédure pour une itération. Puisque la solution au sens DDCM devrait être construite dans un espace fonctionnel à dimension finie et interpolé à partir d'une base de données connue *a priori* par un ensemble de manipulations mathématiques [NGU 20], le problème local (2.9b) devrait aussi être résolu dans un espace fonctionnel connu pour ϵ et σ . Dans le cadre de la méthode des éléments finis, les solutions de contrainte et déformation sont connues sous forme interpolée par des fonctions de forme. Nguyen et al. a établi une connexion entre un polynôme interpolé par ses valeurs nodales sur un domaine et ses valeurs aux points d'intégration [NGU 20]. Au bilan, on peut reconstruire une fonction Φ dans un espace de Hilbert à dimension finie sous conditions que les fonctions de forme et ses valeurs aux points d'intégration sont connues. Ceci est important pour démontrer une équivalence entre la résolution par optimisation combinatoire du problème local et la recherche locale au niveau des points d'intégration. Autrement-dit, on peut résoudre complètement le problème local en travaillant de manière discrète sur l'ensemble des points de Gauss.

La solution des champs physiquement admissibles est connue aux points de Gauss, $(\epsilon_g, \sigma_g) \quad \forall g = 1, 2, \dots, M$ avec M le nombre total des points de Gauss dans le domaine. Pour chaque point de Gauss, en suivant des raisonnements comme ci-dessus, le solveur cherchera dans la base de données le meilleur couple $(\epsilon_g^*, \sigma_g^*)$ dans le sens de la minimisation d'une métrique locale $\|\epsilon, \sigma\|_{Z_{loc}}^2 := \frac{1}{2} (\mathbb{C} : \epsilon : \epsilon + \mathbb{C}^{-1} : \sigma : \sigma)$.

Supposons que le domaine est discrétisé par la méthode des éléments finis avec ω_g les poids d'intégration, la métrique globale (2.7) peut être considérée comme une somme pondérée

$$\|(\epsilon, \sigma)\|_Z^2 = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\mathbb{C} : \epsilon : \epsilon + \mathbb{C}^{-1} : \sigma : \sigma) dV = \sum_{g=1}^M \omega_g \|\epsilon_g, \sigma_g\|_{Z_{loc}}^2 \quad (2.21)$$

d'où, le problème (2.9b) s'est transformé vers M problèmes locaux discrets

$$\forall g \quad \epsilon_g^*, \sigma_g^* = \arg \min_{(\epsilon_j, \sigma_j) \in D} \|(\epsilon_g - \epsilon_j, \sigma_g - \sigma_j)\|_{Z_{loc}}^2 \quad (2.22)$$

C'est une série de problèmes d'optimisation discrète sur un ensemble de données discrètes et fini. Autrement-dit, localement à un point d'intégration, la solution du (2.9b) doit satisfaire une inégalité

$$\|(\epsilon_g - \epsilon_g^*, \sigma_g - \sigma_g^*)^{(k)}\|_{Z_{loc}}^2 \leq \|(\epsilon_g - \epsilon_j, \sigma_g - \sigma_j)\|_{Z_{loc}}^2 \quad \forall g, \quad \forall (\epsilon_j, \sigma_j) \in D \quad (2.23)$$

En appliquant la somme pondérée sur le domaine entier et par le fait que tous les coefficients de pondération sont positifs, on arrive à

$$\sum_{g=1}^M \omega_g \|(\epsilon_g - \epsilon_g^*, \sigma_g - \sigma_g^*)\|_{Z_{loc}}^2 \leq \sum_{g=1}^M \omega_g \|(\epsilon_g - \epsilon_j, \sigma_g - \sigma_j)\|_{Z_{loc}}^2 \quad \forall g, \quad \forall (\epsilon_j, \sigma_j) \in \mathcal{D} \quad (2.24)$$

$$\|(\epsilon - \epsilon^*, \sigma - \sigma^*)\|_{\mathcal{Z}}^2 \leq \|(\epsilon - \tilde{\epsilon}, \sigma - \tilde{\sigma})\|_{\mathcal{Z}}^2 \quad \forall (\tilde{\epsilon}, \tilde{\sigma}) \in \mathcal{D} \quad (2.25)$$

A la fin de l'étape de minimisation locale, on a obtenu une nouvelle distribution des états matériellement admissibles qui est le plus proche par rapport aux états physiquement admissibles trouvés dans l'étape globale. Cette optimisation est de complexité combinatoire, car le nombre d'opérations à effectuer pour chaque itération est $N = N_e \times N_g \times n$ avec n le nombre des données, N_g le nombre de points d'intégrations par élément et N_e le nombre d'éléments (supposons que nous avons un maillage homogène en terme de type des éléments). Finalement, les deux étapes, globale et locale se poursuivent de manière alternée successivement jusqu'à ce qu'un critère de saturation soit satisfait. On reviendra sur ce point plus tard.

2.3.3.2 Problème de recherche du voisin le plus proche

La minimisation locale consiste finalement en une recherche méta-heuristique [GEB 20] du bon point qui minimise la distance avec l'état physiquement admissible au niveau du point d'intégration considéré dans un espace discret muni d'une métrique. Dans la littérature, ce problème algorithmique classique est connu sous le nom de la recherche des plus proches voisins, *nearest neighbors search (NNS)*. De manière plus formelle, on assume P ensemble de n points $p_i \in \mathbb{R}^d$. Le problème NNS dans un espace métrique porte sur une optimisation qui détermine le plus proche voisin $p_i \in P$ par rapport à un point de requête (*query point*) $q \in \mathbb{R}^d$. En effet, l'ensemble P et q doit être dans un même espace muni d'une fonction qui mesure la non-similarité entre des points. Dans notre application, il s'agit de la métrique co-énergétique et $d = 12$ correspond à la dimension du couple déformation-contrainte dans le cas 3D.

L'approche simple pour trouver exactement la solution du problème NNS est la recherche exhaustive linéaire. Il s'agit d'évaluer la distance du point de requête à chaque point dans l'ensemble des tests. L'efficacité temporelle dans le pire cas est $O(nd)$. Par conséquent, avec les données multidimensionnelles et l'augmentation rapide de la taille de base, cette approche est inefficace voire prohibitive à cause de la malédiction des dimensions, d'où vient le besoin d'un algorithme de recherche rapide. Il existe deux catégories de méthodes : exactes et approximatives.

Les algorithmes approximatifs consistent à chercher la solution du problème NNS autour d'une petite bulle ϵ de la solution exacte [MUJ 14]. L'intérêt de cette approche est que, dans de nombreux cas, un plus proche voisin approximatif est presque aussi bon qu'un voisin exact. En particulier, si la mesure de distance capture précisément la notion de qualité définie par l'utilisateur, de petites différences dans la distance ne devraient

pas avoir d'importance [AND 17]. Cependant, afin de garantir le maximum d'information apportées par la base de données matérielles ainsi que la convergence du schéma de minimisation alternée, on ne considère pas cette catégorie d'approche.

L'autre catégorie est les algorithmes exacts, dont le nom est plus ou moins évident. La recherche linéaire exhaustive elle-même appartient à cette catégorie. Elle n'a aucune complexité spatiale en dehors de la capacité de stockage. D'autres méthodes dans cette catégorie s'appuient principalement sur le partitionnement hiérarchique de l'espace et des structures de données dans le but d'accélérer le temps de requête et le réduire vers une complexité logarithmique, pour de différentes applications, par exemple voir [SHA 06] ou [MUJ 14]. Cependant, l'inconvénient commun des algorithmes exacts est la perte rapide d'efficacité avec les données à grande dimension. Une structure efficace s'avère être complexe et occuper plus de mémoire. On parle du compromis espace-temps (*time-space trade off*) [AND 17]. Parfois dans ce cas, la recherche linéaire donne une performance supérieure à celle des données structurées [WEB 98]. De manière générale, la complexité temporelle polylogarithmique n'est plus garantie quand le nombre de point n dépasse la limite 2^d [RAJ 15]. Par contre, il faut avoir conscience que dans la science computationnelle, $k = 20$ n'est pas encore considéré comme des données "à haute dimension". Alors que, pour des applications mécaniques, l'espace des phases avec des couples contrainte-déformation $k = 12$ est considéré comme des données à haute dimension. Les structures sous forme d'arbres sont très efficaces pour notre application ($k < 20$, les données ne sont pas creuses) [BEN 75][RAJ 15]). Parmi les plus populaires, on peut en citer quelques unes : k-d arbre [BEN 75], vp arbre [YIA 93], r* arbre [BEC 90]. Dans la suite, nous présenterons deux possibilités utilisées pendant cette thèse, la structuration de données par la méthode K-moyennes (*K-means clustering*) ou la structure d'arbre k-d (*k-d tree*). Il est aussi bon de mentionner ici les travaux d'Eggersmann et al. [EGG 21a] où différentes structures de données ont été exploitées.

2.3.3.3 Classification de données par méthode K-means

La méthode K-means clustering est un exemple classique de l'apprentissage automatique non-supervisé. Le terme "K-means" était proposé originalement en 1967 par James MacQueen [MAC 67]. L'objectif de la méthode est de partitionner des données dans K clusters. Un cluster est un ensemble des données qui sont plus ou moins similaires. La notion de similarité fait appel à une métrique. Dans notre application, c'est la métrique co-énergétique et un cluster va rassembler des points qui ont à peu près un même niveau de pseudo-énergie.

L'objectif final de l'algorithme est de déterminer le centroïde de chaque cluster et labelliser des points de données pour son correspondant cluster à partir des données et le nombre de cluster K donné a priori. On suppose aussi qu'un point de données appartient à un seul cluster, qui est représenté par son étiquette.

Etant donné N points avec ses coordonnées sous forme des vecteurs colonnes $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N] \in \mathbb{R}^{d \times N}$, on cherche à déterminer les centroïde $\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2, \dots, \mathbf{m}_K \in \mathbb{R}^{d \times 1}$ et l'étiquette $y_i = k, k \in 1, 2, \dots, K$ pour chaque point de données \mathbf{x}_i . Une technique sou-

vent utilisée pour représenter cet étiquetage est l'encodage one-hot. Chaque étiquette est représentée par un vecteur de ligne $\mathbf{y}_i \in \mathbb{R}^{1 \times K}$ avec $y_{ij} = 0, \forall j \neq k, y_{ik} = 1$ et donc pour l'ensemble de données on a la matrice d'étiquetage $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{N \times K}$

Soit $\mathbf{m}_k \in \mathbb{R}^d$ le centroïde du cluster k , représentant de tous les données labellisées par \mathbf{y}_k , un point appartient au cluster k représente un coût de $(\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_k)$. On souhaite minimiser ce coût mesuré par la métrique. Pour simplifier la présentation suivante, on utilise d'abord la métrique Euclidienne. L'expression de distance au carré est donc définie par

$$\|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_k\|_2^2 = y_{ik} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_k\|_2^2 = \sum_{j=1}^K y_{ij} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_j\|_2^2 \quad (2.26)$$

Soit le coût total moyéné sur l'ensemble des données

$$\mathcal{L}(\mathbf{Y}, \mathbf{M}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^K y_{ij} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_j\|_2^2 \quad (2.27)$$

avec $\mathbf{M} = [\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2], \dots, \mathbf{m}_K$ la matrice induite par les coordonnées des centroïdes. Finalement, le problème d'optimisation à résoudre s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}, \mathbf{M} = \operatorname{argmin}_{\mathbf{Y}, \mathbf{M}} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^K y_{ij} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_j\|_2^2 \\ \text{en respectant } y_{ij} \in \{0, 1\}, \forall i, j; \quad \sum_{j=1}^K y_{ij} = 1, \forall i \end{aligned} \quad (2.28)$$

D'un point de vue mathématique, ce problème de minimisation sous contrainte est de type *mixed-integer programming* et donc difficile à trouver un minimum global. La technique couramment utilisée pour résoudre le problème (2.28) est de fixer soit \mathbf{Y} ou \mathbf{M} et résoudre l'autre variable jusqu'à ce que la fonction de coût converge.

Fixer \mathbf{M} et résoudre pour \mathbf{Y} On suppose que les centroïdes sont connus et cherche à labelliser les données afin de minimiser la fonction de coût. Cette étape est équivalente à trouver pour chaque vecteur de données, un vecteur d'étiquette tel que

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_i = \operatorname{argmin}_{\mathbf{y}_i} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^K y_{ij} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_j\|_2^2 \\ \text{en respectant } y_{ij} \in \{0, 1\}, \forall i, j; \quad \sum_{j=1}^K y_{ij} = 1, \forall i \end{aligned} \quad (2.29)$$

Grâce au codage one hot, le problème (2.29) n'est rien d'autre de trouver le centroïde le plus proche d'un vecteur de donnée.

Fixer \mathbf{Y} et résoudre pour \mathbf{M} Une fois que toutes les données sont labellisées, on cherche à déterminer les nouveaux centroïdes afin de minimiser la fonction de coût

$$\mathbf{m}_j = \operatorname{argmin}_{\mathbf{m}_j} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_{ij} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_j\|_2^2 = \operatorname{argmin}_{\mathbf{m}_j} l(\mathbf{m}_j) \quad (2.30)$$

Contrairement au problème (2.29) qui est de nature discrète, la fonction de coût dans (2.30) est continue et peut être résolue analytiquement.

$$\nabla_{\mathbf{m}_j} l(\mathbf{m}_j) = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N y_{ij} (\mathbf{m}_j - \mathbf{x}_i) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{m}_j \sum_{i=1}^N y_{ij} = \sum_{i=1}^N y_{ij} \mathbf{x}_i \Leftrightarrow \mathbf{m}_j = \frac{\sum_{i=1}^N y_{ij} \mathbf{x}_i}{\sum_{i=1}^N y_{ij}} \quad (2.31)$$

\mathbf{m}_j est finalement la moyenne des données du cluster j , d'où vient la notion K-means clustering. On peut résumer ces développements dans un algorithme suivant, connu dans la littérature en tant que l'algorithme de Lloyd - Forgy [LLO 82, FOR 65]

Algorithm 1 Algorithme de Lloyd - Forgy

Entrée : Matrice des données $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{d \times N}$ et le nombre des clusters $K < N$

Sortie : Matrice des centroides $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{d \times K}$ et matrice des étiquettes $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{N \times K}$

- 1. Initialisation par la sélection de K points parmi les données comme des centroides
 - 2. Labelliser chaque point par le centroïde le plus proche
 - 3. Arrêter l'algorithme si le partitionnement de données dans l'étape 2 ne change pas par rapport à la dernière itération.
 - 4. Pour chaque cluster, Mise à jour des centroides par calculer la moyenne des données affectées à ce cluster après l'étape 2
 - 5. Revenir à l'étape 2
-

Ces développements au-dessus sont conçus pour la métrique Euclidienne. Afin de passer vers la métrique co-énergétique, une simple application d'isomorphisme utilisant le tenseur artificiel \mathbf{C} est utilisée pour transformer la métrique énergétique vers la distance Euclidienne. En utilisant la notation de Voigt (seulement pour ce paragraphe), la métrique énergétique locale s'écrit sous la forme

$$\|\hat{\boldsymbol{\epsilon}}, \hat{\boldsymbol{\sigma}}\|_{Z_{loc}}^2 = \frac{1}{2} (\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^T \mathbf{C} \hat{\boldsymbol{\epsilon}} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}^T \mathbf{C}^{-1} \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \quad (2.32)$$

avec $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$ et $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ sont des vecteurs colonnes de taille et \mathbf{C} est une matrice carrée 6×6 symétrique, semi-définie. Ces caractéristiques garantissent l'existence des matrices $\mathbf{C}^{\frac{1}{2}}$ et $\mathbf{C}^{-\frac{1}{2}}$ telles que $\mathbf{C} = \mathbf{C}^{\frac{1}{2}} \cdot \mathbf{C}^{\frac{1}{2}}$ et $\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \cdot \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}}$.

Par conséquent, un vecteur de données $\hat{\mathbf{z}} = (\hat{\boldsymbol{\epsilon}}, \hat{\boldsymbol{\sigma}})^T$ s'exprime dans l'espace Euclidien par

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{z}}_{eucl} : \mathbb{R}^{12} &\rightarrow \mathbb{R}^{12} \\ (\hat{\boldsymbol{\epsilon}}, \hat{\boldsymbol{\sigma}})^T &\mapsto (\mathbf{C}^{\frac{1}{2}} \cdot \hat{\boldsymbol{\epsilon}}, \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^T \end{aligned}$$

La métrique locale s'exprime donc par un produit scalaire dans l'espace Euclidien

$$\|\hat{\boldsymbol{\epsilon}}, \hat{\boldsymbol{\sigma}}\|_{Z_{loc}}^2 = \frac{1}{2} (\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^T \mathbf{C} \hat{\boldsymbol{\epsilon}} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}^T \mathbf{C}^{-1} \hat{\boldsymbol{\sigma}}) = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{z}}_{eucl}^T \cdot \hat{\mathbf{z}}_{eucl} \quad (2.33)$$

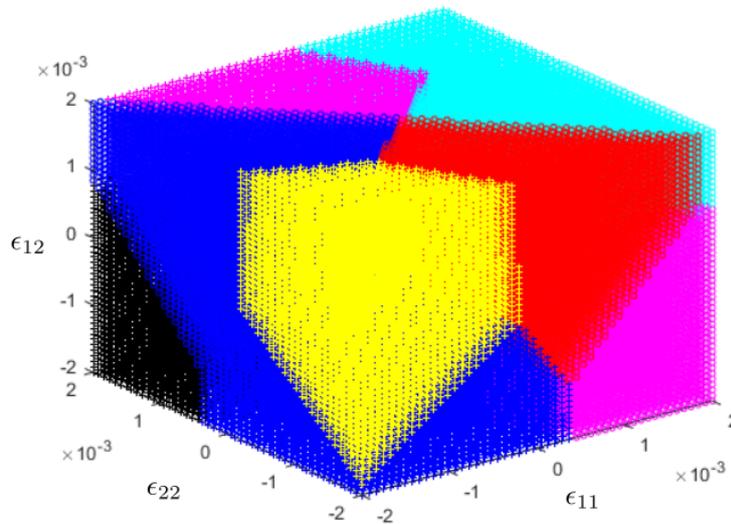


FIGURE 2.1 – Résultat de la méthode K-means sur une base de données 50^3 points avec 10 clusters

La figure 2.1 montre le résultat de partitionnement K-means sur une base de données synthétiques, échantillonnée uniformément sur un domaine $[\epsilon_{11}, \epsilon_{22}, \epsilon_{12}] = \{-2, 2\} \otimes \{-2, 2\} \otimes \{-2, 2\}$ mm/m. Les contraintes correspondantes sont évaluées grâce à une loi de référence en élasticité linéaire homogène isotrope avec les paramètres comme suit $E = 210$ GPa, $\nu = 0.3$. L'occupation des clusters dans l'espace de phase est séparé par des hyperpolygones. Un point à l'intérieur d'un polygone a la distance le plus proche entre lui et le centroïde du polygone par rapport aux distances avec d'autres polygones. Effectivement, le K-means clustering est une généralisation du diagramme de Voronoi dans un plan 2D. Une fois que les centroïdes et l'étiquette des données sont déterminés, l'étape locale du solveur DDCM est réalisée en deux sous-étapes successives

- Etant donné un requête (l'état physiquement admissible trouvé par l'étape globale), trouver le centroïde le plus proche
- Recherche le bon point matériellement admissible dans le cluster correspondant par la recherche exhaustive

La méthode K-means cependant représente deux inconvénients majeurs.

- **Dépendance du résultat à l'initialisation.** Cette dépendance est due au fait que l'algorithme de Lloyd-Forgy ne garantit pas de trouver le minimum global. Il y a des études démontrant l'importance de l'initialisation, par exemple [CEL 13, PEñ 99]. Une technique pour limiter des solutions dégénérées est de faire tourner l'algorithme avec différentes initialisations et retenir la solution avec la valeur minimum de la fonction de coût. De plus, [KHA 04], k-means ++ [ART 07, BAH 12] sont de bonne alternatives. Particulièrement, k-means ++ est souvent implémenté dans de nombreux logiciels en calcul scientifique. D'après Arthur et al. [ART 07], à l'aide d'une étude de simulation pour plusieurs

orientations de clusters, k-means++ atteint une convergence plus rapide vers une somme plus faible de distances intra-clusters, somme des carrés, point-à-clusters-centroïdes que l'algorithme de Lloyd.

- **Nombre de cluster** Il faut connaître a priori le nombre de cluster K . Une méthode simple pour déterminer ce paramètre est méthode de coude (*elbow method*). C'est un heuristique simple en se basant sur l'idée que l'augmentation du nombre de clusters améliorera naturellement l'ajustement (expliquant une plus grande partie de la variation), puisqu'il y a plus de paramètres (plus de clusters) à utiliser. Plus un cluster est petit, plus l'erreur induite par représenter les données par son centroïde diminue, i.e diminution de la fonction de coût (2.30). Mais à partir d'un certain point, il s'agit d'un ajustement excessif, puisqu'il subdivise les groupes étiquetés en plusieurs clusters. En supposant que cela se produise, il y aura un coude net dans la courbe de la fonction de coût tracée en fonction du nombre de clusters : augmentation rapide jusqu'à une certaine valeur (région de sous-apprentissage, *under-fitting*), puis augmentation lente après (région de sur-apprentissage, *under-fitting*).

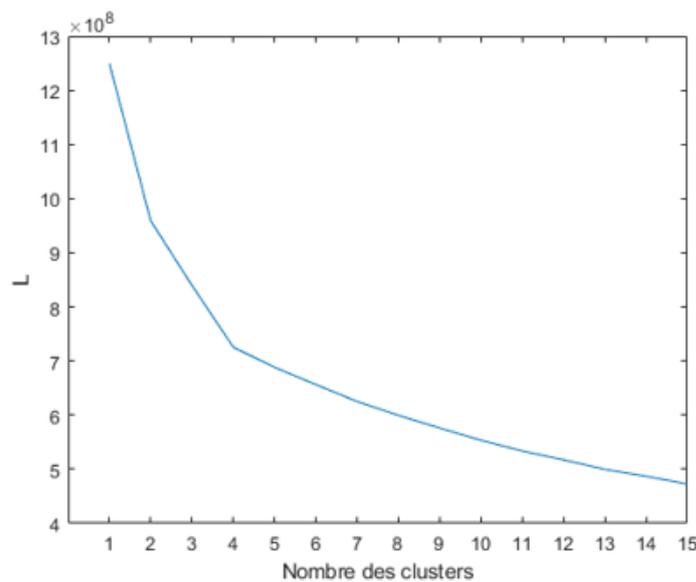


FIGURE 2.2 – Méthode elbow appliquée sur la base de données 50^3 points en exemple

La figure 2.2 montre cette analyse avec la base de données en exemple au-dessus. A partir de $K = 4$ on observe un coude net sur la courbe. Cependant, dans l'optique d'application pour le solveur DDCM, un choix $K > 10$ semble aussi raisonnable vu que cela diminue la taille de cluster pour la recherche exhaustive. Il arrive aussi dans la pratique qu'il n'y ait pas de coude net et, en tant que méthode heuristique, un tel "coude" ne peut pas toujours être identifié sans ambiguïté [KET 96]. Une autre alternative est la méthode *silhouette score* [ROU 87].

2.3.3.4 Classification de données par arbre k-d

Dans cette sous-section, nous explorons ensuite une autre structure de données très utilisée pour des données à faible dimension et non-creuses, qui est l'arbre k-d (*kd-tree*) [BEN 75][RAJ 15] avec k ici est la dimension des données. Généralement, un arbre k-d de Bentley [BEN 75] consiste en une structure de données sous forme d'arbre binaire résultant de la répartition récursive de l'espace de phase par des hyperplans orthogonaux vers $O(\log n)$ hypercubes. Chaque hyperplan de découpage est choisi d'être orthogonal par rapport à l'axe de dimension de données et divisé en deux l'ensemble des données tel que les deux sous ensembles ont à peu près le même nombre d'éléments. Ce paramètre pour chaque feuille (sommets qui ne contiennent pas de sous-branche) de l'arbre doit être défini a priori. Les autres sommets (y compris la racine) sauvegardent des informations sur les hyperplans.

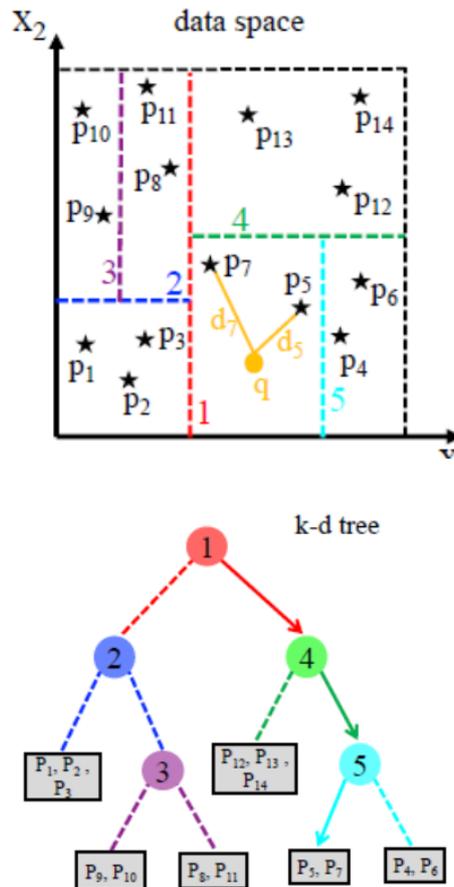


FIGURE 2.3 – Exemple de k-d tree (Bahmani et WaiChingSun, 2021 [BAH 21])

La figure 2.3, extrait de [BAH 21], montre un exemple de la construction et le parcours de la structure d'arbre k-d pour le problème NNS. Pour un point de requête, il traverse

l'arbre depuis la racine, basée sur la métrique et la configuration des hyperplans, pour raffiner la recherche à un sous-demi arbre jusqu'à l'arrivée dans une feuille, là où la recherche linéaire est utilisée. L'exemple ci-dessous illustre la procédure de construction d'un arbre k-d pour un ensemble $P = \{p_1, p_2, \dots, p_{14}\}$ avec $k = 2$ et un point de requête q . La ligne 1 (ligne rouge pointillée) divise l'ensemble en deux avec 7 points pour chaque partie. Ensuite, la ligne 2 divise encore le rectangle à gauche construite par la ligne 1 en deux parties, la partie en haut 4 points et 3 point en bas. La procédure continue jusqu'à ce que nous avons des sous-divisions de telle sorte que chaque partie a au maximum 3 points, le nombre maximal pour une feuille. L'information géométrique des hyperplans est stockée avec une hiérarchie depuis la racine vers un niveau avant des feuilles, i.e les nœuds 1-5 contiennent des informations sur les lignes 1-5.

Maintenant on détaille le chemin de parcours. Pour le point de requête q , l'algorithme parcourt depuis la racine (nœud 1), et à chaque nœud il détermine quel est le sous-arbre contenant le voisin le plus proche de q selon la configuration des hyperplans, jusqu'à ce qu'il arrive à une feuille. Dans notre exemple

- Commençons avec le nœud 1. Selon le configuration de la ligne 1, le point de requête appartient à la partie à droite. Il se peut que la solution du problème NNS se trouve dans cette partie. L'algorithme détermine le chemin 1-4 (la flèche rouge). Les points dans la partie à gauche sont éliminés.
- Au nœud 4, l'algorithme prend en compte l'information de ligne 4. Le point q appartient à la partie en bas. Les points en haut sont éliminés. Il suit le chemin 4-5, la flèche verte.
- Au nœud 5, avec le même principe, l'algorithme détermine le chemin suivant sera vers une feuille qui contient les points 5 et 7. Il effectue la recherche linéaire dans cette feuille. Dans ce cas, $k = 2$ et par le fait que cette feuille ne contient que deux points, on arrive déjà à la solution.

L'implémentation des arbres est faite de manière *offline*. La hauteur de l'arbre k-d en moyenne est de $O(\log n)$ (n ici est le nombre des nœuds et aussi des hyperplans de découpage) avec un temps de construction en moyenne de $O(kn \log n)$ et un temps de parcours en moyenne de $O(\log n)$ [FRI 77, MAN 99]. La complexité de recherche dans le pire cas est $O(kn^{k-\frac{1}{k}})$ [LEE 77].

Dans MATLAB et Python, on dispose de deux bibliothèques

- MATLAB : fonction `knnsearch` pour la recherche et `KDTreeSearcher` pour la création des arbres. Nous avons utilisé ces fonctionnalités pendant toute la thèse.
- Python : bibliothèque scikit learn avec la fonction `scipy.spatial.cKDTree`

Dans la pratique, le seul hyper-paramètre que nous devons introduire est le nombre maximal des points dans une feuille. Ce paramètre ne devrait pas être trop grand ou trop petit. Des valeurs grandes vont créer un arbre plus court et raccourcir le chemin parcouru jusqu'à une feuille, mais il accroît le coût de calcul dans les feuilles.

2.4 Critère de saturation

La minimisation de distance par projection alternée peut être implémentée comme un schéma de point-fixe [KIR 16, NGU 20] avec un critère de saturation défini en prenant la forme d'une distance résiduelle dans l'espace des données matérielles, normalisée par la métrique des états physiquement admissibles de la première itération

$$\delta = \frac{\left\| (\boldsymbol{\epsilon}^{*,(k+1)} - \boldsymbol{\epsilon}^{*,(k)}, \boldsymbol{\sigma}^{*,(k+1)} - \boldsymbol{\sigma}^{*,(k)}) \right\|_{\mathcal{Z}}}{\left\| (\boldsymbol{\epsilon}^{(0)}, \boldsymbol{\sigma}^{(0)}) \right\|_{\mathcal{Z}}} \leq \mathbf{tol} \quad (2.34)$$

ou une distance résiduelle normalisée dans l'espace d'états physiquement admissibles. Ces deux critères sont équivalents car la projection vers l'espace \mathcal{C} ou \mathcal{D} sont des opérateurs linéaires et continus [NGU 22]. Dans tous les exemples que nous considérons dans la suite, nous prendrons $\delta \leq 10^{-10}$

2.5 Résultats

2.5.1 Description du cas test

Nous considérons une plaque bidimensionnelle en condition de déformation plane illustrée dans la Figure 2.4. Le domaine est composé d'un carré unitaire avec un quart de vide circulaire de rayon $r = 0.3\text{m}$. Le solide est modélisé par des conditions aux limites symétriques au niveau du bord gauche et du bord inférieur, de sorte que le champ de déplacement orthogonal au bord s'annule, et est soumis à une contrainte de traction uniaxiale 40MPa au niveau du bord droit. Nous utilisons un maillage triangulaire d'éléments finis P_2 composé de 1158 éléments et 2413 nœuds avec 3 points de quadrature par élément. Nous raffinons intentionnellement avec de petits éléments autour du trou circulaire pour capturer la forte concentration de contraintes sur les frontières. Le comportement de référence est une loi élastique non linéaire comme suit

$$\boldsymbol{\sigma} = \kappa \text{tr}\boldsymbol{\epsilon}(1 + \beta(\text{tr}\boldsymbol{\epsilon})^2)\mathbf{I} + 2\mu(1 + \beta\mathbf{e} : \mathbf{e})\mathbf{e} \quad (2.35)$$

avec κ et μ de sorte que $E = 21\text{GPa}$ et $\nu = 0.3$, et avec $\beta = 1 \times 10^4$. La partie déviatorique du tenseur de déformation est dénotée \mathbf{e} .

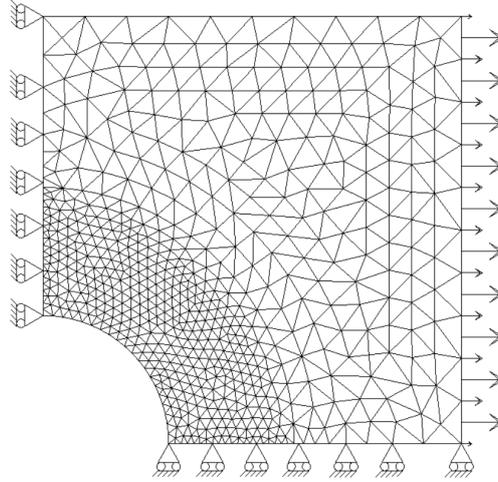


FIGURE 2.4 – Configuration géométrique du cas test

Pour le solveur DDCM, nous testons avec une base de données synthétiques, fabriquée sur un espace paramétrique cubique $[\epsilon_{11}, \epsilon_{22}, \epsilon_{12}] = \{\min \epsilon_{11}^{ref} - \delta_{11}, \max \epsilon_{11}^{ref} + \delta_{11}\} \otimes \{\min \epsilon_{22}^{ref} - \delta_{22}, \max \epsilon_{22}^{ref} + \delta_{22}\} \otimes \{\min \epsilon_{12}^{ref} - \delta_{12}, \max \epsilon_{12}^{ref} + \delta_{12}\}$. La solution standard EF permet d'obtenir les différents champs mécaniques dont les valeurs minimales et maximales des déformations sont prises comme les bornes du plan d'expérience devant fournir les données synthétiques D_n . Les marges δ_{**} sont définies par $\tau \times |\max(\epsilon)_{**} - \min(\epsilon)_{**}|$ avec un taux de marge fixé $\tau = 10\%$. L'échantillonnage est réalisé uniformément sur les trois dimensions avec n le nombre de points sur chaque dimension. La taille de la base est finalement n^3 . Les contraintes sont calculées par (2.35).

Pour d'autres paramètres du solveur, on utilise dans un premier temps le tenseur d'élasticité linéaire isotrope avec le même paramètres que la loi de référence. La structure de recherche des données est l'arbre k-d exact et finalement, le solveur est initialisé avec tous les champs à 0.

2.5.2 Comparaison calcul DDCM versus calcul standard

On définit un indicateur d'erreur locale sur un élément e pour le champ de déformation sous la forme,

$$\Delta_{\epsilon}^e = \frac{\int_{\Omega_e} \|\epsilon_{DD} - \epsilon_{ref}\|_2^2 dV}{\int_{\Omega} \|\epsilon_{ref}\|_2^2 dV} \quad (2.36)$$

où cet indicateur pourra être utilisé également pour le champ de contrainte. On trace la distribution d'erreur pour les deux champs de déformation et contrainte en fonction de la densité d'échantillonnage. Sur la figure 2.5, on observe une tendance similaire des cartes d'erreur malgré le nombre de données. La carte d'erreur de déformation a une tendance à propager vers la zone où on attend des hautes valeurs du champ alors que la carte de

contrainte est plutôt éparpillée avec des minima locaux. Cependant, dans les deux cas, l'erreur maximale diminue quand la densité d'échantillonnage augmente.

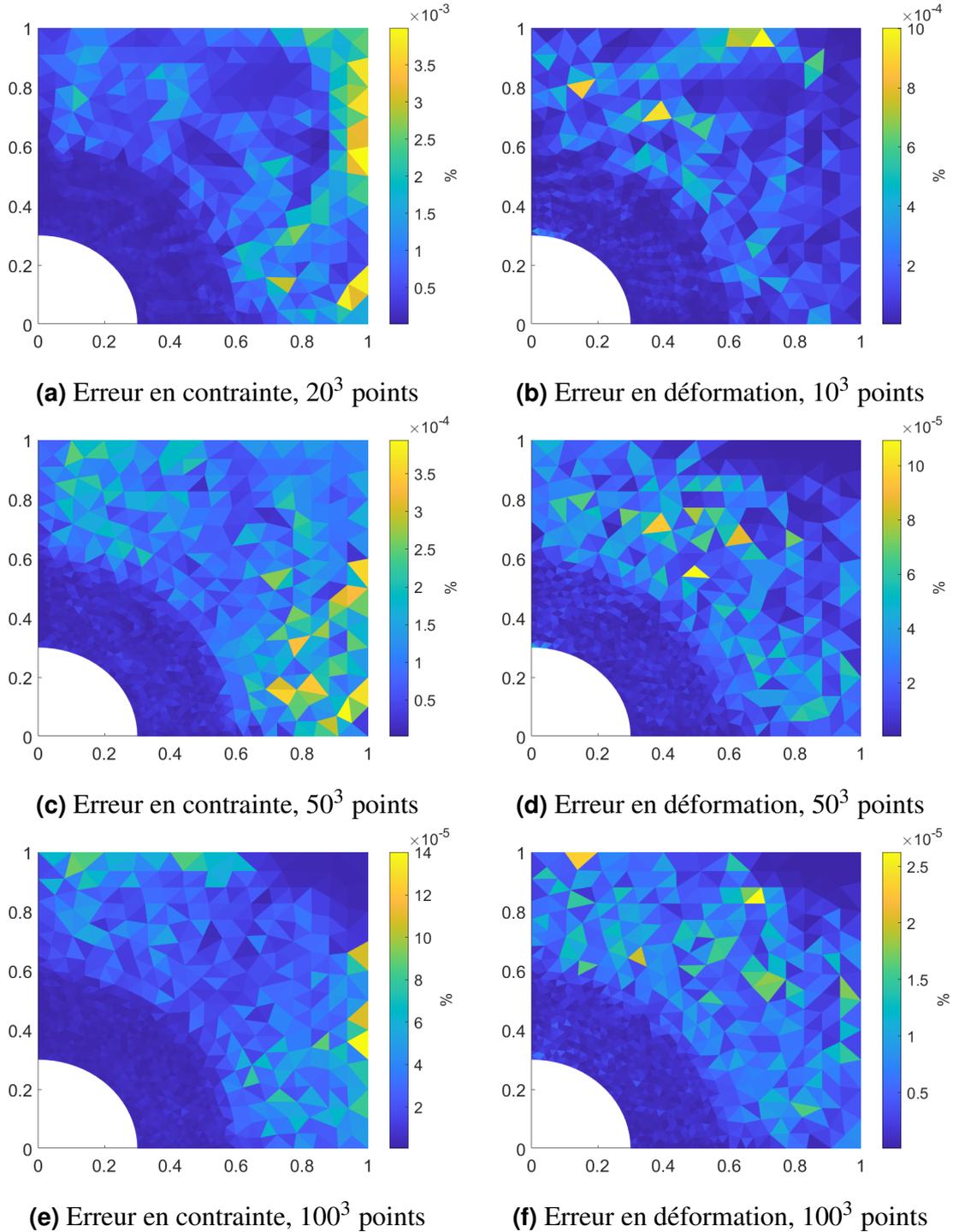


FIGURE 2.5 – Carte d'erreur sur les champs de déformation et contrainte en fonction des données

Pour quantifier cette convergence en fonction des données, on définit un indicateur sur l'erreur relative globale, de la même façon que la formule (2.36)

$$\Delta_\epsilon = \frac{\int_{\Omega} \|\epsilon_{DD} - \epsilon_{ref}\|_2^2 dV}{\int_{\Omega} \|\epsilon_{ref}\|_2^2 dV} \quad (2.37)$$

La figure 2.6a montre que, avec un nombre élevé d'échantillonnage, la valeur finale de la fonction de double minimisation diminue. Un taux de convergence linéaire a été observé dans la figure 2.6b. Ce résultat se corrobore bien avec ceux obtenus dans les travaux de départ de Kirchdoefer et Ortiz [KIR 16] ainsi que les démonstrations mathématiques obtenues par [CON 17], lorsque la densité d'échantillonnage augmente, le résultat DDCM tend vers la référence.

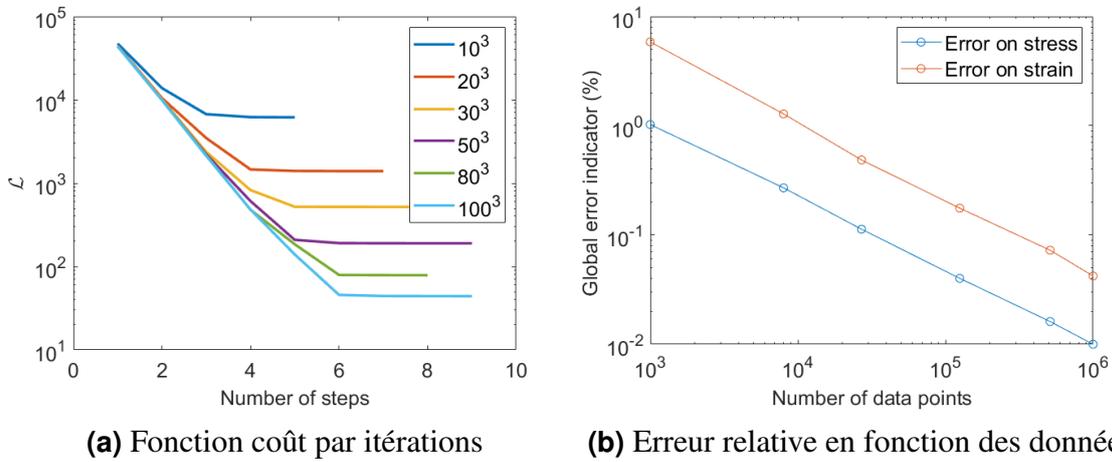


FIGURE 2.6 – Convergence du résultat DDCM lorsque la densité des données augmente

2.5.3 Influence du choix du tenseur artificiel sur la précision et la convergence

La méthode de minimisation de distance consiste en une série de projections du type (2.9a), où une projection de l'espace des données matérielles vers l'espace des contraintes physiques est effectuée, et du type (2.9b), où une projection de l'espace des contraintes physiques vers l'espace des données matérielles est effectuée. Pendant les deux minimisations, une projection $\Delta \mathbf{z} = (\epsilon - \epsilon^*, \sigma - \sigma^*)$ est effectuée à chaque point d'intégration dans l'espace de phase local. Pour réaliser cette étape, pour les deux projections, une fonction coût doit être minimisée. Pour les étapes de projection de type (2.9a), la fonction coût est définie par (2.16) et pour les étapes de projection de type (2.9b), la fonction coût est définie par (2.22). Les deux fonctions coût consistent en des sommations du type

$$\|\Delta \mathbf{z}\|_{\mathbf{Z}}^2 = \|\Delta \epsilon, \Delta \sigma\|_{\mathbf{Z}}^2 = \underbrace{\frac{1}{2} \Delta \epsilon : \mathbb{C} : \Delta \epsilon}_{W^\epsilon(\Delta \epsilon, \mathbb{C})} + \underbrace{\frac{1}{2} \Delta \sigma : \mathbb{C}^{-1} : \Delta \sigma}_{W^\sigma(\Delta \sigma, \mathbb{C}^{-1})} \quad (2.38)$$

L'ordre de grandeur de la contribution liée à la déformation $W^\epsilon(\Delta\epsilon, \mathbb{C})$ et celle liée à la contrainte $W^\sigma(\Delta\sigma, \mathbb{C}^{-1})$ dépend du tenseur artificiel \mathbb{C} . S'il y a une différence substantielle dans l'ordre de grandeur entre ces deux contributions, l'une va dominer l'autre pendant la procédure de minimisation. Dans ce cas, les étapes de minimisation vont se concentrer sur la déformation et restent quasiment indifférentes sur la contrainte ou vice versa. Ce fait indique une petite amélioration après une projection vis-à-vis de la quantité négligée. Une convergence lente est attendue dans cette situation pour obtenir une solution optimale pour les deux parties déformation et contrainte.

La question la plus importante ici est : Quelle est la condition sous laquelle $W^\epsilon(\Delta\epsilon, \mathbb{C})$ et $W^\sigma(\Delta\sigma, \mathbb{C}^{-1})$ sont comparables. Pour cela, en s'inspirant de l'idée de Nguyen et al.[NGU 22], on porte l'attention seulement vers la fin du schéma de double minimisation. On fait aussi une hypothèse que les données sont disponibles avec la bonne densité de couverture dans l'espace de phase pour que dans la dernière phase du schéma de minimisation on reste très proche de la variété constitutive cachée. Sous ces hypothèses et considérations, on peut approximer la distance entre \mathcal{C} et \mathcal{D} par la distance tangentielle sur le plan tangent de la variété constitutive. Soit $\mathbb{C}_{\text{tan}} = \frac{\Delta\sigma}{\Delta\epsilon}(\mathbf{z}_j^*)$ l'opérateur tangent défini localement sur une donnée \mathbf{z}_j^* , une approximation linéaire de la distance tangentielle est donnée par

$$\Delta\sigma = \mathbb{C}_{\text{tan}} : \Delta\epsilon + O(\|\Delta\epsilon\|^2) \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned} \Delta\sigma : \mathbb{C}^{-1} : \Delta\sigma &= (\mathbb{C}_{\text{tan}} : \Delta\epsilon + O(\|\Delta\epsilon\|^2)) : \mathbb{C}^{-1} : (\mathbb{C}_{\text{tan}} : \Delta\epsilon + O(\|\Delta\epsilon\|^2)) \\ &= \mathbb{C}_{\text{tan}} : \Delta\epsilon : \mathbb{C}^{-1} : \mathbb{C}_{\text{tan}} : \Delta\epsilon + O(\|\Delta\epsilon\|^3) \end{aligned} \quad (2.40)$$

On assume que $\mathbb{C} = \gamma\mathbb{C}_{\text{tan}}$. Le rapport entre $W^\sigma(\Delta\sigma, \mathbb{C}^{-1})$ et $W^\epsilon(\Delta\epsilon, \mathbb{C})$ s'exprime donc

$$\frac{W^\sigma(\Delta\sigma, \mathbb{C}^{-1})}{W^\epsilon(\Delta\epsilon, \mathbb{C})} = \frac{\mathbb{C}_{\text{tan}} : \Delta\epsilon : \mathbb{C}^{-1} : \mathbb{C}_{\text{tan}} : \Delta\epsilon}{\Delta\epsilon : \mathbb{C} : \Delta\epsilon} + O(\|\Delta\epsilon\|) \approx \frac{1}{\gamma^2} \quad (2.41)$$

Grâce à l'équation (2.41), il est attendu que les deux contributions dans la métrique sont comparables en terme de magnitude si le tenseur artificiel est d'une magnitude similaire à celle de la rigidité tangente de la variété constitutive cachée. Sinon, une convergence lente est attendue. Afin de démontrer ces discussions, nous reprenons le cas test au-dessus avec une base de données suffisamment riche de 50^3 points. Pour limiter la situation des minimas locaux, on rajoute dans la base de données la solution de référence sans support géométrique. Vu que la structure k-d tree devrait être construite a priori et dépend du tenseur artificiel, la recherche exhaustive est utilisée pour toute la procédure du calcul. On définit ensuite le tenseur artificiel pour la solution DDCM comme $\mathbb{C}_{\text{tan}} = \gamma \frac{\partial\sigma}{\partial\epsilon}(\epsilon = 0)$ en utilisant l'équation de comportement. Pour $\gamma = 1$, le tenseur artificiel vaut la rigidité tangente dans la condition sans contrainte. On teste aussi avec $\gamma = 0.2$, $\gamma = 5$.

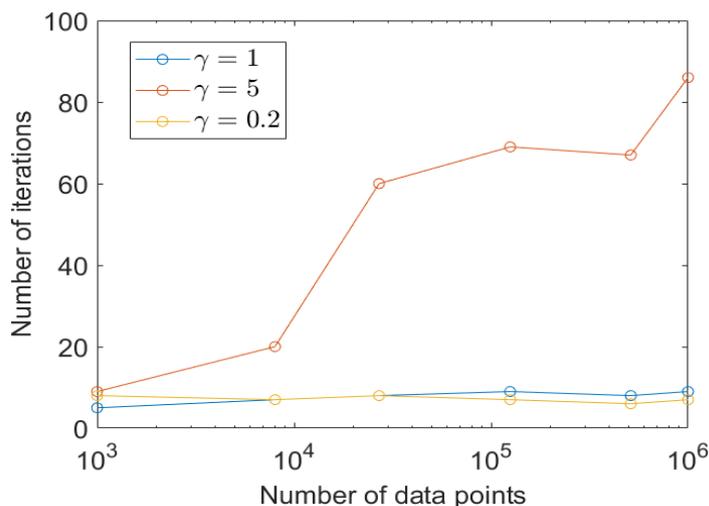


FIGURE 2.7 – Nombre d’itérations effectuées en fonction de γ

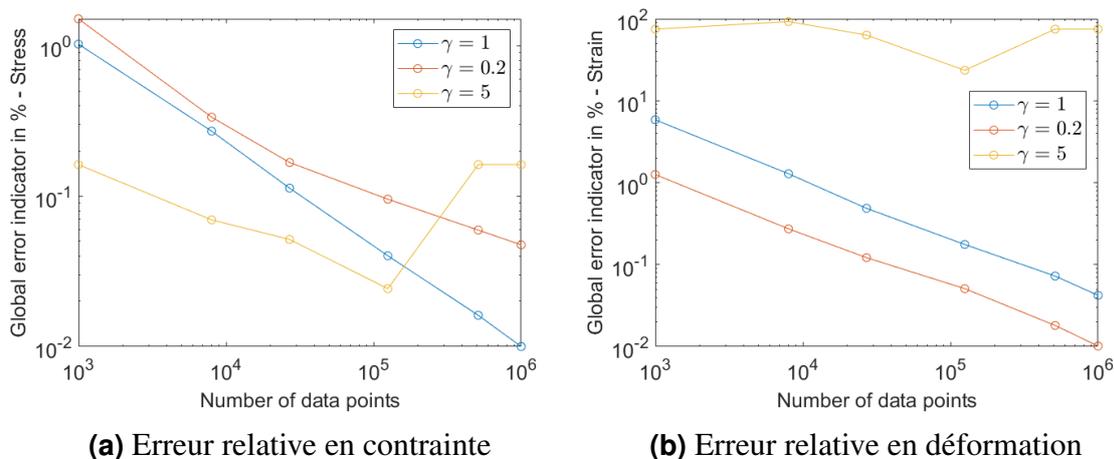


FIGURE 2.8 – Erreur relative en fonction de γ

Les résultats sont montrés dans la figure 2.8. Apparemment, en terme de précision, le meilleur résultat est donné pour $\gamma = 1$. Avec $\gamma = 5$, un nombre élevé d’itérations a été utilisé et le résultat est très mauvais en déformation. Ce résultat est attendu. En effet, avec $\gamma > 1$, la contribution en déformation domine largement celle en contrainte. Pour le cas $\gamma = 0.2$, on a observé une exception : avec une base de données grande, l’erreur en contrainte augmente. Néanmoins, l’ordre de grandeur des erreurs dans les deux cas $\gamma = 5$ ou $\gamma = 0.2$ sont assez proches et pour la majorité, on observe ce qui est attendu : une meilleure précision en déformation.

2.6 Conclusions et Perspectives

La méthode du pilotage par les données, comme proposé par Kirchdoefer et Ortiz [KIR 16] et démontrée mathématiquement par Conti et al. [CON 17] est donc bien établie en élasticité linéaire. Ce travail original a initialisé un nouveau paradigme "mécanique computationnelle pilotée par les données". Depuis, de nombreuses contributions ont été proposées pour étendre la version originale vers différentes classes de problèmes.

2.6.1 Palier le problème des minimas locaux ou des données bruitées

Dans la version originale, Kirchdoefer et Ortiz ont abordé la question de la dépendance de la méthode de minimisation de distance sur l'initialisation. Les résultats dans [KIR 16] obtenus par différentes initialisations aléatoires au départ ont montré cette dépendance inévitable pour une base de données à dimension finie. Puisque l'espace de données matériellement admissibles n'est pas essentiellement une variété définie rigoureusement, ainsi que la non-convexité due à sa dimension finie, la raison pour laquelle le processus d'itération devrait fournir une solution n'est absolument pas claire [NGU 20, POE 22]. Cela signifie que le schéma proposé ne converge pas vers le minimum global du problème de double minimisation sous contrainte mais tombe plutôt dans des minimas locaux. Ce comportement n'a pas d'impact significatif avec des ensembles de données disponibles abondamment dans la zone d'intérêt de l'espace de phase et surtout exempts de bruit, car les différentes solutions convergées sont très similaires. Cependant, avec un bruit croissant dans les données, créant éventuellement des points de données aberrants, l'heuristique alternée est très limitée, comme démontrée par Kanno [KAN 19].

Pour palier ce problème, Kirchdoefer et Ortiz eux-même ont proposé une approche par maximisation de l'entropie [KIR 17b], consistant en une affectation aux données d'une variable de pertinence en fonction de la distance par rapport à la solution et l'estimation d'entropie. A l'aide d'un solveur du recuit simulé (*simulated annealing*), cette approche va pénaliser des données aberrantes et donc plus ou moins robuste pour traiter des données avec bruits. Une analyse détaillée de la relaxation du solution DDCM face aux données aberrantes est aussi donnée en [ROG 20]. Une approche différente est proposée par Kanno [KAN 19]. Le problème DDCM est effectivement un problème bien posé du type *Mixed Integer Quadratic Programming MIQP* et donc des solveurs d'optimisation plus performants sont applicables afin de trouver un minimum global. Néanmoins, ces deux approches ont un inconvénient commun qui est le coût de calcul élevé.

Une autre façon est de se baser sur l'existence de la variété constitutive, pour l'instant cachée. L'état matériellement admissible, pour un état physiquement admissible donné, est obtenu par une projection sur un morceau reconstruit au fur et à mesure au lieu d'une recherche NNS. Cette approche est adoptée par Kanno [KAN 20] où la variété est approximée par *kernel regression*, par He et Chen [HE 20] en utilisant une reconstruction localement convexe et puis Gebhart et al. [GEB 20] par une contrainte additionnelle supposant que l'état matériel appartient à une variété lisse implicite. Eggersmann et al. [EGG 21b] ont proposé d'incorporer des opérateurs tangents, définis localement

sur chaque point de donnée. Cela consiste à projeter l'état physique sur l'espace tangent le plus proche. Cette approche permet d'interpoler les données dans la zone creuse de l'espace de phase avec un coût supplémentaire de créer des données qui n'étaient pas originellement dans la base. Ces contributions ont démontré un couplage prometteur entre un solveur DDCM pur et une technique d'apprentissage de variété dans l'optique de lisser le problème d'optimisation vis-à-vis des minima locaux. Une telle tentative a été développée par Bahmani et Sun [BAH 22] en remplaçant entièrement l'étape de minimisation locale par la réponse d'un réseau de neurones.

Pour traiter l'incertitude dans les données, une approche courante est l'utilisation des représentations statistiques. [AYE 18] ont proposé une formulation stochastique du problème DDCM, où les points de données sur les matériaux ayant une nature aléatoire et l'utilisation de la distance Mahalanobis au lieu de la métrique co-énergétique.

2.6.2 Construction de la base de données. *Data Driven Identification*

Comme démontré par les résultats précédents, la qualité de la solution DDCM dépend fortement de la couverture des données dans l'espace de phase. Une autre question importante est l'acquisition du champ complet des variables tensorielles, notamment des variables duales qui sont généralement non-observables. Effectivement, aujourd'hui, les nouvelles techniques de mesure des champs complets telles que la corrélation d'images numériques (*Digital Image Correlation, DIC*) ou la tomographie à rayon X, permettent d'accéder à l'information assez complète du champ de déformation. Cependant, la mesure des contraintes sont soumises généralement à d'autres hypothèses telles que l'homogénéité du matériau, les conditions parfaites de chargement et souvent conduites à des mesures scalaires. Afin de fournir une acquisition des contraintes multi-dimensionnelles directement depuis les essais sans la loi de comportement, Leygue et al. [LEY 18, RÉT 18] ont développé une formulation inverse, dénommée *Data Driven Identification*. La base de données est maintenant une sortie, obtenue à partir de la configuration géométrique, du chargement, des conditions aux limites et des champs de déplacement et déformation mesurés expérimentalement. Cette approche a été implémentée dans un premier temps en élasticité linéaire pour les problèmes synthétiques (les mesures étaient effectivement des solutions par MEF générées avec une loi de référence). Dans [STA 19], Stainier et al. ont démontré qu'un couplage entre la stratégie DDI avec le solveur DDCM permet d'obtenir un résultat meilleur que celui obtenu avec l'échantillonnage cubique présenté en exemple, ce qui donne lieu à une approche DDCM auto-consistante. De plus, elle a été testée pour les grandes déformations et pour de vrais résultats expérimentaux dans [DAL 19], pour l'élasto-plasticité et la dynamique dans [RÉT 18, LEY 19]. Ces progrès encourageants, cependant ne font pas l'objectif de cette thèse. Ainsi, l'un des objectifs consiste en l'extension du solveur DDCM pour l'élasto-plasticité en espérant que plus tard, ces techniques seront applicables à l'échelle industrielle.

On peut aussi mentionner quelques avancements récents dans ce type de problème inverse avec d'autres approches. En se basant sur l'apprentissage automatique (*Machine Learning*). Flaschel et al. in [FLA 22, FLA 21] ont proposé une plateforme dénommée

EUCLID comme (*Efficient Unsupervised Constitutive Law Identification and Discovery*). Cette plateforme permet d'apprendre des modèles de comportement à partir des mesures en déplacement et en forces sans besoin de connaissance en contrainte. Ainsi, des données peuvent être obtenues à partir des calculs multi-échelle, comme proposé par Karapiperis et al. dans [KAR 21]. Cette approche repose sur des données expérimentales préexistantes ou sur l'identification d'un sous-ensemble cible de l'espace de phase, ce qui permet d'obtenir un échantillonnage de l'espace de phase orienté objectivement. Un autre exemple de la génération de la base de données sur mesure en hyper-élasticité est exploré Platzer et al. dans [PLA 20]

2.6.3 Extension pour d'autres types de comportement

Depuis son introduction, la méthode DDCM a été étendue pour d'autres classes de problèmes. Premièrement par ses auteurs originaux dans [KIR 17a] pour l'élastodynamique. Nguyen et al. [NGU 18] ont proposé une formulation Lagrangienne dans l'optique de traiter l'élasticité en grande déformation. L'espace des phase est maintenant composé du tenseur de déformation de Green-Lagrange et le second tenseur de contrainte de Piola-Kirchhoff. La méthode de double minimisation est de nouveau utilisée, juste avec des contraintes physiques qui sont maintenant non-linéaires. Une autre formulation nominale a été aussi proposée par Conti et al. [CON 20]. Une comparaison entre ces deux formulations a été abordée dans la thèse de Platzer [PLA 20]. Il y a aussi des avancements très récents au moment de la rédaction de ce manuscrit sur les matériaux dont la réponse est de nature aléatoire [PRU 23].

Pour des comportements irréversibles, effectivement, l'avantage de la méthode DDCM est que le traitement pour différents comportements se traduit par le changement de la base de données et la façon de la paramétrer. Eggersmann et al. dans [EGG 19] ont exploré différentes manières de représenter cette paramétrisation de la base de données pour que cette dernière ne contienne que des états atteignables pour une configuration donnée dans l'optique de traiter des matériaux avec la dépendance d'histoire tels que l'élasto-plasticité. Récemment, Carrara et al. ont proposé une extension pour la mécanique de la rupture dans [CAR 20, CAR 21]. Finalement, le paradigme DDCM avec la méthode de minimisation de distance est aussi exploré avec des disciplines autre que la mécanique des structures, par exemple l'électromagnétisme [GAL 21, MAR 22], la physique moléculaire [BUL 22], la biomécanique [SAL 22], etc.

2.6.4 Paramétrisation des paramètres artificiels

Le seul paramètre artificiel qu'on doit introduire dans la formulation DDCM est le tenseur de rigidité artificiel \mathbb{C} . Il est assez surprenant qu'il y a très peu de discussions dans la littérature dédiées au choix de ce paramètre. Dans [GAL 21], Galetzka et al. propose d'une mise à jour au fur et à mesure de ce paramètre au cours de calcul dans l'optique de traiter des matériaux dont la réponse est fortement non-linéaire. Néanmoins, cette étude était dédiée à la résolution des équations de Maxwell et donc n'est pas nécessairement

généralisable. Une autre tentative est présentée dans [AYE 18] avec l'utilisation de la distance Mahalanobis en supposant de la nature aléatoire des données.

Au meilleur de notre connaissance au moment de la rédaction, seule l'étude par Nguyen et al. dans [NGU 22] a fourni une analyse assez détaillée sur le rôle de ce paramètre dans le schéma de minimisation de distance. En utilisant le théorème de rayon spectral des opérateurs linéaires et un schéma adaptatif basé sur la stratégie "diviser-et-reigner", ses auteurs ont tiré la conclusion que le choix de \mathbb{C} avec un ordre de grandeur comparable par rapport à l'opérateur tangent local de la variété constitutive implicite conduit souvent à la meilleure précision et l'accélération du taux de convergence. Ces résultats se corroborent bien avec les nôtres présentés précédemment. Néanmoins, ces conclusions sont déduites généralement par constatation sur des benchmarks 2D/3D et ne sont pas supportées par des démonstrations mathématiques rigoureuses. Malheureusement, il existe aussi des contre-exemples dans les cas très dégénérés comme des structures portiques avec 2 barres en traction-compression. Ces cas dégénérés ont un point commun que ces configurations permettent d'obtenir la solution DDCM dans juste une seule itération quel que soit la rigidité artificielle. Cependant, ces cas spéciaux sont rarement rencontrés dans la pratique et n'invalident pas essentiellement les conclusions. Ils suggèrent aussi que des perspectives avec d'autres outils mathématiques sont à considérer plus loin que le théorème de rayon spectral pour une démonstration plus générale.

2.7 Bilan et Orientation du travail

L'approche DDCM introduite pour la première fois par Kirchdoerfer et Ortiz en 2016 fournit non seulement un nouveau solveur EF en élasticité (linéaire ou non-linéaire), mais surtout un nouveau paradigme de calcul, qui a déclenché de nombreuses applications et extensions au cours des dernières années. Évidemment, bien que ce type de solveur ne puisse pas remplacer la connaissance et l'expérience d'une discipline bien fondée : la modélisation des lois de comportement dans le cadre de la théorie des matériaux standards généralisés, la perspective est changée, au moins à l'échelle académique : les lois de comportement sophistiquées, souvent fastidieuses à identifier et éventuellement à coder sont maintenant représentées par les données brutes. La formulation d'un problème aux limites est changée aussi, en une minimisation d'une certaine métrique sous contraintes physiques universelles.

Le verrou scientifique le plus important de cette thèse est d'explorer pour une extension vers l'élasto-plasticité, ou plus générale, des comportements irréversibles gouvernés par des lois à seuil, dans l'optique d'une application éventuelle à la simulation thermo-mécanique. Le reste de ce manuscrite, on présentera

- Le chapitre suivant dédié à l'élasto-plasticité. On propose une extension de la formulation originale dans le cas anisotherme pour illustrer les principes généraux.
- Le chapitre suivant dédié à une configuration thermomécanique à couplage faible.

Comme déjà mentionné précédemment, la prise en compte des effets d'histoire se réalise par la paramétrisation de la base de données et ce dernière évolue avec le calcul. Au

meilleur de notre connaissance, Eggersmann et al. [EGG 19] ont proposé la première tentative sur ce sujet en étudiant différentes manières de cette paramétrisation : les matériaux avec mémoire, le formalisme des variables internes et le formalisme différentiel. Ensuite, Ciftci et Hackl [CIF 22] ont proposé l'extension de la base de données par des opérateurs tangents définis localement et le pilotage par la fonction seuil, au moins avec sa forme classique. Récemment, Poelstra et al. [POE 22] ont proposé une étude sur la convergence en données dans le cadre quasi-statique et l'utilisation d'un variable de substitution, qui n'a pas forcément un sens physique pour paramétrer le schéma de double minimisation. Cependant, ces approches ont leurs propres avantages et inconvénients

- La contribution de Eggersmann et al. [EGG 19] recours aux lois d'évolution classiques pour gouverner la base de données. De plus, une base de données qui évolue dans le temps n'est effectivement pas compatible avec l'idée de construire la structure de recherche de données offline pour accélérer le calcul
- La contribution de Ciftci et Hackl [CIF 22] assume la disponibilité de l'opérateur tangent élasto-plastique et l'existence d'une surface seuil pour dériver une formulation dans le cas de l'écroutissage isotrope. Les données sont triées au préalable par ses opérateurs tangents associés. D'abord, l'acquisition des opérateurs tangents dans la condition expérimentale est difficile, demandant la sollicitation dans toutes les directions. Cette difficulté peut être palliée par des techniques d'apprentissage de forme dans la phase offline, comme la contribution de Eggersmann [EGG 21b] avec le Tensor Voting [TEN 00]. Ensuite, l'hypothèse de l'existence de la surface seuil est très forte, car nous supposons de manière subtile, l'existence du potentiel de dissipation. Néanmoins, seule la forme de la fonction de seuil est utilisée et aucun modèle d'écroutissage n'est considéré.
- La contribution de Poelstra et al. [POE 22] a démontré le résultat très intéressant suivant : la variable pour prendre en compte l'histoire peut être une variable de substitution et n'a pas besoin d'un sens physique. Cependant, cette approche est plus ou moins intrusive vis-à-vis du schéma de minimisation originale car la métrique co-énergétique doit être modifiée.

Dans cette thèse, nous choisissons d'explorer la contribution de Ciftci et Hackl sur des opérateurs tangents. L'un de ces avantages est que l'inclusion des opérateurs tangents dans le schéma de minimisation permet de débarrasser partiellement le côté empirique de la méthode DDCM originale, i.e le tenseur artificiel. Effectivement, nous présentons cette inclusion dans le cadre du formalisme variationnel de Nguyen et al. [NGU 20] afin définir l'erreur dans une approche standardisée et facile à implémenter une large classe de logiciel en calcul scientifique. Nous adressons aussi la convergence de cette modification du schéma original et le traitement des transitions de comportement de manière plus rigoureuse et compatible avec la thermodynamique.

Chapitre 3

Mécanique computationnelle pilotée par les données pour l'élasto-plasticité

Dans ce chapitre, on présente l'extension du paradigme DDCM pour prendre en compte l'élasto-plasticité. La majorité des idées est déjà abordée dans la contribution de Ciftci et Hackl [CIF 22]. Nous représentons ces contributions dans un formalisme variationnel en introduisant la distance dans l'espace tangent et ensuite fournissons des analyses et des améliorations dans l'optique de généraliser cette approche avec l'espace tangent à d'autres types d'écroutissage dans le chapitre après.

Sommaire

3.1	Formulation quasi-statique du problème DDCM	43
3.2	Espace tangent et opérateur tangent	43
3.3	Formulation variationnelle	44
3.4	Règles de transition pour des comportements à seuil	47
3.4.1	Classification de la base de données pour le comportement élasto-plastique	48
3.4.2	Règle de transition de comportement basée sur des lois à seuil	48
3.4.3	Schéma de prédiction-correction	49
3.5	Convergence de l'algorithme de minimisation	52
3.6	Algorithme DDCM pour l'élasto-plasticité	53
3.7	Cas test	57
3.7.1	Génération des données synthétiques	57
3.7.2	Résultats et discussions	60
3.8	Conclusions	69

3.1 Formulation quasi-statique du problème DDCM

Afin de traiter les comportements dissipatifs et dépendants de l'histoire des matériaux, une manière naturelle est d'étendre le paradigme DDCM à une formulation dépendante du temps. Pour simplifier, nous nous limitons à une analyse quasi-statique dans un cadre temporel discret et recherchons des solutions aux temps $t_1, t_2, \dots, t_n, t_{n+1}, \dots$. Étant donné un vecteur d'état $\mathcal{S}^{(n)} := \{\mathbf{u}, \boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\epsilon}^*, \boldsymbol{\sigma}^*, \dots\}^{(n)}$ dans ce cadre, les conditions d'équilibre (2.1) et de compatibilité (2.2) sont données comme suit

$$\boldsymbol{\epsilon}^{(n+1)} = \nabla_s \mathbf{u}^{(n+1)} \quad (3.1)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(n+1)} + \mathbf{f}^{(n+1)} = 0 \quad \text{dans } \Omega \quad (3.2)$$

et, la formulation DDCM pour le temps t_{n+1} s'écrit

Etant donné $\mathcal{S}^{(n)}$, trouver $\mathcal{S}^{(n+1)}$ solution de

$$\mathbf{z}_c^{(n+1)} = \arg \min_{\mathbf{z}^* \in \mathcal{D}} \min_{\mathbf{z} \in \mathcal{C}} \|\mathbf{z} - \mathbf{z}^*\|_{\mathcal{Z}}^2 \quad (3.3)$$

avec $\mathbf{z}_d^{(n+1,0)} = \mathbf{z}_d^{(n)}$ en respectant (3.1),(3.2) + CL

Nous allons résoudre le problème (3.3) de façon incrémentale, itérative, d'où la paire d'indices (n, k) avec l'indice temps n et l'indice d'itération k . Si l'indice k est absent, cela signifie que c'est la solution convergée après la procédure DDCM ou simplement que le champ considéré est indépendant de l'itération. Contrairement à l'initialisation aléatoire dans l'algorithme original, nous choisissons spécifiquement la distribution initiale des données matérielles pour le temps t_{n+1} comme égale à la solution finale du pas de temps précédent. De cette façon, l'effet historique sera pris en compte pendant le calcul.

3.2 Espace tangent et opérateur tangent

La projection entre les variétés est une tâche lourde et non triviale pour diverses raisons, principalement à cause des structures topologiques compliquées de la variété constitutive \mathcal{M} , surtout lorsqu'il s'agit de comportements non linéaires de matériaux avec des phénomènes dissipatifs (élasto-plastique, fracture...). De plus, comme les variables internes et également le pseudo-potentiel qui conduisent habituellement leur évolution ne sont pas disponibles, il est difficile de déterminer correctement la réponse du champ dual pour un état de déformation.

Dans cette étude, en s'inspirant de ce qui a été proposé par [CIF 22], nous utilisons l'espace tangent localement défini de la variété constitutive. L'espace tangent ponctuel \mathcal{T} de la variété constitutive \mathcal{M} est défini en un point local de l'ensemble des données matérielles \mathbf{z}_j^* comme le sous-espace engendré par les vecteurs tangents $\partial_{\boldsymbol{\epsilon}} \mathbf{z}$ à \mathbf{z}_j^* , i.e

$$\mathcal{T}_{\mathbf{z}^*} = \text{Span} (\partial_{\boldsymbol{\epsilon}} \mathbf{z} \mid \partial_{\boldsymbol{\epsilon}} \mathbf{z} = (\partial_{\boldsymbol{\epsilon}} \boldsymbol{\epsilon}, \partial_{\boldsymbol{\epsilon}} \boldsymbol{\sigma}) = (\mathbb{I}, \mathbb{C}^{\text{tan}})) \subset L^2(\mathbb{R}^6) \times L^2(\mathbb{R}^6) \quad (3.4)$$

où le tenseur tangent du quatrième ordre \mathbb{C}^{tan} définit le comportement tangent du matériau au point \mathbf{z}_j^* . Par la présente, une approximation locale du premier ordre $\mathcal{T}_{\mathbf{z}^*}$ de la variété \mathcal{M} est donnée par

$$\mathcal{T}_{\mathbf{z}^*} = \left\{ \mathbf{z} \in L^2(\mathbb{R}^6) \times L^2(\mathbb{R}^6) \mid \mathbf{z} = \mathbf{z}^* + \partial_{\epsilon} \mathbf{z} : \Delta \mathbf{z} = (\epsilon^* + \Delta \epsilon, \sigma^* + \mathbb{C}^{\text{tan}} : \Delta \epsilon) \right\} \quad (3.5)$$

où $\Delta \mathbf{z}$ sont les coefficients de la représentation d'un point dans le sous-espace tangent local $\mathcal{T}_{\mathbf{z}^*}$ (i.e les coordonnées de \mathbf{z}_j^* dans son espace tangent). La mesure de $\Delta \mathbf{z}$ donne lieu à la distance *tangente* entre le dit point et le point des données localement. Nous utiliserons ces définitions pour incorporer l'espace tangent dans le schéma de double minimisation.

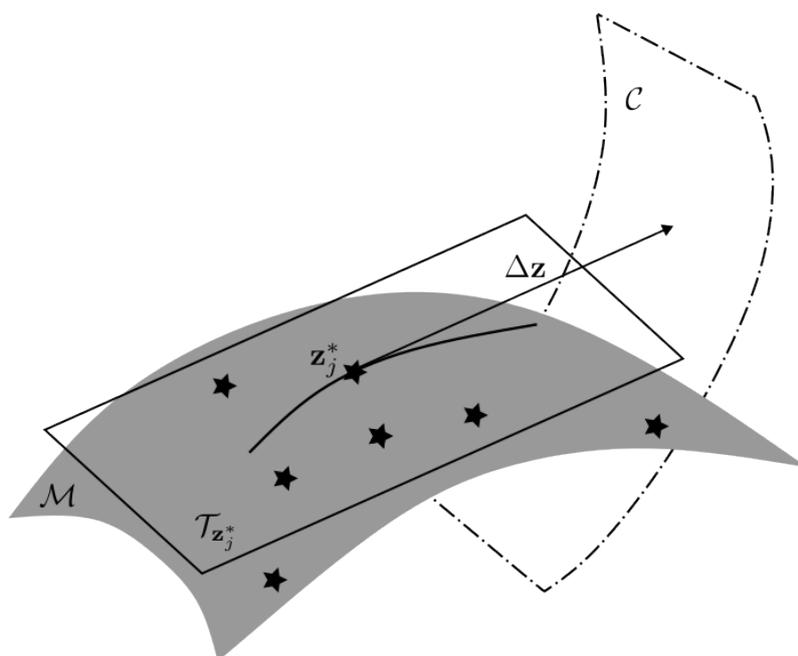


FIGURE 3.1 – Illustration de la variété constitutive \mathcal{M} . L'espace tangent \mathcal{T} est une approximation du premier ordre de la variété au tour d'un point local \mathbf{z}_j^*

D'un point de vue pratique, l'ajout de l'opérateur tangent dans la base de données couplé aux règles de transition élastique-plastique permet de décrire implicitement des lois à seuil multivoques, c'est-à-dire des chargements non-monotones (charge, décharge). Dans la suite, les exemples considérés seront construits sur des données synthétiques avec des chargements non-monotones.

3.3 Formulation variationnelle

On cherche à garder le schéma de résolution DDCM qui s'appuie sur la double minimisation utilisée pour des comportements réversibles, décrite dans le chapitre précédent, pour résoudre le problème (3.3) sans introduire d'autres variables internes ou ajouter des

termes histoires dans la métrique. Dans ce qui suit, sauf indication contraire, tous les champs seront décrits au temps t_{n+1} et à l'itération k . Ces indices seront omis pour des raisons de clarté.

L'espace tangent local $\mathcal{T}_{\mathbf{z}^*}$ est généralement un espace vectoriel réel qui contient toutes les directions possibles dans lesquelles on peut passer par le point de données local \mathbf{z}^* sur la variété \mathcal{M} [ERI 09]. Par conséquent, il pourrait inclure une évolution inélastique potentielle de \mathbf{z}^* . Étant donné la distribution des états du matériau $\mathbf{z}_d = (\boldsymbol{\epsilon}^*, \boldsymbol{\sigma}^*)$, il faut calculer la projection sur l'espace des contraintes physiques dans la direction régie par l'espace tangent, comme illustré sur la figure 3.1. Autrement-dit, on cherche à trouver $\mathbf{z}_c = (\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\sigma})$ qui minimise la distance tangente mesurée par la métrique de phase

$$\begin{aligned} & \|\mathbf{z} - \mathbf{z}^* - \partial_{\boldsymbol{\epsilon}} \mathbf{z} : \Delta \mathbf{z}\|_Z \\ &= \|(\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^* - \Delta \boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^* - \mathbb{C}^{\text{tan}} : \Delta \boldsymbol{\epsilon})\|_Z^2 \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{C} : (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^* - \Delta \boldsymbol{\epsilon}) : (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^* - \Delta \boldsymbol{\epsilon}) dV \\ &+ \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{C}^{-1} : (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^* - \mathbb{C}^{\text{tan}} : \Delta \boldsymbol{\epsilon}) : (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^* - \mathbb{C}^{\text{tan}} : \Delta \boldsymbol{\epsilon}) dV \end{aligned} \quad (3.6)$$

en respectant également (2.2),(2.1) ainsi que les conditions aux limites. Ainsi à \mathbf{z}_d donné, on cherche \mathbf{z}_c tel que

$$\mathbf{z}_c = \arg \left\{ \min_{\mathbf{z} \in C} \|\mathbf{z} - \mathbf{z}_d - \partial_{\boldsymbol{\epsilon}} \mathbf{z} : \Delta \mathbf{z}\|_Z \right\} \quad (3.7)$$

L'apparition de l'opérateur tangent dans l'équation 3.7 la rend différente par rapport à la formulation originale de Kirchdoerfer et Ortiz (l'équation (2.9a)). Comme dans le cadre variationnel proposé par Nguyen et al. [NGU 20], une fonctionnelle lagrangienne peut être obtenue au moyen de la méthode des multiplicateurs de Lagrange

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Soit } (\boldsymbol{\epsilon}^*, \boldsymbol{\sigma}^*), \text{ trouver } (\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\sigma}) \text{ qui minimise} \\ \mathcal{L}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}, \Delta \boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}) = \|(\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^* - \Delta \boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^* - \mathbb{C}^{\text{tan}} : \Delta \boldsymbol{\epsilon})\|_Z^2 \\ - \int_{\Gamma_D} \boldsymbol{\mu} \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{u}_D) dS - \int_{\Omega} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\text{div } \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}) dV + \int_{\Gamma_N} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{t}_N) \cdot \boldsymbol{\lambda} dA \end{array} \right. \quad (3.8)$$

par rapport à l'ensemble des variables $(\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}, \Delta \boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\lambda}) \in H^1(\Omega) \times L^2(\Omega) \times L^2(\Omega) \times V_{\boldsymbol{\mu}} \times V_{\boldsymbol{\lambda}}$. Nous rappelons que $\Delta \boldsymbol{\epsilon}$ sont les coefficients de déformation dans la représentation d'un vecteur $\Delta \mathbf{z}$ dans son espace tangent $T_{\mathbf{z}^*}$ et sont donc des variables inconnues dans la fonctionnelle de minimisation. Les espaces fonctionnels admissibles pour $V_{\boldsymbol{\lambda}}$ et $V_{\boldsymbol{\mu}}$ sont choisis en tenant compte des considérations évoquées dans le chapitre précédent et sont donc définis comme suit

$$\begin{aligned} V_{\boldsymbol{\lambda}} &= \left\{ \boldsymbol{\lambda} \mid \boldsymbol{\lambda} \in H^1(\Omega), \quad \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0} \text{ on } \Gamma_D \right\} \\ V_{\boldsymbol{\mu}} &= \left\{ \boldsymbol{\mu} \mid \boldsymbol{\mu} \in \mathbf{H}^{\frac{1}{2}}(\Gamma_D) \right\} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Les équations d'Euler-Lagrange correspondantes sont dérivées par stationnarité. En

développant

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{L} &= \int_{\Omega} [\mathbb{C} : (\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) - \boldsymbol{\epsilon}^* - \boldsymbol{\epsilon}) : \delta\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) + \mathbb{C}^{-1} : (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^* - \Delta\boldsymbol{\sigma}) : \delta\boldsymbol{\sigma}] dV \\ &+ \int_{\Omega} [\delta\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\lambda}) : \boldsymbol{\sigma} + \delta\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\lambda}) - \mathbf{f} \cdot \delta\boldsymbol{\lambda}] dV - \int_{\Gamma_D} [(\mathbf{u} - \mathbf{u}_D) \cdot \delta\boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\mu} \cdot \delta\mathbf{u}] dA \\ &- \int_{\Gamma_n} \mathbf{t}_N \cdot \delta\boldsymbol{\lambda} dA - \int_{\Omega} [\mathbb{C} : (\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) - \boldsymbol{\epsilon}^* - \Delta\boldsymbol{\epsilon}) + \mathbb{C}^{\text{tan}} : \mathbb{C}^{-1} : (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^* - \Delta\boldsymbol{\sigma})] \delta\Delta\boldsymbol{\epsilon} dV \end{aligned}$$

Ainsi, $\delta\mathcal{L} = 0 \quad \forall (\delta\mathbf{u}, \delta\boldsymbol{\sigma}, \delta\Delta\boldsymbol{\epsilon}, \delta\boldsymbol{\lambda}, \delta\boldsymbol{\mu}) \in H^1(\Omega) \times L^2(\Omega) \times L^2(\Omega) \times V_{\boldsymbol{\lambda}} \times V_{\boldsymbol{\eta}}$ conduit à

$$- \delta\mathbf{u} : \int_{\Omega} [\mathbb{C} : (\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) - \boldsymbol{\epsilon}^* - \Delta\boldsymbol{\epsilon}) : \delta\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})] dV - \int_{\Gamma_D} \boldsymbol{\mu} \cdot \delta\mathbf{u} dA \quad (3.10)$$

$$- \delta\boldsymbol{\sigma} : \int_{\Omega} [\mathbb{C}^{-1} : (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^* - \Delta\boldsymbol{\sigma}) + \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\lambda})] : \delta\boldsymbol{\sigma} dV \quad (3.11)$$

$$- \delta\boldsymbol{\lambda} : \int_{\Omega} [\delta\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\lambda}) : \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{f} \cdot \delta\boldsymbol{\lambda}] dV - \int_{\Gamma_n} \mathbf{t}_N \cdot \delta\boldsymbol{\lambda} dA = 0 \quad (3.12)$$

$$- \delta\Delta\boldsymbol{\epsilon} : \int_{\Omega} [\mathbb{C} : (\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) - \boldsymbol{\epsilon}^* - \Delta\boldsymbol{\epsilon}) + \mathbb{C}^{\text{tan}} : \mathbb{C}^{-1} : (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^* - \Delta\boldsymbol{\sigma})] : \delta\Delta\boldsymbol{\epsilon} dV \quad (3.13)$$

$$- \delta\boldsymbol{\mu} : \int_{\Gamma_D} [(\mathbf{u} - \mathbf{u}_D) \cdot \delta\boldsymbol{\mu}] dA \quad (3.14)$$

En rassemblant les variations de $\delta\boldsymbol{\sigma}$ (l'équation (3.10)) et de $\delta\Delta\boldsymbol{\epsilon}$ (l'équation (3.13)), avec le fait que $\delta\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) = \boldsymbol{\epsilon}(\delta\mathbf{u})$, on obtient la définition des coordonnées dans l'espace tangent comme suit $\Delta\mathbf{z} = (\Delta\boldsymbol{\epsilon}, \Delta\boldsymbol{\sigma})$.

$$\begin{aligned} \Delta\mathbf{z} &= (\Delta\boldsymbol{\epsilon}, \Delta\boldsymbol{\sigma}) \\ \Delta\boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^* \\ \Delta\boldsymbol{\epsilon} &= \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) - \boldsymbol{\epsilon}^* \end{aligned} \quad (3.15)$$

De plus, $\delta\mathbf{u}$ peut varier arbitrairement alors que $\boldsymbol{\mu} \in \mathbf{H}^{\frac{1}{2}}(\Gamma_D)$ et $\boldsymbol{\lambda} \in H_{0,\Gamma_D}^1(\Omega)$. Cela implique la condition pour le multiplicateur de Lagrange $\boldsymbol{\lambda}$ telle que

$$\int_{\Omega} [\delta\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) : \mathbb{C}^{\text{tan}} : \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\lambda})] dV - \int_{\Gamma_D} [\boldsymbol{\mu} \cdot \delta\mathbf{u}] dA = 0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0} \quad (3.16)$$

Dans la formulation originale (cf. [NGU 20] et [STA 19]), seules les conditions aux limites essentielles pour $\boldsymbol{\lambda}$ ont été déduites et à la solution optimale, $\boldsymbol{\lambda}$ disparaîtra pour assurer l'équilibre. Enfin, en remplaçant les coordonnées dans l'espace tangent données par (3.15) dans l'équation (3.12), on obtient le résultat suivant

$$\int_{\Omega} [\delta\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\lambda}) : \mathbb{C}^{\text{tan}} : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})] dV = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta\boldsymbol{\lambda} dV + \int_{\Gamma_n} \mathbf{t} \cdot \delta\boldsymbol{\lambda} dA - \int_{\Omega} [\delta\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\lambda}) : (\boldsymbol{\sigma}^* - \mathbb{C}^{\text{tan}} : \boldsymbol{\epsilon}^*)] dV \quad (3.17)$$

où le champ des contraintes est mis à jour suivant la formule

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^* + \mathbb{C}^{\text{tan}} : (\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) - \boldsymbol{\epsilon}^*) \quad (3.18)$$

L'équation (3.17) sera discrétisée en utilisant la méthode des éléments finis standard pour obtenir le système linéaire associé. Notons que, en utilisant l'espace tangent, l'influence

du tenseur artificiel \mathbb{C} sur la minimisation variationnelle a été éliminée. De même, le multiplicateur de Lagrange sur les équations de conservation a été mis à zéro et nous n'avons à résoudre qu'un seul système au lieu de deux dans l'approche originale (le système (2.20)). Enfin, la solution $\mathbf{z}_c = (\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\sigma})$ peut être obtenue en résolvant le système (3.17) puis en calculant le champ de déformation et de contrainte selon (3.1) et (3.18). Ainsi, on remarque que dans le système (3.17), si l'on prend $\mathbb{C}^{\text{tan}} = \mathbb{C}^e$ avec \mathbb{C}^e est le tenseur de Hooke en élasticité, le terme $\int_{\Omega} [\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\lambda}) : (\boldsymbol{\sigma}^* - \mathbb{C}^{\text{tan}} : \boldsymbol{\epsilon}^*)] dV$ est en effet issu du travail d'écroutissage stocké dans le domaine. Par conséquent, les effets d'histoire seront conservés.

Une fois que cette étape globale est effectuée, nous pouvons procéder avec l'étape locale de la même manière qu'avec l'algorithme original. Pourtant, la recherche locale dépend encore du tenseur artificiel. Dans la suite, nous prendrons $\mathbb{C} = \mathbb{C}^e$ et reviendrons à ce choix plus tard. Le problème local s'écrit alors, pour un \mathbf{z} donné, on cherche \mathbf{z}^* tel que $\mathbf{z}^* = \arg \min_{\mathbf{z}^* \in \mathcal{D}} \|\mathbf{z} - \mathbf{z}^*\|_{\mathbb{C}^e}$

3.4 Règles de transition pour des comportements à seuil

Le paradigme DDCM utilisant la méthode de minimisation de distance est basé sur la notion du voisinage dans un espace métrique des couples de données - solution physique. Des problèmes surgissent lorsque l'on traite des données séquentielles, dépendantes de l'histoire. Le solveur est insensible à l'irréversibilité des comportements puisque l'espace des phases n'est caractérisé que par des champs cinématiques observables (déformation) et le champ dual (contrainte). Par conséquent, l'ensemble des données doit être inclus avec des historiques locaux comme proposé dans [EGG 19] pour traduire la dépendance historique du paradigme classique en une représentation correspondante pour l'ensemble de données matérielles. Dans ce cas, un état de déformation et de contrainte peut correspondre à différents comportements du matériaux. Dans [EGG 19], il est proposé d'inclure les historiques d'évolution locale dans l'ensemble de données. Dans le cadre d'un problème élasto-plastique, la détermination des données accessibles pour le pas de temps suivant est possible grâce à la loi d'évolution, ce qui donne lieu à une approche mixte données-modèle. À chaque étape du problème d'optimisation, l'ensemble des données correspondantes qui sont *accessibles* par l'étape de minimisation locale à un temps t_{n+1} sera identifié. Pour cela, des variables internes ont été incluses dans l'ensemble des données du matériau et l'étape d'identification est effectuée à la volée en même temps que le calcul à l'aide des lois d'évolution complémentaires. Un autre cadre a été proposé dans [KAR 21] qui met l'accent sur l'introduction du pseudo-potentiel de dissipation dans la paramétrisation de l'histoire du matériau et l'échantillonnage optimal de l'espace des phases en utilisant le calcul multi-échelle. Néanmoins, ces approches aboutissent à une formulation mixte basée sur les données. De plus, le coût de calcul augmentera en raison de l'augmentation des données à la volée.

3.4.1 Classification de la base de données pour le comportement élasto-plastique

Dans la suite, on propose d'appliquer le formalisme DDCM tangent sans introduire des modèles qui pilotent des variables internes ou rajouter d'autres termes de substitution dans la métrique co-énergétique. Il convient de souligner que l'on admettra que pendant les essais expérimentaux sur un matériau, on arrive à distinguer son comportement élastique ou plastique et récupérer les champs tensoriels de déformation, contrainte et l'opérateur tangent. Ainsi, chaque point de données pour nous maintenant consiste en un triplet $(\epsilon, \sigma, \mathbb{C}^{\text{tan}})$. À cette fin, comme la proposition dans [CIF 22] et [EGG 21b], l'ensemble de données est classé de manière *offline*, en deux sous-ensembles

$$\begin{cases} D_e = \{(\epsilon_j, \sigma_j) : \mathbb{C}_j^{\text{tan}} = \mathbb{C}^e\}_{j=1}^{N_e} \\ D_p = \{(\epsilon_j, \sigma_j) : \mathbb{C}_j^{\text{tan}} \neq \mathbb{C}^e\}_{j=1}^{N_p} \end{cases} \quad (3.19)$$

avec N_e et N_p le nombre de points de données dans les sous-ensembles de comportement élastique et plastique, respectivement.

3.4.2 Règle de transition de comportement basée sur des lois à seuil

Dans l'approche par éléments finis classique, pendant le processus de calcul, la transition de comportement du matériau d'un état réversible à un état irréversible est généralement régie par certains ensembles de règles de seuil. Par exemple, dans le cas de l'élasto-plasticité, il existe la surface de charge et les règles d'écoulement. Dans le paradigme DDCM, comme le pseudo-potential de dissipation n'est pas disponible sous sa forme analytique, nous ne pouvons pas déduire une règle d'écoulement correspondante qui dirige l'évolution des champs mécaniques par des lois d'évolution. Cependant, nous décidons de conserver la surface de charge, au moins pour sa forme analytique et nous l'utiliserons pour déterminer la transition du comportement du matériau.

De manière générale, le comportement irréversible sera alors décrit en supposant l'existence d'un domaine $\mathcal{P}_n(\sigma^{(n)}) := \{\sigma^{(n)}, f(\sigma^{(n)}) \leq 0\}$, à l'intérieur duquel l'état de contrainte est supposé rester. La fonction f définit ainsi la fonction seuil des états admissibles. La loi à seuil va définir les règles pour la sélection de la base de données pendant l'étape locale du solveur DDCM. Dans l'équation suivante, sauf indication contraire, toutes les grandeurs sont écrites à l'instant t_{n+1} , à l'itération k sur le point d'intégration g pour une évolution de t_n vers t_{n+1} , on a

$$(\epsilon^*, \sigma^*) = \arg \min_{(\epsilon^*, \sigma^*) \in D_e} \|(\epsilon - \epsilon^*, \sigma - \sigma^*)\|_{Z_{loc}} \quad \text{si } f(\sigma^{(n)}) < 0 \quad (3.20a)$$

$$(\epsilon^*, \sigma^*) = \arg \min_{(\epsilon^*, \sigma^*) \in D_p} \|(\epsilon - \epsilon^*, \sigma - \sigma^*)\|_{Z_{loc}} \quad \text{sinon} \quad (3.20b)$$

Dans la suite, nous représentons l'application dans le cadre de l'écroutissage isotrope. Pour la plupart des matériaux métalliques dont la plasticité est bien décrite par le critère de von

Mises, f est définie par la contrainte équivalente en fonction du tenseur des contraintes déviatoriques \mathbf{s}

$$f(\boldsymbol{\sigma}) = \sigma_{eq} - \sigma_y - R \quad \sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \mathbf{s} : \mathbf{s}} \quad (3.21)$$

avec σ_y la limite élastique initiale. Quant à la variable R , effectivement dans le formalisme classique, cette variable consiste en une force thermodynamique conjuguée à une variable interne représentant l'homothétie du rayon d'érouissage de la surface seuil. Son évolution est gouvernée par une loi d'évolution dépendant de la déformation plastique cumulée. Ici, dans le formalisme DDCM, aucun modèle d'érouissage ne sera considéré. Donc R consiste en une variable scalaire contenant l'histoire d'évolution. Sa valeur va être déterminée sur la base du calcul DDCM. Étant donné la solution à la convergence du solveur DDCM $\mathbf{z}_c^{(n+1)}$ au temps t_{n+1} avec les bases de données utilisées localement sur les points d'intégration $D_g^{(n)}$, le champ de contrainte est disponible et la sélection des bases de données $D_g^{(n+1)}$ à chaque point d'intégration pour l'évolution suivante, de t_{n+1} vers t_{n+2} est donnée par

1. Evaluation de la fonction de seuil sur chaque point d'intégration, i.e $\forall g$

$$\begin{cases} D_g^{(n+1)} := D_e & \text{si } \sigma_{eq,g}^{(n+1)} - R^{(n)} - \sigma_y < 0 \\ D_g^{(n+1)} := D_p & \text{si } \sigma_{eq,g}^{(n+1)} - R^{(n)} - \sigma_y \geq 0 \end{cases} \quad (3.22)$$

2. Mise à jour de la variable historique R pour évolution plastique

Comme mentionné ci-dessus, en utilisant la surface seuil, l'hypothèse de l'érouissage isotrope et une limite élastique initiale connue, nous supposons implicitement l'existence du pseudo-potential dual de dissipation. Néanmoins, la surface de seuil dans ce cas est mise à jour sur la base du résultat du processus DDCM. Aucune modélisation supplémentaire sur la normalité de la direction de la loi d'évolution ou la forme analytique de R n'est nécessaire. Cependant, le traitement d'autres types d'érouissage que les cas isotropes s'avère plus compliqué. On en reviendra sur ce point dans le chapitre suivant. Dans un premier temps, nous limitons les discussions et exemples uniquement au cas de l'érouissage isotrope.

3.4.3 Schéma de prédiction-correction

L'objectif des discussions suivantes est d'aborder la sélection adéquate des opérateurs tangents pour les points en transition entre l'état élastique et l'état plastique. Notons que, pendant la procédure de minimisation de distance, la mise en correspondance des sous-ensembles de données (*data mapping*) à un point de quadrature particulier reste inchangé. Le changement de la base des données, ou en d'autres termes, la transition du comportement du matériau, est déterminée **après** la solution convergente du solveur DDCM, de manière similaire à une procédure de calcul explicite. Contrairement au solveur DDCM, les solveurs classiques basés sur l'algorithme de Newton-Raphson et ses variantes calculent généralement de manière implicite les réponses aux contraintes et l'évolution de diverses variables internes en utilisant des lois constitutives paramétriques et un algorithme

de retour radial. En d'autres termes, étant donné un incrément de déformation imposé $\Delta\epsilon$ et un vecteur d'état $\mathcal{S}^{(n)} := \{\mathbf{u}, \epsilon, \sigma, \epsilon_p \dots\}^{(n)}$ qui est connu à l'instant t_n , l'algorithme de retour radial calcule l'évolution des variables internes en utilisant des lois constitutives paramétriques tout en supposant initialement une réponse de contrainte élastique. La contrainte réelle est alors ramenée à la nouvelle surface de charge, qui est inconnue au départ tout en respectant la condition de normalité. Cette procédure est réalisée localement à l'intérieur d'une boucle de Newton Raphson tandis que la solution globale consiste à rétablir l'équilibre [BEL 14, SIM 00].

De tels éléments d'information n'existent pas dans le paradigme Data Driven. Comme la direction d'évolution du prochain pas de temps est dictée par le résultat du dernier pas de temps, le solveur DDCM doit être considéré comme l'équivalent de la résolution pour l'équilibre dans le cas du solveur de Newton Raphson, tandis que la règle de transition sert à déterminer l'opérateur tangent. Nous traitons ce problème dans le cadre d'une approche prédiction-correction. Soit le vecteur d'état complet $\mathcal{S}^{(n)} := \{\mathbf{u}, \epsilon, \sigma, \epsilon^*, \sigma^*, \mathbb{C}^{\text{tan}}, R\}^{(n)}$, le calcul de $\mathcal{S}^{(n+1)}$ sera initialisé par $\mathbb{C}^{\text{tan},(n)}$ et nous abordons 3 situations dans ce qui suit

- **Pas de transition.** L'évolution de t_n à t_{n+1} se produit d'un côté de la surface de charge, comme illustrée dans la figure 3.2. Cela veut dire qu'un point qui était dans l'état élastique ou l'état plastique au temps t_n , est prédit pour maintenir le même comportement élastique ou plastique au temps t_{n+1} que temps t_n . Dans ce cas, la prédiction du solveur DDCM sera acceptée. La variable d'histoire sera mise à jour en conséquence et nous passerons au pas de temps suivant. Aucune correction n'est nécessaire.

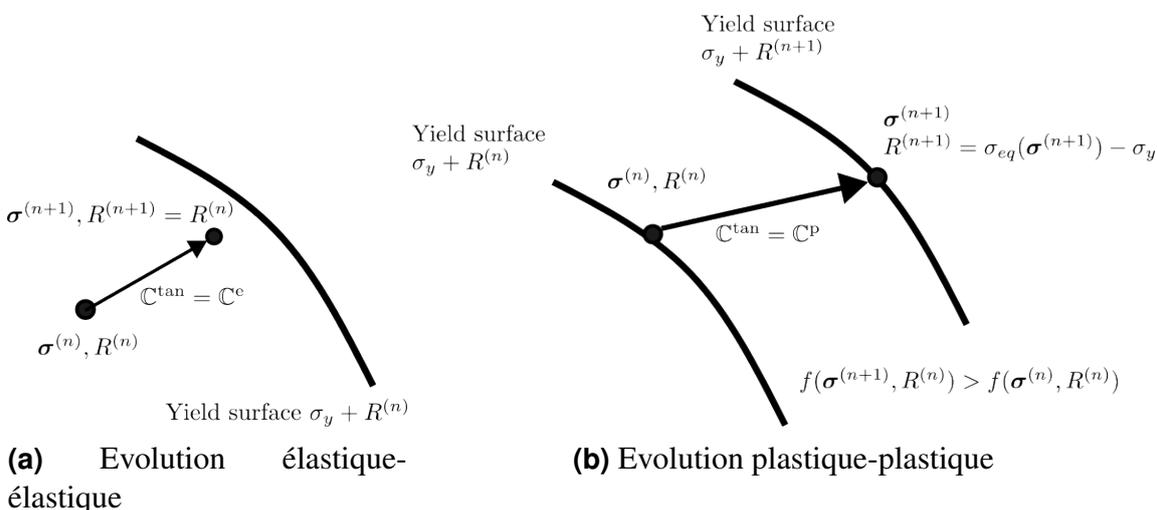


FIGURE 3.2 – Aucune transition du comportement matériel n'a été détectée.

- **Passage "en avant" de l'état élastique à l'état plastique.** Dans ce cas, le solveur DD convergera vers un état matériel appartenant au sous-ensemble des données élastiques mais étant très proche de la solution de référence appartenant au sous-ensemble des données plastiques. Cette situation est représentative, car

on cherchera souvent à obtenir une quantité abondante de données de haute qualité (échantillonnage à haute densité dans la zone d'intérêt, existence proche de zéro du bruit et des erreurs de mesure). De plus, bien que cette prédiction ne soit pas optimale car nous surestimons le travail élastique et sous-estimons le travail d'écrouissage dans le bilan énergétique, cette évolution est pourtant tolérée par le second principe de la thermodynamique. Ce cas est conceptualisé dans la figure 3.3. Nous accepterons cette solution approchée en mettant à jour la surface seuil, en changeant la mise en correspondance des données pour le temps t_{n+2} en base de données plastiques, puis nous continuerons. Cependant, de manière plus rigoureuse, il faut rajouter une tolérance pour accepter cette situation.

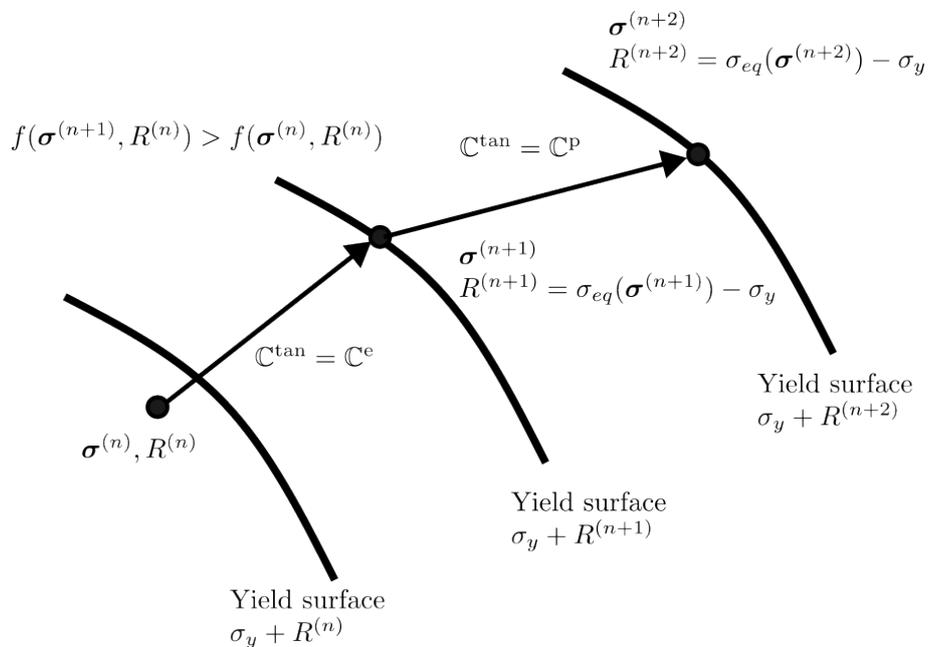


FIGURE 3.3 – La prédiction DDCM est en dehors de la surface de charge, ce qui est généralement un état non admissible.

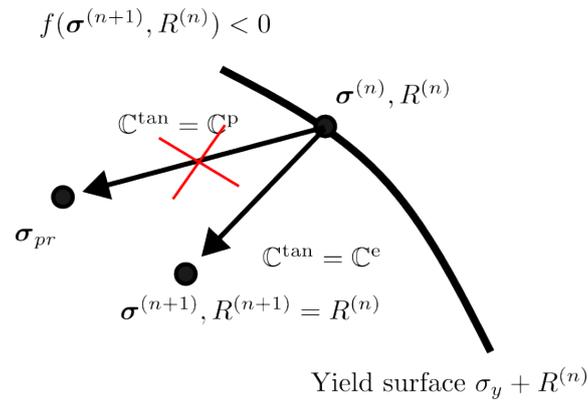


FIGURE 3.4 – Le résultat de la prédiction DDCM va de la surface de charge vers l'intérieur. La prédiction n'est pas acceptée et le solveur DDCM sera appelé à nouveau.

- **Passage "en arrière" de l'état élastique à l'état plastique.** Cette situation arrive lors de la décharge élastique. De même, le solveur suivra l'opérateur de tangente plastique associé, déterminé au pas d'avant à la dernière itération, puis convergera vers un état matériel appartenant au mauvais ensemble de données. En effet, cette solution viole le deuxième principe et ne sera pas acceptée. La règle de correspondance conservera l'état des données associé au début du pas de temps suivant mais affectera l'opérateur tangent élastique à l'ensemble des points de quadrature dans la transition arrière et recommencera le solveur DD avec l'opérateur tangent nouvellement affecté. Cette opération est effectuée de manière itérative jusqu'à ce qu'aucune transition en arrière ne soit détectée. Ce cas est conceptualisé dans la figure 3.4

3.5 Convergence de l'algorithme de minimisation

Il convient de mentionner que l'utilisation d'informations locales sur l'espace tangent a déjà été introduite dans [EGG 21b] comme moyen d'interpoler les données matérielles dans une zone d'échantillonnage grossier. La minimisation locale a été effectuée en deux étapes successives, en recherchant les données matérielles voisines les plus proches, puis en calculant la projection locale des états physiquement admissibles dans l'espace tangent le plus proche. Il en résulte des points de données matérielles qui n'existent pas à l'origine dans l'ensemble des données matérielles mais plutôt des approximations du premier ordre des données locales en utilisant l'espace tangent.

Le cadre tangent utilisé dans ce manuscrit a déjà été présenté de manière similaire dans [CIF 22]. Les auteurs y présentent la procédure de double minimisation à l'aide d'opérateur tangent local similaire à (3.5) sans mentionner la distance tangente équivalente. Les règles de transition avec l'approche prédiction-correction ne sont pas mentionnées dans cette contribution. Cependant, afin d'assurer la convergence globale avec le solveur Distance Tangente - DDCM, il reste à savoir si la minimisation locale

effectuée par la recherche du plus proche voisin est cohérente avec la métrique tangente définie dans l'étape de minimisation globale. Ce point n'a pas été abordé dans [CIF 22]. Nous allons aborder cette question, en commençant par réécrire la métrique tangente globale comme la somme pondérée des métriques tangentés locales. La fonction à minimiser est

$$\begin{aligned} \|\mathbf{z} - \mathbf{z}^* - (\Delta\epsilon, \mathbb{C}^{\text{tan}} : \Delta\epsilon)\|_{\mathcal{Z}}^2 &= \sum_{g=1}^M \omega_g \|\mathbf{z}_g - \mathbf{z}_g^* - (\Delta\epsilon_g, \mathbb{C}_g^{\text{tan}} : \Delta\epsilon_g)\|_{\mathcal{Z}_{loc}}^2 \\ &= \sum_{g=1}^M \omega_g \|(\epsilon_g - \epsilon_g^* - \Delta\epsilon_g, \sigma_g - \sigma_g^* - \mathbb{C}_g^{\text{tan}} : \Delta\epsilon_g)\|_{\mathcal{Z}_{loc}}^2 \end{aligned} \quad (3.23)$$

Quand la solution est optimale (stationnarité vérifiée), $\Delta\epsilon = \epsilon - \epsilon^*$, nous avons ainsi

$$\begin{aligned} \|\mathbf{z} - \mathbf{z}^* - (\Delta\epsilon, \mathbb{C}^{\text{tan}} : \Delta\epsilon)\|_{\mathcal{Z}}^2 &= \sum_{g=1}^M \omega_g \|(\mathbf{0}, \sigma_g - \sigma_g^* - \mathbb{C}_g^{\text{tan}} : \Delta\epsilon_g)\|_{\mathcal{Z}_{loc}}^2 \\ &\leq \|\sigma - \sigma^* - \mathbb{C}^{\text{tan}} : (\epsilon - \epsilon^*)\|_{\mathbb{C}_e^{-1}}^2 \quad \|\cdot\|_{\mathbb{C}_e^{-1}}^2 = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\cdot) : \mathbb{C}_e^{-1} : (\cdot) \\ &\leq \|\sigma - \sigma^* - \mathbb{C}^e : (\epsilon - \epsilon^*)\|_{\mathbb{C}_e^{-1}}^2 \end{aligned} \quad (3.24)$$

puisque $\mathbb{C}^e \geq \mathbb{C}^{\text{tan}}$ au sens quadratique. Si une convergence locale a été atteinte, c'est-à-dire $\epsilon_g \rightarrow \epsilon_g^*, \sigma_g \rightarrow \sigma_g^*, \forall g$ alors la convergence faible est assurée pour les champs de déformation et de contrainte, ce qui conduit à

$$\|\mathbf{z} - \mathbf{z}^* - (\Delta\epsilon, \mathbb{C}^{\text{tan}} : \Delta\epsilon)\|_{\mathcal{Z}}^2 \leq \|\sigma - \sigma^*\|_{\mathbb{C}_e^{-1}}^2 + \|(\epsilon - \epsilon^*)\|_{\mathbb{C}_e}^2 \rightarrow 0 \quad (3.25)$$

et par conséquent $\mathbf{z} - \mathbf{z}^* \rightarrow 0$.

3.6 Algorithme DDCM pour l'élasto-plasticité

Nous résumons tous les développements ci-dessus en algorithmes, prêts à être mis en place dans un logiciel standard d'éléments finis. Pour rappel, nous avons utilisé la paire d'indices n, k avec n l'indice temporel et k l'indice d'itération. La mise en correspondance des bases de données au temps t_n est implémenté par un tableau à une dimension $h^{(n)}$ de taille M avec un style d'encodage *one hot* (ce tableau ne contient que des valeurs 0 et 1, vaut 1 pour les indices des points de Gauss utilisant la base des données plastiques et vaut 0 pour des points élastiques). Nous utiliserons la notation de Voigt pour tous les champs tensoriels dans cette section.

Algorithme 2 ci-dessous reprend le schéma de minimisation de la double distance en utilisant l'opérateur tangent pour un incrément de chargement de t_n à t_{n+1} . L'équation 3.17, sera discrétisée en utilisant la FEM. La conceptualisation de ce processus est donnée dans la figure 3.5.

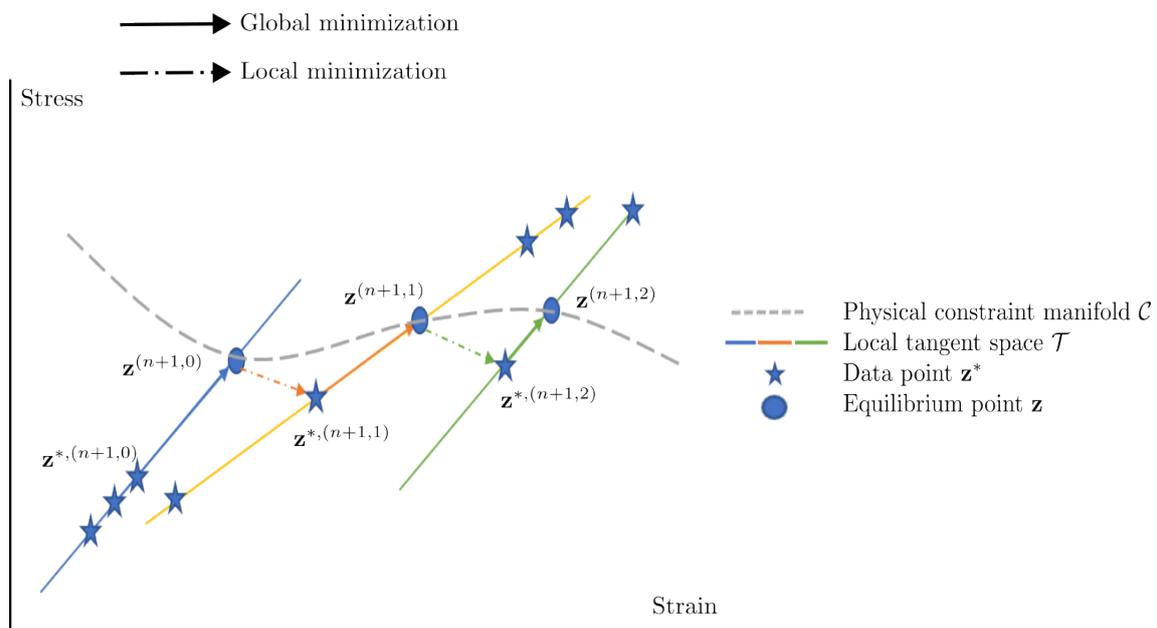


FIGURE 3.5 – Procédure DDCM avec l'opérateur tangent pour un incrément de chargement

Algorithm 2 Tangent Distance Data Driven Solver for an evolution $t_n \rightarrow t_{n+1}$.

Require: Elastic data set D_e and plastic data set D_p , Geometry, Loading path $\mathbf{F}^{(n+1)}$, Dirichlet boundary condition matrix \mathbf{A} , Initial states $\forall g, (\epsilon_g^{*,(n+1,0)}, \sigma_g^{*,(n+1,0)}, \mathbf{C}_g^{(n+1,0)})$, Data mapping flag $h_g^{(n)}$

- 1: $k = 0$
- 2: **while true do**
- 3: Assembling $\mathbf{K}^{(n+1,k)} = \mathcal{A}(\sum_g \omega_g \mathbf{B}^T \mathbf{C}^{(n+1,k)} \mathbf{B})$
- 4: Assembling $\mathbf{F}_H = \mathcal{A}(\sum_g \omega_g \mathbf{B}^T (\sigma_g^{*,(n+1,k)} - \mathbf{C}^{(n+1,k)} \epsilon_g^{*,(n+1,k)}))$
- 5: ***Linear system solving***

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U} \\ \boldsymbol{\mu} \end{pmatrix}^{(n+1,k)} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}^{(n+1)} - \mathbf{F}_H^{(n+1,k)} \\ \bar{\mathbf{U}} \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

- 6: ***Computing physically admissible states***
 - 7: **for all** e **do**
 - 8: **for all** g **do**
 - 9: $\epsilon_g^{(n+1,k)} = \mathbf{B} \mathbf{U}_e^{(n+1,k)}$
 - 10: $\sigma_g^{(n+1,k)} = \sigma_g^{*,(n+1,k)} + \mathbf{C}_{e,g}^{(n+1,k)} \cdot (\epsilon_g^{(n+1,k)} - \epsilon_g^{*,(n+1,k)})$
 - 11: **end for**
 - 12: **end for**
 - 13: ***Classification of physical state according to data mapping flag***
 - 14: $\{(\epsilon, \sigma)\}_e := \{(\epsilon_g^{(n+1,k)}, \sigma_g^{(n+1,k)}) | h_g^{(n)} == 0\}$
 - 15: $\{(\epsilon, \sigma)\}_p := \{(\epsilon_g^{(n+1,k)}, \sigma_g^{(n+1,k)}) | h_g^{(n)} == 1\}$
 - 16: **for all** g **do**
 - 17: Search for $(\epsilon_g^{*,(n+1,k+1)}, \sigma_g^{*,(n+1,k+1)}) \in D_e$ ou D_p closest to $(\epsilon_g^{(n+1,k)}, \sigma_g^{(n+1,k)})$
 - 18: Updating associated tangent operator
 - 19: **end for**
 - 20: Saturation test. Compute the residual given by (2.34)
 - 21: **if** $\delta < \text{tol}$ **then**
 - 22: **break**
 - 23: **else**
 - 24: $k = k + 1$
 - 25: **return** $\epsilon^{*,(n+1)}, \sigma^{*,(n+1)}, \epsilon^{(n+1)}, \sigma^{(n+1)}$
-

Après avoir résolu un incrément de chargement, l'algorithme 3 résume les règles de transition avec l'algorithme 2 inclus dans un bloc appelé solveur TD-DDCM.

Algorithm 3 Tangent Distance Data Driven Solver with material behavior data set mapping

Require: Elastic data set D_e and plastic data set D_p , Geometry, Loading path $\mathbf{F}^{(n+1)}$, Dirichlet boundary condition matrix \mathbf{A}

- 1: $k = 0, n = 0$.
 - 2: Various initialization : $\forall g, R_g^{(0)} = 0$, Initial states : $(\boldsymbol{\epsilon}_g^{*(0,0)}, \boldsymbol{\sigma}_g^{*(0,0)}, \mathbf{C}_g^{(0,0)}) = (\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{C}_e)$
 - 3: Data flag $h_g^{(0)} = \mathbf{0}$
 - 4: Temporal loop
 - 5: **while** $t_n < T$ **do**
 - 6: ***Call algorithm 2 to solve for physically admissible and material data states***
 - 7: $[\boldsymbol{\epsilon}^{*(n+1)}, \boldsymbol{\sigma}^{*(n+1)}, \boldsymbol{\epsilon}^{(n+1)}, \boldsymbol{\sigma}^{(n+1)}] = \text{TD-DDCM Solver}(D_e, D_p, \mathbf{F}^{(n+1)}, \mathbf{z}^{*(n)}, h^{(n)})$
 - 8: ***Determination of material behavior transition from t_n to t_{n+1} ***
 - 9: **for all** g **do**
 - 10: Compute the yield criterion $f(\boldsymbol{\sigma}_g^{(n+1)}, R_g^{(n)})$
 - 11: Compute the data flag predictor h_g^{pred}
 - 12: **if** $f < 0$ **then**
 - 13: $h_g^{\text{pred}} = 0$
 - 14: **else**
 - 15: $h_g^{\text{pred}} = 1$
 - 16: Compute $\Delta h = h^{\text{pred}} - h^{(n)}$.
 - 17: Looking for $E = \{g | \Delta h_g = -1\}$
 - 18: **if** $E \neq \emptyset$ **then**
 - 19: ***DD prediction is accepted.***
 - 20: ***Updating data flag and historical variable***
 - 21: $h^{(n+1)} = h^{\text{pred}}$
 - 22: $R_g^{(n+1)} \{g | h_g^{(n+1)} = 0\} = R_g^{[n]}$
 - 23: $R_g^{(n+1)} \{g | h_g^{(n+1)} = 1\} = \boldsymbol{\sigma}_{eq}(\boldsymbol{\sigma}_g^{(n+1)}) - \boldsymbol{\sigma}_y$
 - 24: ***Initialization for the next time step***
 - 25: $(\boldsymbol{\epsilon}_g^{*(n+2,0)}, \boldsymbol{\sigma}_g^{*(n+2,0)}, \mathbf{C}_g^{(n+2,0)}) = (\boldsymbol{\epsilon}_g^{*(n+1)}, \boldsymbol{\sigma}_g^{*(n+1)}, \mathbf{C}_g^{(n+1)})$
 - 26: $n = n + 1$
 - 27: **else**
 - 28: ***Tangent operator correction for backward transition***
 - 29: **for all** $g \in E$ **do**
 - 30: $h_g^{(n)} = 0, \mathbf{C}_g^{(n+1,0)} = \mathbf{C}^e, (\boldsymbol{\epsilon}_g^{*(n+1,0)}, \boldsymbol{\sigma}_g^{*(n+1,0)}) = (\boldsymbol{\epsilon}_g^{*(n)}, \boldsymbol{\sigma}_g^{*(n)})$
 - 31: **for all** $g \notin E$ **do**
 - 32: $\mathbf{C}_g^{(n+1,1)} = \mathbf{C}_g^{(n)}, (\boldsymbol{\epsilon}_g^{*(n+1,0)}, \boldsymbol{\sigma}_g^{*(n+1,0)}) = (\boldsymbol{\epsilon}_g^{*(n)}, \boldsymbol{\sigma}_g^{*(n)})$
 - 33: Restart DD Solver for evolution from t_n to t_{n+1} . Go to step 6
 - 34:
-

3.7 Cas test

Reprenons le cas test de la plaque trouée en 2D déformations planes introduit dans la section 2.5. Pour la traject de chargement, une contrainte uniaxiale qui dépend du temps sera appliquée (voir la figure 3.6b). Cette trajectoire de chargement est choisie afin d’entrer dans les états de déformation plastique, puis de décharger pour tester l’effet mémoire.

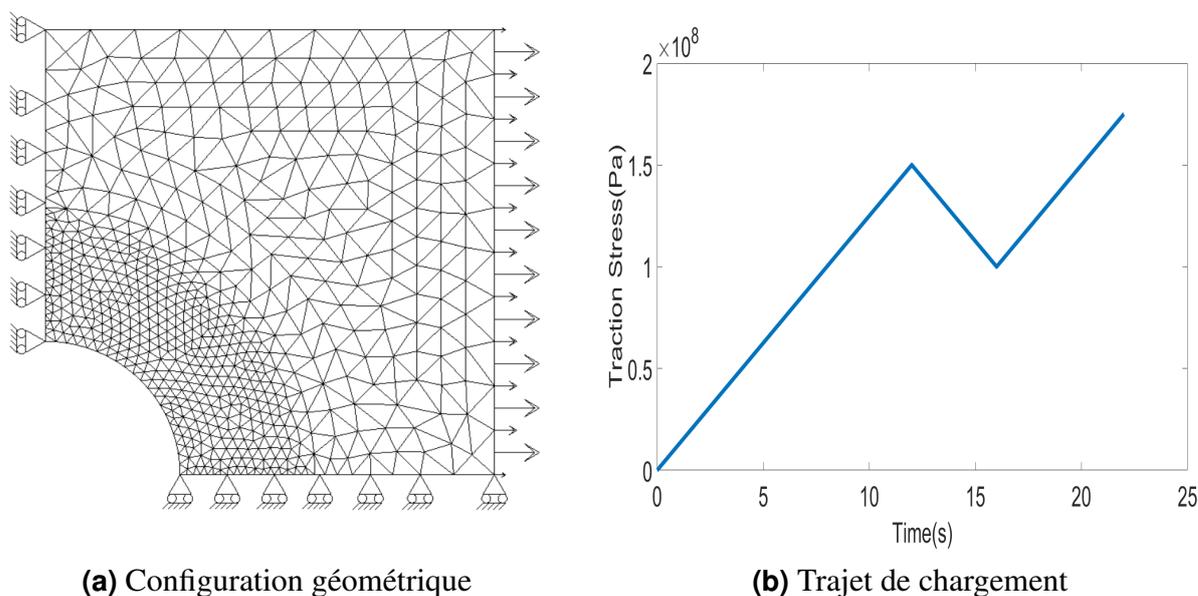


FIGURE 3.6 – Configuration géométrique et trajet de chargement

3.7.1 Génération des données synthétiques

Pour référence, nous utilisons une loi élasto-plastique à écrouissage isotrope avec la règle d’écoulement de Prandt-Reuss et le critère de von Mises. Dans notre expérience, le comportement de référence est décrit par les paramètres suivants : $E = 210$ GPa, $\nu = 0.3$, $\sigma_y = 200$ MPa, $L = E/10$ avec L est le module d’écrouissage.

Pour générer l’ensemble des données de cet exemple, nous effectuons en fait un test virtuel sur la même configuration géométrique mais avec un chemin de chargement différent de celui de la solution de référence (voir la figure 3.7). Le but de ce test est de générer plus d’états en déformation plastique pour la base de données. Tous les états du matériau dans le domaine seront collectés comme ensemble de données et le modèle paramétrique sera oublié pendant la simulation DDCM.

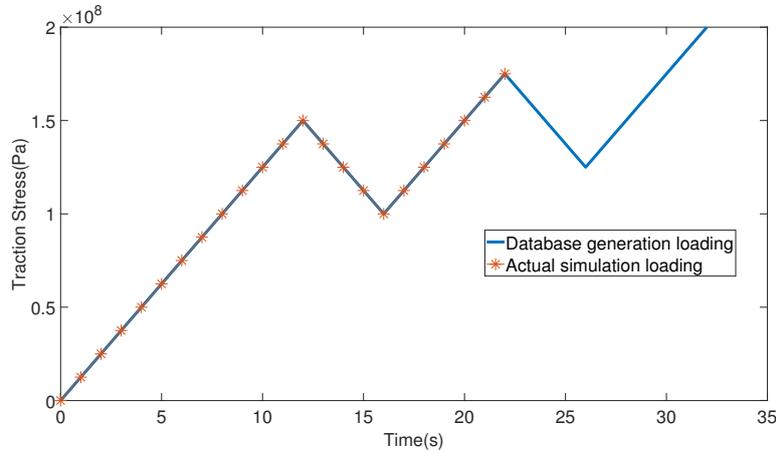
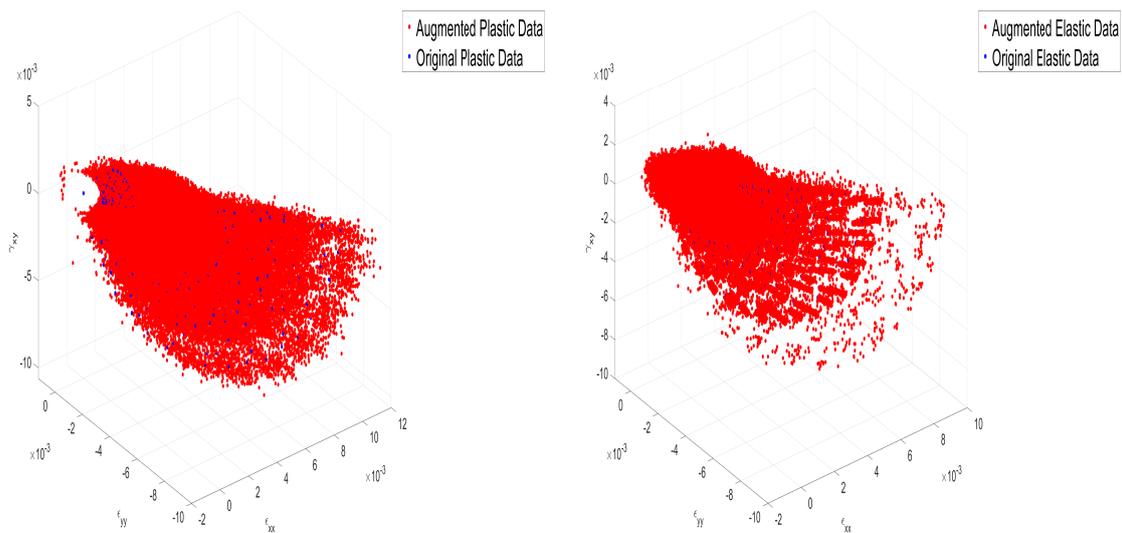


FIGURE 3.7 – Trajet de chargement pour le test virtuel

Cependant, la question de la couverture de l'espace des phases se pose. Comme mentionné dans [STA 19], pour avoir une bonne précision, la base de données doit couvrir la portion de l'espace des phases dans laquelle se trouve la solution exacte. De plus, la convergence de la solution pilotée par les données vers celle donnée par la loi constitutive du matériau cachée ne peut être réalisée efficacement que si les données sont disponibles en haute densité autour de la distribution de la solution exacte dans l'espace de phase. Cette convergence ne dépend pas vraiment du nombre total de paires de données mais leur qualité de couverture. C'est ici qu'apparaît le premier défi dans le contexte élasto-plastique. Le problème lui-même est évolutif, ce qui signifie qu'à chaque temps, la distribution des solutions exactes sera déplacée dans l'espace de phase. Pour une configuration quasi-statique ou même dynamique, comme le montre la discussion au-dessus et dans [NGU 20], chaque instant correspond à un problème DDCM distinct où les influences de l'histoire proche ou les effets d'inertie sont prises en compte et apparaissent dans le terme à droite du sous-problème de minimisation globale. Un autre point important est la nature séquentielle des données dans le contexte élasto-plastique. Nous voulons que les données générées synthétiquement suivent le chemin de la solution de référence. De cette façon, l'historique correct du matériau peut exister dans la base de données car les données ne couvriront que la partie pertinente de l'espace de phase. En effet, l'approche naïve consiste à collecter l'ensemble de l'évolution des déformations et des contraintes dans l'espace de phase pour tous les pas de temps, puis à échantillonner sur cet hypercube. Mais là encore, afin d'avoir une bonne densité des données qui couvrent la solution exacte à tout moment, cela conduira non seulement à un nombre prohibitif pour l'échantillonnage des données, mais aussi à une grande quantité de données qui ne seront jamais utilisées pendant le processus.

Dans ce qui suit, nous effectuons une augmentation synthétique des résultats du test virtuel. Nous générons une série de trajets de chargement artificiels entre la configuration $\mathcal{S}^{(t)} := \{\mathbf{u}, \boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\epsilon}_p, \dots\}^{(n)}$ et $\mathcal{S}^{(n+1)}$ sur la base du résultat de référence donné par le test virtuel. Cet enrichissement se réalise par les étapes suivantes :

- À partir du résultat du test virtuel, à un pas de temps de t_n à t_{n+1} , nous évaluons les statistiques des entrées d'incrément de déformation. Plus précisément, nous calculons la valeur moyenne et la covariance (en fonction des composantes tensorielles, des incréments de déformation provenant de l'ensemble du domaine Ω).
- À partir de ces statistiques, nous générons N_s tests artificiels en échantillonnant les incréments de déformation à partir d'une distribution normale qui correspond à ces statistiques, puis nous conservons les incréments de déformation artificiels générés.
- Pour chaque point de quadrature, étant donné son vecteur d'état local $\mathcal{S}_g^{(n)} := \{\epsilon, \sigma, \epsilon_p \dots\}^{(n)}$ et la série des trajets fictifs, nous calculons diverses réponses aux contraintes et aux variables internes en utilisant les mêmes lois paramétriques et le même algorithme de retour radial. Les résultats seront empilés dans un tableau jusqu'à la fin de la solution de référence.



(a) Sous ensemble des données plastiques (b) Sous ensemble des données élastiques

FIGURE 3.8 – Distribution des états matériels dans l'espace de phase après l'enrichissement de données

De cette façon, l'enrichissement garantit que les ensembles de données générés couvrent les parties pertinentes de l'espace des phases, comme le montrent les figures 3.8b et 3.8a pour les sous-ensembles de données plastiques et élastiques. Les lois constitutives paramétriques seront désormais oubliées pour l'ensemble du calcul DDCM.

3.7.2 Résultats et discussions

3.7.2.1 Comparaison DDCM - Référence

Nous définissons deux indicateurs d'erreur spatiale, l'un basé sur l'erreur relative du vecteur de déplacement global et l'autre sur la distance résiduelle mesurée par la métrique co-énergétique, donnés par

$$\Delta_{\mathbf{u}}^{(n)} = \frac{\|\mathbf{u}^{(n)} - \mathbf{u}_{ref}^{(n)}\|_2}{\|\mathbf{u}_{ref}^{(n)}\|_2} \quad (3.27)$$

$$\Delta_{\mathbf{z}}^{(n)} = \frac{\|\mathbf{z}_c^{(n)} - \mathbf{z}_{ref}^{(n)}\|_Z}{\|\mathbf{z}_{ref}^{(n)}\|_Z} \quad (3.28)$$

Le point clé pour la validation est toujours la convergence vers la solution de référence basée sur les lois matérielles cachées, à savoir si le solveur DDCM peut donner un accord avec la solution de référence lorsque le nombre d'échantillonnage des données augmente. Pour cette raison, nous exécutons la simulation avec certaines valeurs de N_s . Nous traçons l'évolution de ces indicateurs d'erreur en fonction du temps, pour différentes simulations à partir de plusieurs ensembles des données. Les résultats obtenus sont illustrés dans la figure 3.9a et 3.9b. Nous obtenons également la configuration déformée comme indiqué sur la figure 3.10 et 3.11.

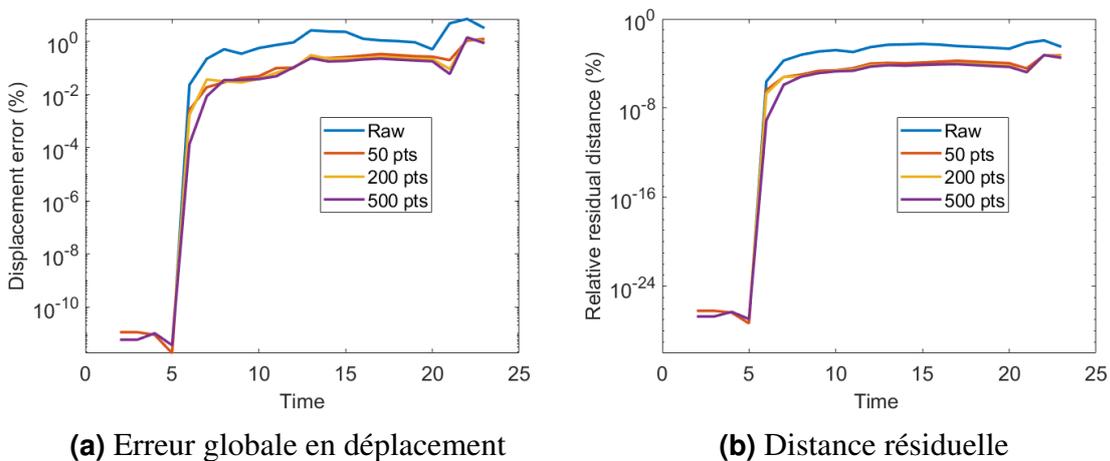


FIGURE 3.9 – Evolution des indicateurs d'erreur dans le temps. Les résultats sont obtenus avec la base de données brute et celles augmentées pour différentes valeurs de N_s

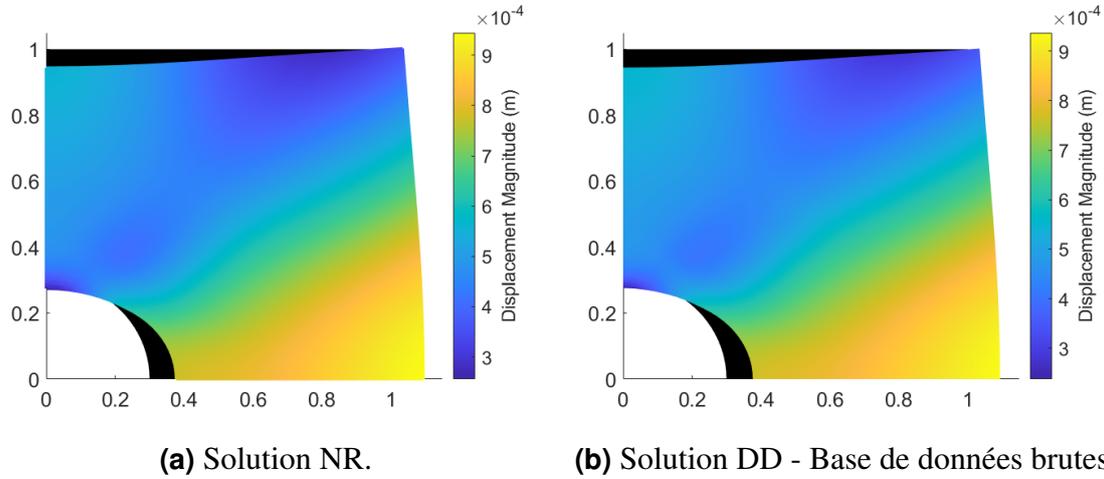


FIGURE 3.10 – Champ de déplacement à fin de la relaxation. Les valeurs de déplacements sont multipliées par 100 pour visualisation

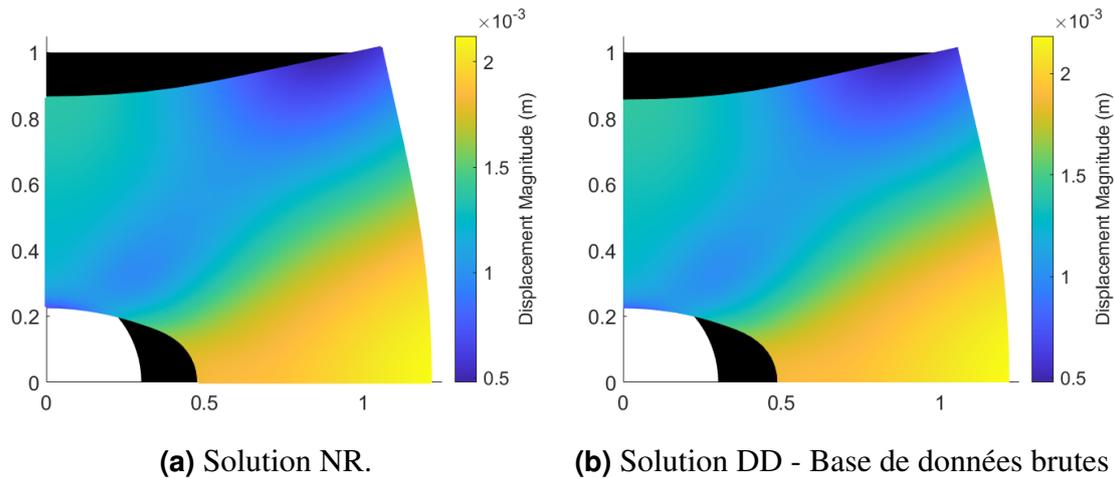


FIGURE 3.11 – Champ de déplacement au chargement max

Pour le champ de déplacement, le solveur DDCM avec les opérateurs tangents donne un bon accord avec celui basé sur le modèle. Remarquons que, dans la première phase élastique, lorsque le domaine n'a pas subi d'effets d'histoire, la déviation est quasi inexistante, à part les erreurs de troncature (voir figure 3.9a). En effet, le terme $\int_{\Omega} [\delta \epsilon(\lambda) : (\sigma^* - \mathbb{C}^{tan} : \epsilon^*)] dV$ dans l'équation (3.17) qui contient l'effet d'histoire va disparaître pour deux raisons : l'utilisation de l'opérateur tangent élastique et le fait que la recherche de données suit de près la contrainte physique. En fait, nous venons de calculer un problème élastique linéaire classique et une seule itération est donc nécessaire. Au fur et à mesure que nous avançons dans le temps, l'erreur commence à être importante lorsque nous entrons dans la région plastique. Avec des données supplémentaires, lorsque la densité d'échantillonnage augmente, l'erreur diminue à chaque instant.

Si l'on s'intéresse à la réponse locale, on peut tracer la courbe de la contrainte équivalente dans la zone de concentration des contraintes. Le résultat est illustré dans la figure 3.12.

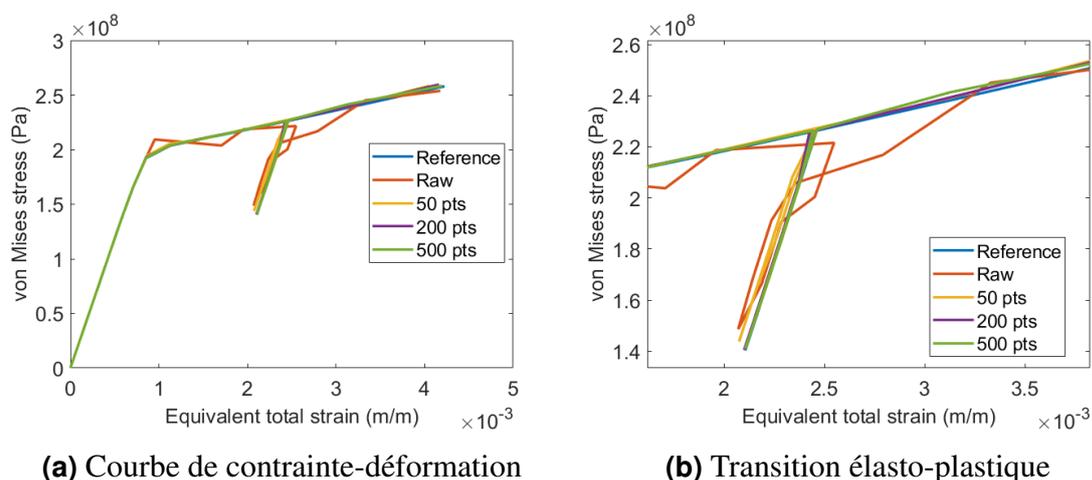


FIGURE 3.12 – Courbe de contrainte-déformation équivalente dans la zone de concentration de contrainte

Comme le montre la figure 3.12a, la qualité de la solution DDCM est très discutable sans la disponibilité abondante des données dans les états plastiques, particulièrement autour de la transition élastique-plastique. Avec plus de données disponibles, nous sommes en mesure de nous rapprocher de la partie de déchargement dans la solution de référence comme le montre la figure 3.12b où on peut voir la transition devient plus lisse.

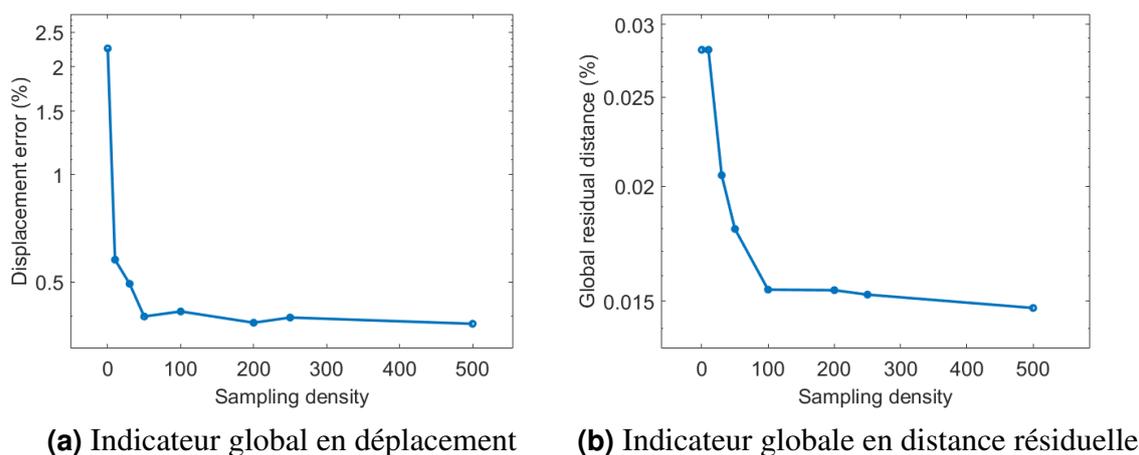


FIGURE 3.13 – Convergence de la solution DDCM vers la loi de comportement cachée

Afin de quantifier la qualité globale de la solution, nous prenons la moyenne quadratique dans le temps pour les deux indicateurs d'erreur (3.27) (3.28) et traçons son

évolution en fonction du paramètre d'échantillonnage N_S . La figure 3.13 montre une diminution pour les deux indicateurs lorsque la taille de la base de données augmente.

3.7.2.2 Besoin des données augmentées

Nous voulons porter notre attention sur le comportement du solveur surtout quand il y a un manque de données. Bien que la base de données ne contienne que la solution exacte, sans son support géométrique, et que nous ayons initialisé notre solveur à partir de zéro pour les champs de déformation et de contrainte, les performances du solveur DDCM sont assez médiocres puisque l'erreur énergétique maximale est d'environ 1.5% (rappelons que notre tolérance pour le critère de saturation est 10^{-10}).

On considère la même métrique énergétique avec le tenseur artificielle égal à l'opérateur élastique \mathbb{C}_e pour tracer la distribution d'erreurs locales pour la déformation et la contrainte au chargement maximal (voir la figure 3.14).

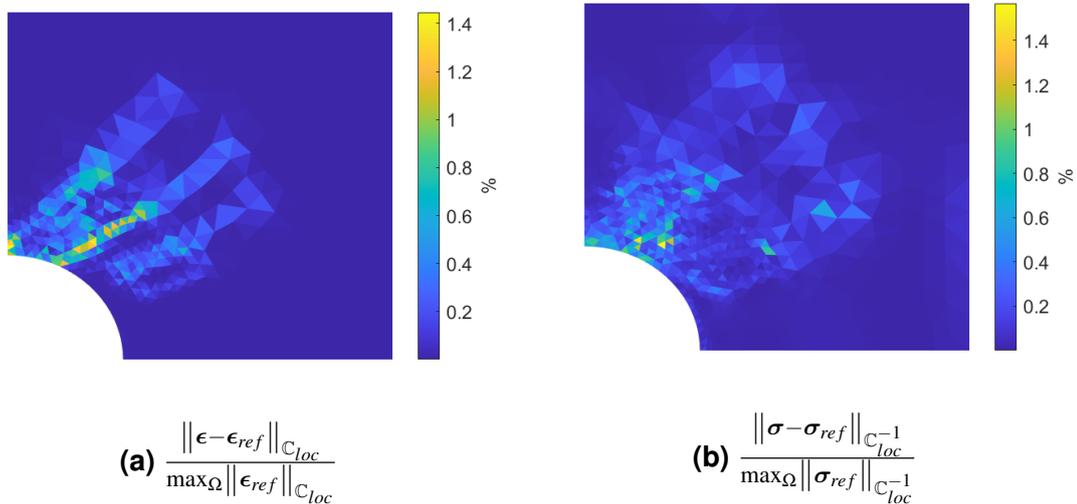


FIGURE 3.14 – Comparaison des erreurs en contrainte et déformation, à $t_n = 22$ pour solution Data Driven avec la base sans augmentation

Nous observons que l'erreur de déformation (Figure 3.14a) est concentrée dans les zones où les déformations sont importantes et a tendance à se propager en suivant l'augmentation de la déformation au fur et à mesure. La distribution de l'erreur des contraintes (figure 3.14b), qui est plus dispersée, est légèrement différente. L'observation la plus importante ici est l'apparition de quelques valeurs aberrantes où l'erreur relative est significativement plus élevée à proximité de la zone de concentration des contraintes. Le schéma DDCM dans ces situations obtient un minimum local. En effet, dans les régions où les déformations et les contraintes les plus élevées sont attendues, la base de données brute ne peut pas fournir une couverture adéquate dans l'espace de phase. Ainsi, la distance résiduelle est si élevée que le critère de saturation ne peut pas être atteint, ce qui conduit à des résultats inexacts.

Nous démontrons ce point en visualisant la distribution des états de la solution exacte et la couverture de l'espace des données matérielles extraite du test virtuel, tous pas de temps confondus.

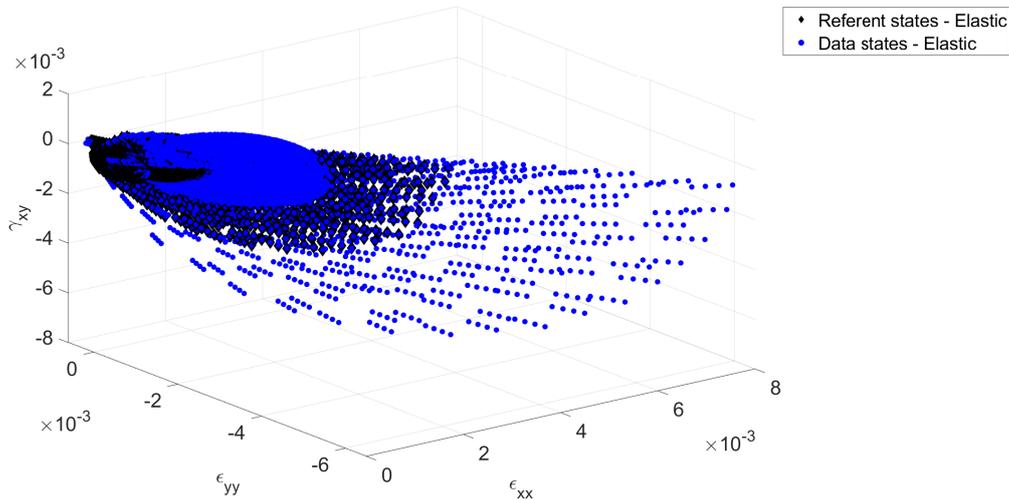


FIGURE 3.15 – Distribution des données sans augmentation, zone élastique

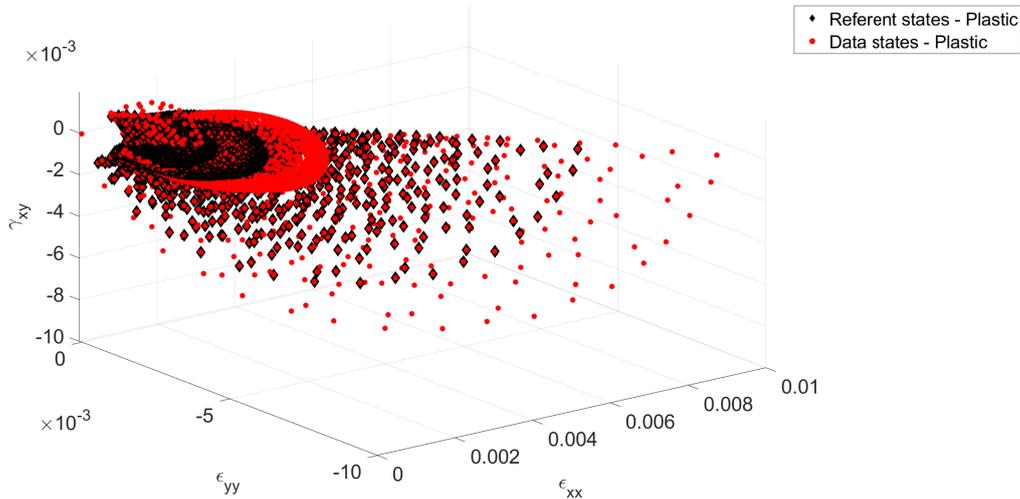


FIGURE 3.16 – Distribution des données sans augmentation, zone plastique

Pour les états élastiques, la base de données brute fournit une couverture suffisante (Figure 3.15) alors que ce n'est absolument pas le cas pour les états plastiques, en particulier dans la région des valeurs élevées de déformation/contrainte (Figure 3.16). Nous procédons maintenant à la même analyse pour le résultat des données augmentées (les figures 3.8b et 3.8a).

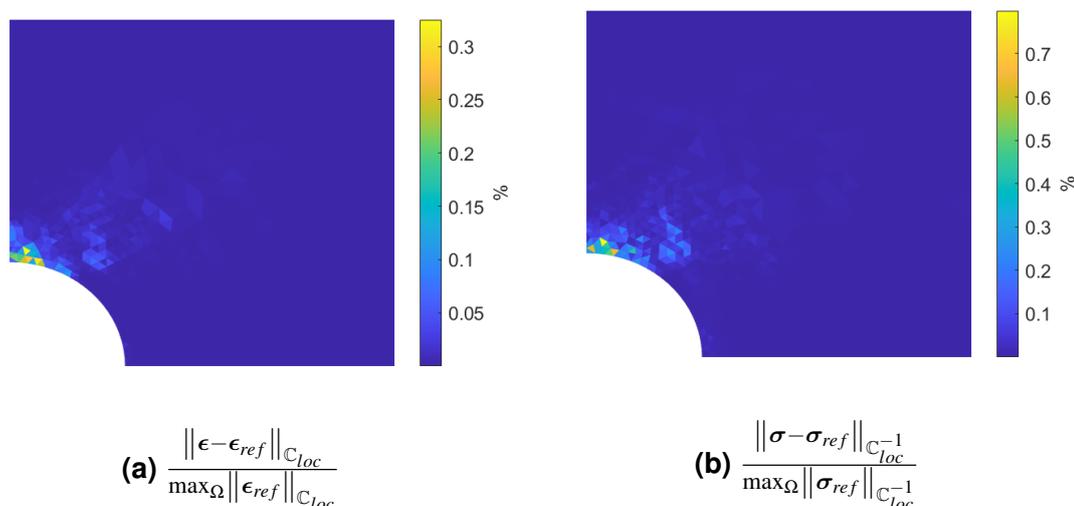


FIGURE 3.17 – Comparaison des erreurs en contrainte et déformation, à $t_n = 22$ pour la solution Data Driven avec la base augmentée $N_s = 100$.

Nous pouvons voir sur la figure 3.17 que les erreurs de déformation et de contrainte présentent un schéma très similaire. Bien qu'il existe encore quelques minima locaux autour de la zone de concentration des contraintes, qui sont plus ou moins attendus, leur nombre et leur ampleur ont diminué.

Nous prenons une évolution par exemple à $t_n = 12$ et visualisons tous les états de données plastiques qui ont été effectivement utilisés pendant les boucles itératives du DDCM. Les figures 3.18 et 3.19 montrent les distributions relatives des états de données des matériaux plastiques par rapport à la solution de référence.

Afin de sortir des minima locaux, le solveur a dû passer par des états intermédiaires. Il conduit néanmoins à une solution locale qui s'approche de la distance minimale de référence malgré l'existence de la solution de référence dans la base de données. Les solutions DDCM et la référence ne se superposent pas parfaitement, en particulier dans les états de forte contrainte et de forte déformation. Il convient également de noter que le solveur n'a besoin que de quelques itérations pour atteindre la distribution finale des états référents. La figure 3.18a montre les distributions des données plastiques au début du pas de temps et la solution de référence qui devrait être trouvée idéalement. Après quelques itérations, les états de données trouvés par le solveur étaient en fait assez proches de la solution référence. Ainsi, une grande partie du processus itératif a été consacrée à la recherche de la meilleure solution afin de satisfaire la précision souhaitée régie par le critère de saturation, car il y a peu ou pas de différence visuelle entre les figures 3.19a et 3.19b. Cependant, sur la courbe de la variation du critère de saturation, nous constatons que notre solveur n'est pas descendu sous la tolérance fixée, il a plutôt atteint un état saturé (Figure 3.20), ce qui est clairement le signe d'un autre minimum local à proximité de la vraie solution. Cette observation laisse à désirer en ce qui concerne l'implémentation pratique.

3. Mécanique computationnelle pilotée par les données pour l'élasto-plasticité

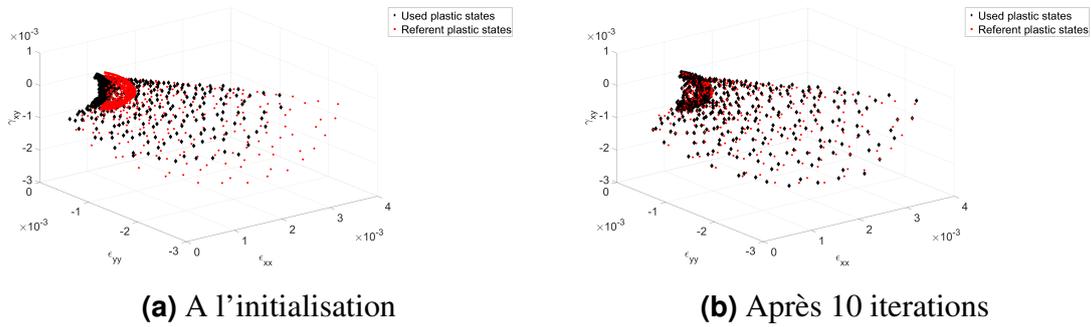


FIGURE 3.18 – Distribution des données plastiques au début de pas de temps

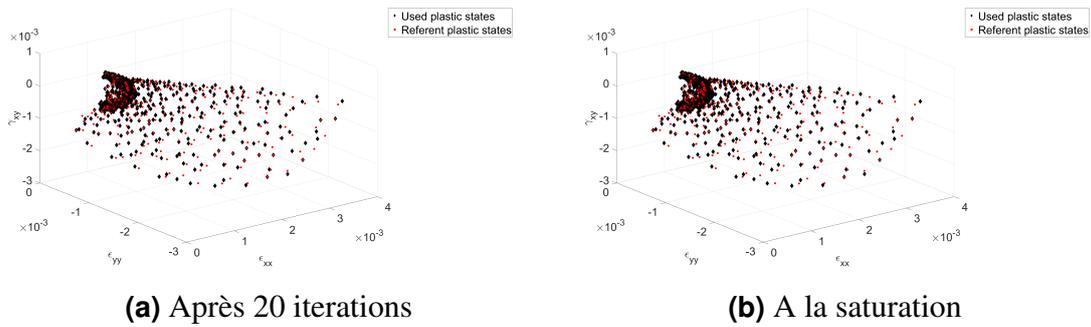


FIGURE 3.19 – Distribution des données plastiques à la fin de la procédure

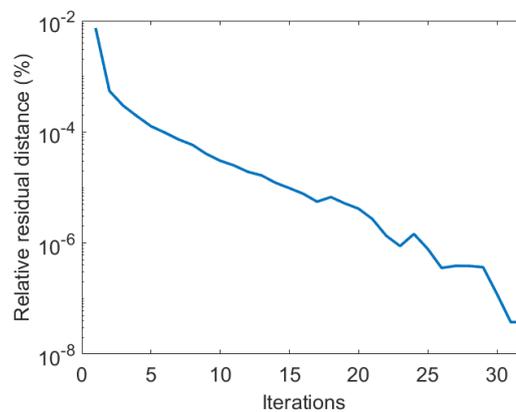


FIGURE 3.20 – Variation du critère de convergence. Un taux de convergence linéaire a été observé

3.7.2.3 Test avec un chargement cyclique

Dans cet essai, nous considérons le cas d'une nouvelle loi paramétrique de référence avec une règle d'érouissage non linéaire donnée par

$$R(p) = \sigma_{\infty} + (\sigma_y - \sigma_{\infty}) \exp(-bp) \quad (3.29)$$

où $\sigma_y = 150\text{MPa}$, $\sigma_{\infty} = 250\text{MPa}$, $b = 500$. La courbe d'érouissage correspondante est illustrée par la figure 3.21. On considère toujours le cas de l'érouissage isotrope.

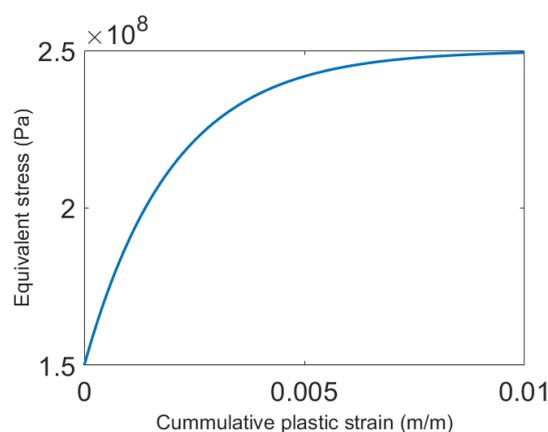


FIGURE 3.21 – Courbe d'érouissage donnée par la loi (3.29).

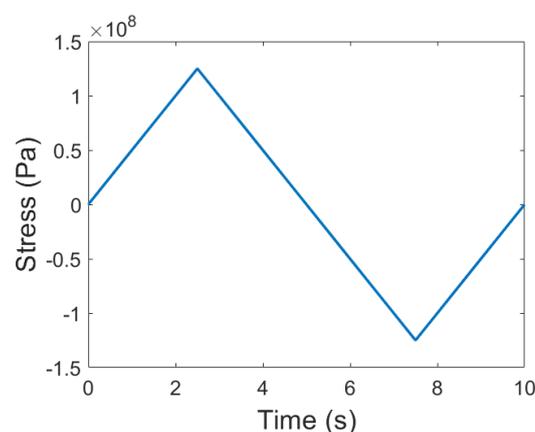


FIGURE 3.22 – Un cycle de chargement complet

En raison de l'effet histoire pour les comportements irréversibles, les points de données avec des histoires différentes seront associés à des espaces tangents différents. Ainsi, des points de données proches les uns des autres, voire présentant les mêmes valeurs de déformation et de contrainte, peuvent avoir des espaces tangents très différents, en fonction de leur historique de chargement. Afin de mieux analyser la réponse DDCM vis-à-vis de cette situation, nous appliquons un cycle de chargement complet tel que

décrit dans la figure 3.22. Les résultats sont obtenus en utilisant les données augmentées synthétiques avec le paramètre d'échantillonnage $N_s = 1000$.

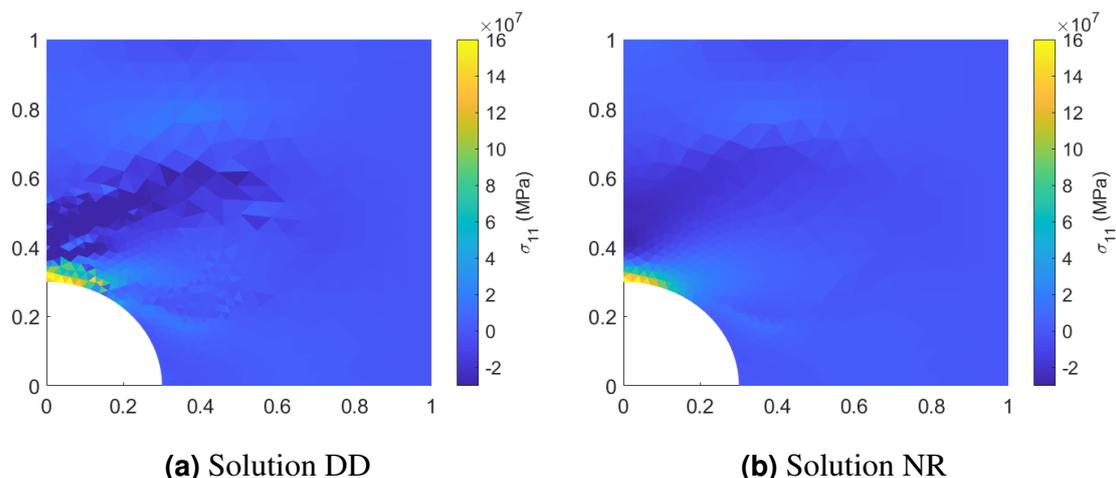


FIGURE 3.23 – Contrainte résiduelle à la fin du cycle

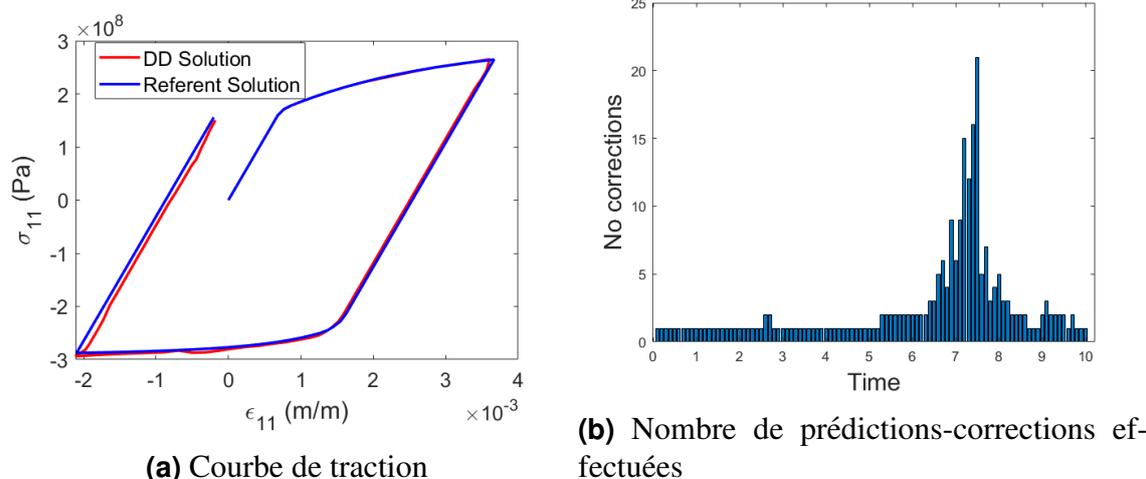


FIGURE 3.24 – Résultat DDCM avec chargement cyclique

La figure 3.23 montre les contraintes résiduelles calculés à la fois par le solveur DDCM et le solveur Newton-Raphson. Quant à la courbe contrainte-déformation, le résultat montré dans la figure 3.24a confirme le bon accord entre le solveur DDCM et la solution de référence. Il convient de noter que, pendant la phase de compression, même si le domaine est comprimé, il existe un certain nombre d'éléments qui sont déchargés à un moment donné et qui redeviennent plastiques au pas de temps suivant. C'est là que le schéma de prédiction-correction entre en jeu. La figure 3.24b montre le nombre de correction pour chaque évolution. Après un certain nombre de correction, le nombre de

points en "décharge plastique" finit par diminuer jusqu'à 0 et la simulation se poursuit pour le pas de temps suivant. Pendant la phase de décharge du cycle positif et vu que le domaine entier est déchargé, tous les éléments seront soumis à une transition vers l'arrière et la correction ne doit être effectuée qu'une ou deux fois. Cependant, ce n'est pas le cas pendant la phase de compression. La correction doit être effectuée plusieurs fois car le nombre d'éléments en transition arrière n'est pas négligeable alors que le domaine est toujours en compression. Plus on avance dans la phase de compression, plus le nombre d'éléments en transition arrière au couloir du seuil élasto-plastique augmente. Afin d'assurer la précision et de réduire le nombre de temps de correction, la base de données doit être fortement augmentée dans les deux sous-bases élastiques et plastiques, surtout dans la phase de compression.

3.8 Conclusions

Nous avons fourni une extension du paradigme de calcul piloté par les données sans modèle pour l'élasticité au comportement élasto-plastique à écrouissage isotrope des matériaux en utilisant les notions d'espace tangent, de distance tangente et des règles de transition basées sur des lois à seuil. La limitation de la méthode originale utilisant l'analyse des voisinages pour traiter les données séquentielles et dépendantes de l'histoire a été abordée par les opérateurs tangents définis localement et qui agissent comme une direction de recherche. La formulation a été dérivée dans un cadre variationnel et donc plus cohérente pour être mise en place dans les logiciels d'éléments finis existants. De plus, la dépendance vis-à-vis du tenseur d'hyperparamètres \mathbb{C} a été partiellement éliminée dans l'étape globale et n'apparaît que dans la procédure de recherche de données locales. Quant aux effets irréversibles, la transition du comportement du matériau est traduite par la mise en correspondance du sous-ensemble de données matérielles au niveau local dans la procédure de recherche de données. Les règles de mise en correspondance elles-mêmes sont basées sur des lois à seuil.

Cependant, il faut garder à l'esprit que, le formalisme permet de bien traiter la plasticité à écrouissage isotrope. Le choix présenté ici reste limité pour être conduit à d'autres types d'écrouissage comme cinématique ou combiné. Si nous voulons étendre notre proposition à l'écrouissage cinématique par exemple, la fonction seuil doit être adaptée en conséquence et des forces thermodynamiques supplémentaires doivent être prises en compte. C'est une situation que nous voulons éviter car elle nécessite une modélisation plus poussée. Néanmoins, dans la littérature, il y a déjà quelques avancées dans la direction de l'utilisation des techniques d'apprentissage automatique pour apprendre la forme de la surface d'écoulement en utilisant des données, par exemple Fugh et al. [FUH 22] ou Flaschel et al. [FLA 22]. Une autre perspective de cette thèse est le passage à une autre forme de lois à seuil basée sur le second principe de la thermodynamique. La base de données sera encore élargie en incluant le taux de dissipation ou l'énergie libre mesurés expérimentalement (même si cela reste encore grandement ouvert) ou depuis des calculs à des échelles plus petites (la base de données correspond au comportement effec-

tif d'une micro-structure dont on connaît le modèle paramétrique du comportement des constituants). Le résultat de cette approche fera l'objet du chapitre suivant.

Malgré tout, le résultat de la méthode DDCM démontré au-dessus reste très comparable, surtout lorsque les données sont abondamment disponibles. En outre, la classification offline des ensembles de données correspondants nous permet également de réduire le coût de calcul par rapport au cas de l'augmentation des données à la volée (car la structure de l'arbre k-d ne doit être construite qu'une fois pour toutes).

Chapitre 4

Application à un modèle thermomécanique

Dans le chapitre précédent, nous avons abordé une extension de la méthode de minimisation de distance pour l'élasto-plasticité. Les évolutions inélastiques sont prises en compte par l'inclusion des opérateurs tangents dans la base de données. La plasticité est pilotée pendant le processus du calcul par des lois à seuil. Cependant, la limitation de cette proposition a été rapidement identifiée dès lors que l'utilisation des fonctions de surface de charge classiques nécessite une modélisation supplémentaire de l'écroutissage. Dans ce chapitre, nous proposons une autre façon de piloter la transition de comportement dans un cadre plus général, thermodynamiquement admissible. Un exemple d'application sera donné pour la simulation thermomécanique avec écroutissage cinématique.

Sommaire

4.1	Rappels sur la thermodynamique des milieux continus	73
4.1.1	Premier principe de la thermodynamique	73
4.1.2	Second principe de la thermodynamique	74
4.2	Nouvelle règle de transition basée sur la dissipation intrinsèque	75
4.3	Cas test	76
4.3.1	Principe et Modélisation de l'essai à dilatométrie bloquée	76
4.3.2	Calcul DDCM	78
4.3.3	Résultat	79
4.4	Conclusions	81

4.1 Rappels sur la thermodynamique des milieux continus

La transformation d'un milieu continu est un processus thermodynamique et par conséquent doit rester en accord avec les deux principes de la thermodynamique. Ces transformations peuvent s'accompagner par des phénomènes irréversibles, tels que la plasticité. Le cadre général de la *Thermodynamique des Processus Irréversibles - TPI* par variable d'états permet de définir des limites d'échanges de chaleur et d'énergie mécanique des systèmes physiques pendant une évolution impliquant des phénomènes irréversibles [SUQ 04].

Nous présentons dans la suite les deux principes de la Thermodynamique pour les milieux continus avec une attention portée aux phénomènes irréversibles. Le but ici n'est pas de décrire de nouveau le cadre de travail pour la modélisation des lois de comportement mais de rappeler des éléments théoriques, sur lesquels on peut définir une loi de transition plus générale afin de gouverner les évolutions irréversibles pendant le calcul DDCM. Dans le cadre des *Matériaux Standards Généralisés - MSG* [HAL 75], le comportement d'un matériau est décrit par des *lois d'état* et des *lois d'évolution* qui dérivent des potentiels suivants :

- Le potentiel thermodynamique permet de définir les variables conjuguées aux variables observables et variables internes choisies en fonction des phénomènes à modéliser. Il conduit naturellement à des lois d'état. Ces lois définissent les forces thermodynamiques disponibles.
- Le pseudo-potential de dissipation fournit des lois d'évolution des variables flux décrivant les avancements des processus irréversibles en fonction des forces thermodynamiques.

Dans ce qui suit, en se basant sur le postulat de l'état local et le postulat de Helmholtz, il existe une énergie interne e en fonction de l'état telle que $E_{int} = \int_{\Omega} \rho e dV$ avec $e = e(\epsilon_e, \mathbf{X}, s)$. ϵ_e est la déformation réversible, s est la densité d'entropie et \mathbf{X} est un ensemble des variables internes.

4.1.1 Premier principe de la thermodynamique

Le premier principe de la thermodynamique s'énonce comme suit : Le taux de variation totale de l'énergie interne et cinétique est égal à la somme de puissance des efforts extérieurs et le taux d'apport de chaleur. Mathématiquement parlant,

$$\frac{dE_{int}}{dt} + \frac{dE_{cin}}{dt} = P_{ext} + \dot{Q} \quad (4.1)$$

Sous forme intégrale on a

$$\int_{\Omega} \rho \left(\frac{de}{dt} + \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right) \right) dV = \int_{\Gamma} ((\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} - \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}) dA + \int_{\Omega} (\mathbf{f}_d \cdot \mathbf{v} + r) dV \quad (4.2)$$

avec

- \mathbf{v} : tenseur de vitesse de déformation
- \mathbf{q} : flux d'échange de chaleur
- \mathbf{f}_d : densité des forces volumiques dans Ω
- r : taux de production volumique de chaleur dans Ω

En supposant le cadre de l'hypothèse des petites perturbations (HPP), on a la forme locale suivante :

$$\rho \frac{de}{dt} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} + r - \text{div}(\mathbf{q}) \quad (4.3)$$

L'équation 4.3, dite équation de conservation de l'énergie, exprime l'origine des variations d'énergie interne du corps solide déformable, qui se compose d'un terme de puissance mécanique des efforts intérieurs $\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}$ et un autre terme sur l'échange calorifique. La convention de signe est que les grandeurs reçues soient en positives.

Pratiquement, on s'intéresse souvent aux problèmes où la température varie très peu ou pratiquement constante. On utilisera donc le potentiel d'énergie libre $\psi(\boldsymbol{\epsilon}_e, \mathbf{X}, \theta) = e(\boldsymbol{\epsilon}_e, \mathbf{X}, s) - s \cdot \theta$. On va introduire des lois d'état avec la notion des variables duales conjuguées par rapport aux variables d'états

$$\boldsymbol{\sigma} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\epsilon}_e} \quad \mathbf{Y} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{X}} \quad s = - \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \quad (4.4)$$

Avec les variables duales, le premier principe devient

$$\rho \dot{\psi} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_e - \mathbf{Y} \cdot \dot{\mathbf{X}} - \rho s \cdot \dot{\theta} \quad (4.5)$$

4.1.2 Second principe de la thermodynamique

Le seconde principe de la thermodynamique s'annonce comme suit : Le taux de variation d'entropie est toujours supérieur ou égal au taux d'apport d'entropie par le transfert de chaleur. La forme intégrale du seconde principe s'écrit

$$\dot{S} \geq \int_{\Omega} \frac{r}{\theta} dV - \int_{\Gamma} \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}}{\theta} dA \quad (4.6)$$

On peut en déduire également une forme locale connue sous le nom de l'inégalité de Clausius-Duhem

$$\rho \dot{s} - \frac{r}{\theta} + \text{div} \frac{\mathbf{q}}{\theta} \geq 0 \quad (4.7)$$

ou exprimée avec les variables duales

$$\underbrace{\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_p - \mathbf{Y} \dot{\mathbf{X}}}_{\Phi_1} - \underbrace{\frac{\mathbf{q}}{\theta} \text{grad} \theta}_{\Phi_2} = \Phi_1 + \Phi_2 \geq 0 \quad (4.8)$$

La partie Φ_1 est la dissipation mécanique (ou intrinsèque) tandis que la partie Φ_2 est la dissipation thermique. Remarquons que les dissipations sont toujours découplées bien que les phénomènes puissent être couplés. Le comportement du matériau est complètement

défini par des lois complémentaires liant les flux des variables dissipatives $\dot{\mathbf{X}}$ aux forces thermodynamiques associées \mathbf{Y} . Le formalisme MSG suppose l'existence d'une fonction $\varphi(\dot{\mathbf{X}})$ définie pour tout $\dot{\mathbf{X}}$, semi continue inférieurement, non négative, convexe par rapport à $\dot{\mathbf{X}}$ et nulle à l'origine. La force thermodynamique généralisée \mathbf{Y} est choisie comme un sous-différentiel de $\varphi(\dot{\mathbf{X}})$ par rapport à $\dot{\mathbf{X}}$

$$\mathbf{Y} \in \partial_{\dot{\mathbf{X}}} \varphi \quad (4.9)$$

La fonction duale φ^* est obtenue par la transformation de Legendre-Fenchel de φ

$$\varphi^*(\mathbf{Y}) = \sup_{\dot{\mathbf{X}}} (\mathbf{Y}\dot{\mathbf{X}} - \varphi) \quad (4.10)$$

Grâce à la convexité de φ , la fonction φ^* est aussi convexe, positive et nulle à l'origine. La propriété de la transformation de Legendre-Fenchel permet de déduire les équivalences suivantes

$$\mathbf{Y} \in \partial_{\dot{\mathbf{X}}} \varphi \Leftrightarrow \dot{\mathbf{X}} \in \partial_{\mathbf{Y}} \varphi^* \Leftrightarrow \mathbf{Y}\dot{\mathbf{X}} = \varphi + \varphi^* \quad (4.11)$$

La positivité de φ et φ^* assure celle de $\mathbf{Y}\dot{\mathbf{X}}$. L'inégalité de Clausius-Duhem est donc vérifiée automatiquement.

En conclusion, le potentiel de dissipation φ définit le comportement irréversible tandis que le comportement réversible est défini par l'énergie libre ψ . Les équations (4.4) et (4.9) fournissent la loi de comportement complète dans le cadre MSG.

4.2 Nouvelle règle de transition basée sur la dissipation intrinsèque

Dans le cadre du paradigme DDCM, l'énergie libre et le pseudo-potentiel de dissipation ne sont pas disponibles sous ses formes analytiques. Cependant, les deux principes de thermodynamique doivent toujours être respectés.

Dans le chapitre précédent, nous avons proposé d'utiliser le seuil d'élasticité comme la fonction indicatrice pour piloter la transition de comportement. De manière subtile, on suppose l'existence du pseudo-potentiel de dissipation. La limitation de cette approche est que celle-ci ne marche qu'avec l'écroutissage isotrope. En effet, l'histoire d'évolution est stockée dans la variable R qui est un scalaire. Cette dernière est mise à jour au cours de calcul en fonction de la sortie de la boîte noire (le solveur DDCM). Si l'on veut étendre notre formalisme pour l'écroutissage cinématique ou mixte, de façon analogue, la mise à jour du tenseur de contrainte de rappel (*kinematic back-stress tensor*) nécessite des modélisations supplémentaires pour obtenir les forces thermodynamiques pilotant cette quantité.

Afin d'éviter l'introduction d'autres variables internes, nous proposons d'étendre la base de données en rajoutant la valeur du potentiel de l'énergie libre ψ définie localement. Un point de données est maintenant composé d'un quadruplet $\{\epsilon, \sigma, \mathbb{C}_{\tan}, \psi\}$. On se place dans le cas d'évolution adiabatique. Étant donné la prédiction à la convergence du solveur

DDCM $\mathbf{z}_c^{(n+1)}$ au temps t_{n+1} , on évalue localement sur tous les points d'intégration la dissipation intrinsèque et vérifie le seconde principe, i.e $\forall g$

$$\Phi_1 = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \dot{\psi}(\mathbf{z}^*) \geq 0 \quad (4.12)$$

ou pratiquement sous forme discrétisée

$$d\Phi_1^{(n+1)} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}^{(n+1)} + \boldsymbol{\sigma}^{(n)})(\boldsymbol{\epsilon}^{(n+1)} - \boldsymbol{\epsilon}^{(n)}) - (\psi(\mathbf{z}^{*,(n+1)}) - \psi(\mathbf{z}^{*,(n)})) \quad (4.13)$$

Les règles de transition sont définies de manière suivante

- $d\Phi_1^{(n+1)} > tol$: Evolution plastique. $D_g^{(n+1)} := D_p$
- $-tol < d\Phi_1^{(n+1)} < tol$ Evolution élastique. $D_g^{(n+1)} := D_e$
- $d\Phi_1^{(n+1)} < -tol$ Solution non-admissible. Correction de l'opérateur tangent à effectuer

Comme l'évaluation de l'énergie libre est effectuée avec l'état de données matérielles le plus proche de l'état physiquement admissible, une tolérance tol est mise en place puisque l'on est susceptible d'introduire l'erreur dans le bilan énergétique.

4.3 Cas test

4.3.1 Principe et Modélisation de l'essai à dilatométrie bloquée

La vérification se réalise en considérant l'essai à dilatométrie bloquée (essai Satoh, voir [SAT 69]). Cet essai consiste à appliquer des cycles de chauffage-refroidissement sur une éprouvette bloquée en ses extrémités (voir la figure 4.1). Cet essai porte un grand intérêt pour nos partenaires industriels car ce chargement thermomécanique autobridé est semblable au chargement observé lors du soudage multipasse et permet de faire une prévision sur la contrainte résiduelle des pièces assemblées. Des essais Satoh ont été réalisés dans [DEP 04] sur de l'acier 316L. Plusieurs configurations ont été considérées en variant la vitesse de refroidissement. Dans notre étude, nous considérerons le cas du refroidissement à l'air libre.

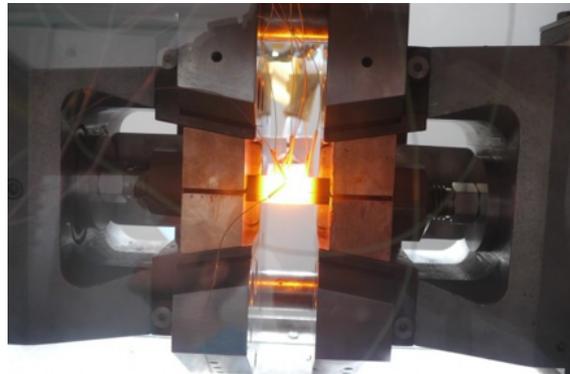


FIGURE 4.1 – Essai Satoh réalisé avec le système GLEEBLE à l'INSA de Lyon. Source : www.mecanium.fr

Tenant compte de ces considérations, la modélisation se fait seulement sur la partie utile de l'éprouvette. On considère un seul élément avec une modélisation 2D plane. Les conditions aux limites sont $u_y = 0$ pour les 4 noeuds et $u_x = 0$ pour le noeud N04 (voir Figure 4.2a). Le chargement thermique est une température imposée, uniforme dans l'élément et qui varie en fonction du temps pour simuler un cycle de chauffage-refroidissement. La déformation thermique est ainsi uniforme, dépend de la température θ telle que $\epsilon_{th} = \alpha_L \theta \mathbf{I}$ avec un coefficient de dilatation thermique $\alpha_L = 1.4 \times 10^{-5} (K^{-1})$ (Figure 4.2b)

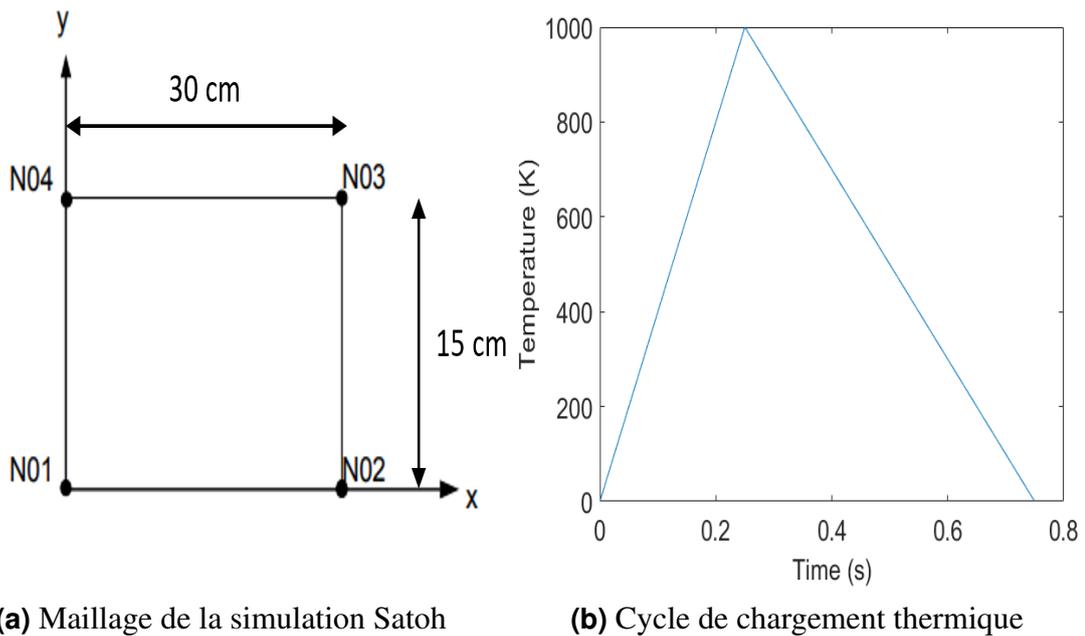


FIGURE 4.2 – Configuration de l'essai Satoh

L'objectif est de vérifier que le solveur DDCM arrive à reproduire le même comportement que la solution de référence par MEF, notamment l'évolution contrainte-température. On étudie deux cas, écrouissage isotrope et cinématique. La loi de référence est une loi élasto-plastique à écrouissage isotrope ou cinématique pur avec les paramètres suivants : $E = 210\text{GPa}$, $\nu = 0.3$, $\sigma_y = 200\text{MPa}$. Le module d'écrouissage est $L = E/10$ pour le cas isotrope et $H = E/10$ pour le cas cinématique. Pour rappel, le potentiel d'énergie libre pour dans le cas isotrope est donné par

$$\rho\psi(\epsilon, \epsilon_p, p) = \frac{1}{2}(\epsilon - \epsilon_p) : \mathbb{C} : (\epsilon - \epsilon_p) + \frac{1}{2}Lp^2 \quad (4.14)$$

Les lois d'état donnent

$$\sigma = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon}, \quad -\sigma = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon_p}, \quad R = \rho \frac{\partial \psi}{\partial p} = Lp \quad (4.15)$$

Dans le cas de l'érouissage cinématique, on a des expressions similaires

$$\rho\Psi(\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\epsilon}_p, \boldsymbol{\alpha}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_p) : \mathbb{C} : (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_p) + \frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha} : \mathbf{H} : \boldsymbol{\alpha} \quad (4.16)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\epsilon}}, \quad -\boldsymbol{\sigma} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\epsilon}_p}, \quad \mathbf{Y} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\alpha}} = \mathbf{H} : \boldsymbol{\alpha} \quad (4.17)$$

La dissipation de référence peut être calculée en utilisant le second principe. Dans le cas de l'érouissage isotrope et le critère de von Mises, nous avons

$$f(\boldsymbol{\sigma}, R) = J_2(\boldsymbol{\sigma}) - \sigma_y - R = 0$$

$$\Phi_1 = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_p - R\dot{p} \quad (4.18)$$

Dans le cas d'érouissage cinématique

$$f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{X}) = J_2(\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{Y}) - \sigma_y = 0$$

$$\Phi_1 = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_p - \mathbf{Y} : \dot{\boldsymbol{\alpha}} \quad (4.19)$$

4.3.2 Calcul DDCM

Afin d'adapter la méthode DDCM, on va raisonner avec la déformation purement mécanique en supposant que

$$\boldsymbol{\epsilon} = \underbrace{\boldsymbol{\epsilon}_e + \boldsymbol{\epsilon}_p}_{\boldsymbol{\epsilon}_{mec}} + \boldsymbol{\epsilon}_{th} \text{ avec } \boldsymbol{\epsilon}_{th} = \alpha_L \boldsymbol{\theta} \mathbf{I} \quad (4.20)$$

Le problème DDCM s'écrit donc comme une double minimisation de distance dans l'espace de phase composé de déformation mécanique et de contrainte. Les étapes de résolution sont :

— Etape globale

$$(\boldsymbol{\epsilon}_{mec}, \boldsymbol{\sigma}) = \arg \min_{(\boldsymbol{\epsilon}_{mec}, \boldsymbol{\sigma}) \in \mathcal{C}} \|(\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}_{mec}^* - \Delta\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^* - \mathbb{C}_{tan} : \Delta\boldsymbol{\epsilon})\|_Z$$

— Etape locale

$$(\boldsymbol{\epsilon}_{mec}^*, \boldsymbol{\sigma}^*) = \arg \min_{(\boldsymbol{\epsilon}_{mec}^*, \boldsymbol{\sigma}^*) \in \mathcal{D}} \|(\boldsymbol{\epsilon}_{mec} - \boldsymbol{\epsilon}_{mec}^*, \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^*)\|_Z$$

en respectant (3.1), (3.2), (4.20) et les diverses conditions aux limites.

La modélisation étant simple, la base de données est générée à partir de la solution de référence sans support géométrique, avec un pas de temps à Δt . Aucun enrichissement n'est réalisé.

4.3.3 Résultat

Nous traçons la contrainte uni-axiale σ_{yy} en fonction de la température. Les résultats issus du solveur DDCM et du solveur Newton-Raphson pour l'érouissage isotrope sont présentés dans Figure 4.3. Les résultats DDCM ont été réalisés avec deux pas de temps différents. Celle avec "petit pas de temps" était actuellement calculée avec le même pas de temps que la solution de référence et l'autre est avec un pas de temps $10\Delta t$. Les déviations au niveau des transitions élasto-plastiques montrent bien la nature explicite de l'algorithme. Néanmoins, avec le schéma de prédiction-correction et l'opérateur tangent, le solveur DDCM est capable d'obtenir une bonne précision par rapport au résultat de référence.

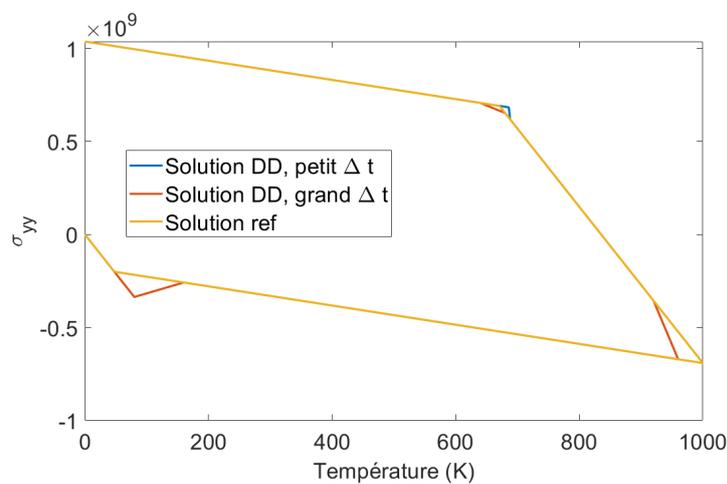


FIGURE 4.3 – Évolution de la contrainte uniaxiale - température. Érouissage isotrope

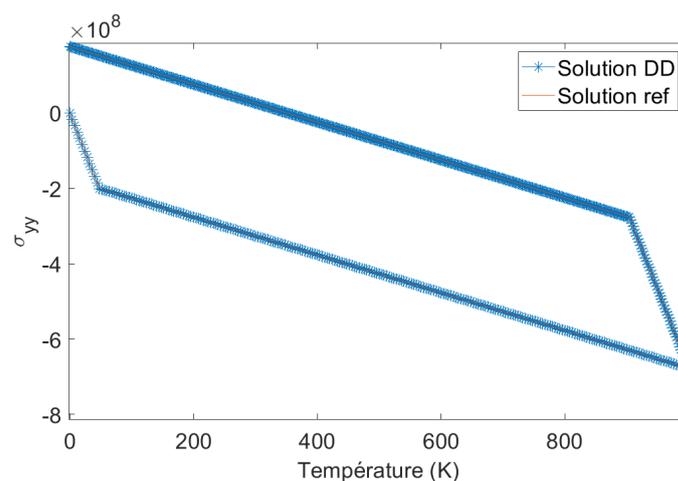
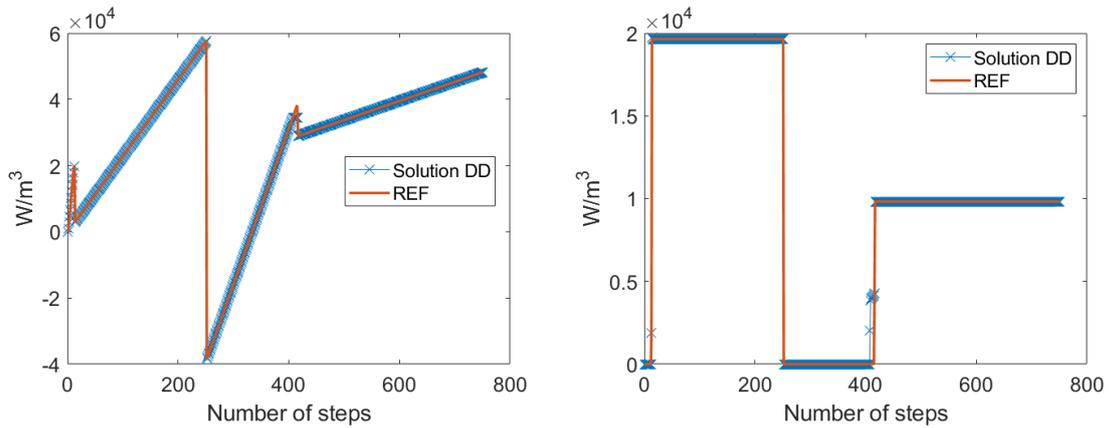


FIGURE 4.4 – Évolution de la contrainte uniaxiale - température. Érouissage cinématique

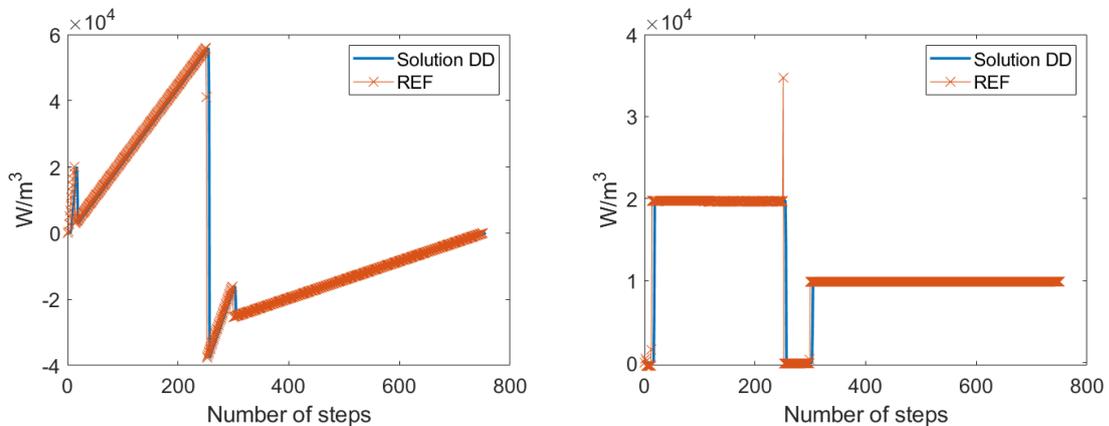
4. Application à un modèle thermomécanique

L'importance ici est de valider l'approche avec l'érouissage cinématique, pour cela on trace les mêmes courbes issues du solveur DDCM et de la solution de référence. Cette fois-ci, on réalise les deux simulations au même pas de temps Δt . Le résultat est reporté dans Figure 4.4. Nous avons obtenu une correspondance presque parfaite entre les deux résultats DDCM et le calcul de référence.



(a) Taux d'énergie libre - Érouissage isrope (b) Dissipation - Érouissage isotrope

FIGURE 4.5 – Comparaison de dissipation et taux d'énergie libre - Érouissage isotrope



(a) Taux d'énergie libre - Érouissage cinématique (b) Dissipation - Érouissage cinématique

FIGURE 4.6 – Comparaison de dissipation et taux d'énergie libre - Érouissage cinématique

On trace ensuite le bilan énergétique pour les deux solutions, notamment pour vérifier le bon calcul de la dissipation intrinsèque qui est le critère de transition. Les résultats sont illustrés dans les figures 4.5 et 4.6. Globalement, les deux résultats sont identiques sauf au niveau de certains moment où se déroule la transition de comportement. Comme

mentionné précédemment, vu que la formulation de dissipation sous forme discrétisée (4.13) dépend de $\Psi(\mathbf{z}^*)$ au lieu de $\Psi(\mathbf{z})$ et que les deux simulations étaient réalisées avec le même pas de temps, c'est-à-dire une quantité minime de données est disponible sur la simulation DDCM, ces instabilités sont plus ou moins attendues. Néanmoins, les deux résultats sont très comparables sur le bilan global (figures 4.7 et 4.8).

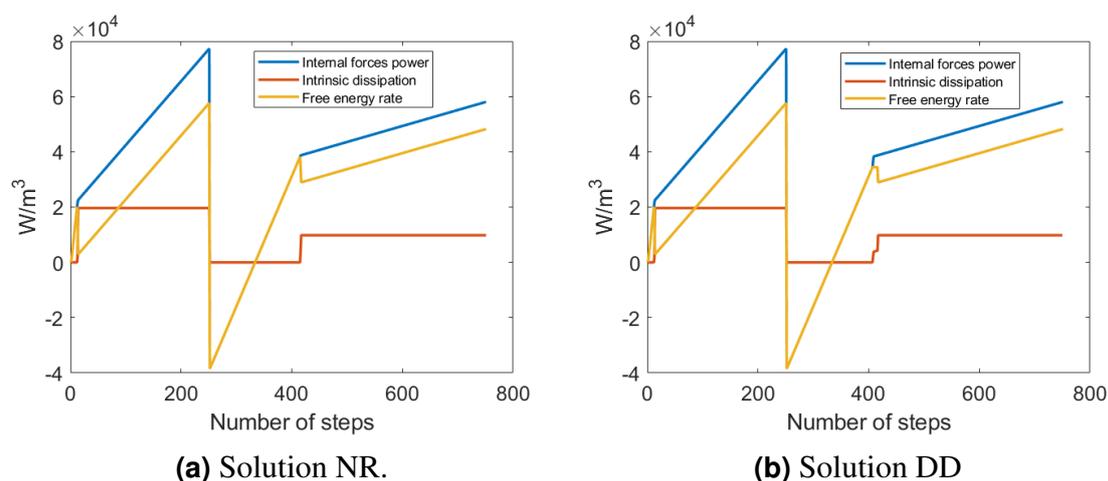


FIGURE 4.7 – Bilan énergétique - Écrouissage isotrope

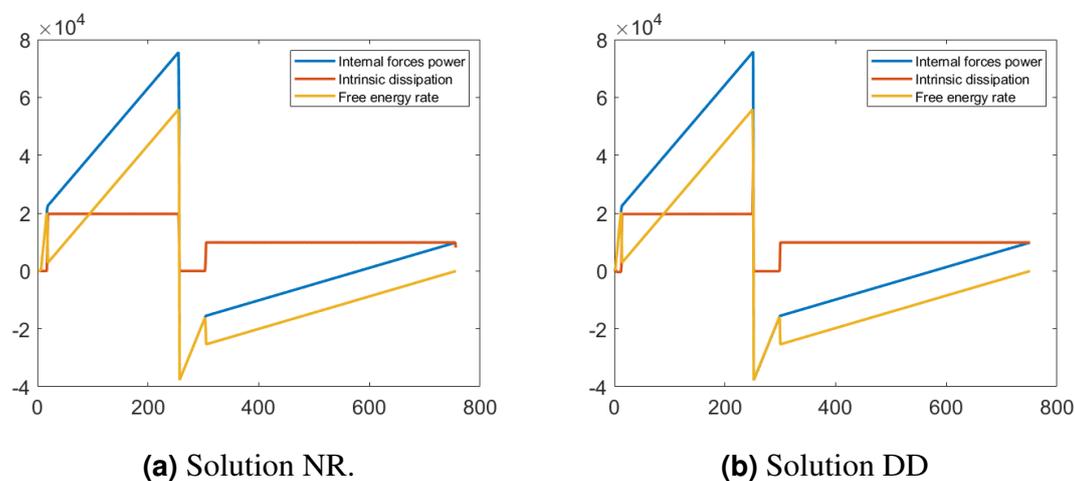


FIGURE 4.8 – Bilan énergétique - Écrouissage cinématique

4.4 Conclusions

Nous avons développés une nouvelle proposition des règles de transition de la base des données pendant la simulation DDCM, basée sur le seconde principe de la Thermodynamique. La base de données est étendue en rajoutant le potentiel d'énergie libre.

L'approche est testée pour un benchmark thermomécanique, l'essai Satoh et a démontré un résultat satisfaisant.

L'avantage de cette approche est que le seconde principe est universel, et donc généralisable pour d'autres types d'écouissage combiné, sous conditions d'avoir l'opérateur tangent et l'énergie libre. Concernant cette dernière, des calculs à l'échelle moléculaire [FRE 16] ou des analyses de dislocations des structures incorporées dans la dynamique moléculaire [BEG 15] peuvent fournir cette quantité. Des travaux récents avec une approche multi-échelle à l'échelle micro-structurale [KAR 21, KOC 16, GIE 22] peuvent éventuellement permettre de générer des données sous format compatible avec la méthode DDCM.

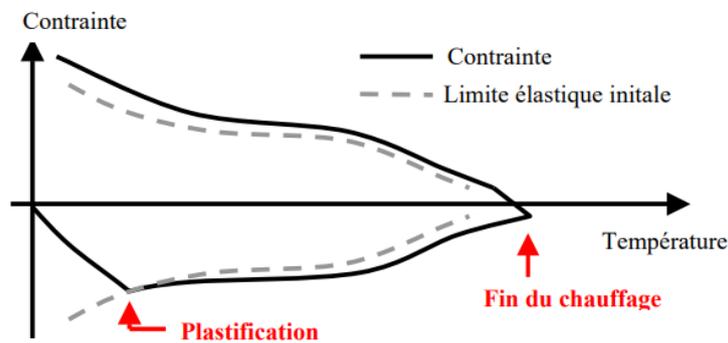


FIGURE 4.9 – Evolution de contrainte - température dans l'essai Satoh sur l'acier 316L. Photo extraite de la thèse de Depradeux [DEP 04]

Concernant la modélisation de l'essai Satoh, nous avons utilisé un benchmark simplifié où un seul type d'écouissage est considéré dans l'optique de valider l'approche DDCM. Évidemment, cette modélisation est loin d'être réaliste vis-à-vis des résultats expérimentaux. La figure 4.9 montre un résultat typique de l'essai Satoh sur l'acier 316L. Dans le cas d'un matériau élasto-plastique, l'imposition d'une déformation totale nulle conduit donc à l'apparition d'une déformation élastique égale qui compense la déformation thermique induite par le chauffage. Par conséquent, une contrainte de compression se développe, jusqu'à ce que celle-ci atteigne la limite élastique du matériau, à la température considérée, et que le matériau plastifie. Après, la contrainte suit la limite élastique du matériau qui diminue avec l'augmentation de la température, avec des valeurs de contraintes éventuellement un peu plus élevées que la limite élastique en raison de l'écouissage. Lors du refroidissement, le matériau se rétracte comme une décharge élastique, diminuant la contrainte de compression, jusqu'à ce que le matériau passe en traction. La contrainte change alors de signe, et augmente en traction de façon élastique, jusqu'à plastification. La contrainte augmente alors lors du refroidissement, au fur et à mesure que la limite d'élasticité augmente avec la diminution de la température. A la fin du cycle, une contrainte résiduelle de traction subsiste [DEP 04]. Ces observations indiquent que la prise en compte du comportement du matériau au cours du soudage est

plus compliquée que le modèle simple d'écroûissage cinématique retenu, sans parler de la dépendance des propriétés du matériau à la température.

Bilan et perspectives

Bilan

Dans ce manuscrit, un nouveau paradigme de la mécanique numérique, dénommée "Mécanique computationnelle pilotée par les données - *Data Driven Computational Mechanics*" a été exploré pour l'élasto-plasticité. Ce paradigme vise à remplacer la loi de comportement par une base de données apprises des mesures tensorielles de déformation - contrainte. Avec cette nouvelle approche, l'extension du formalisme au cas des comportements irréversibles avec des lois à seuil tels que l'élasto-plasticité sont des verrous scientifiques critiques à lever pour une preuve de concept avant l'application à l'échelle industrielle. Nous avons adressé ces questions dans les chapitre 2, 3 et 4 de ce manuscrit.

Avant d'aborder ces questions, nous avons fait un bref état de l'art sur les applications de la sciences des données dans la mécanique numérique en générale. Nous avons montré que l'interaction de deux disciplines se fait sur la modélisation des lois de comportement, et motive le développement des approches du pilotage par les données. Bien que la liste soit encore loin d'être exhaustive, nous avons identifié deux classes d'approches : avec modèle et sans modèle. Nous nous positionnons dans le contexte des approches sans modèle vu ces avantages : la conservation des principes physiques universels et la conservation des informations apportées par des données. La méthode choisie est la méthode de minimisation de distance, initiée par Kirchdoefer et Ortiz dans sa publication en 2016 [KIR 16].

Nous avons donc exploré cette méthode dans sa formulation originale pour les problèmes en élasticité linéaire, proposée originalement par Kirchdoefer et Ortiz [KIR 16], adaptée ensuite dans le cadre variationnel par Nguyen et al. [NGU 20] et consolidée avec des analyses mathématiques par Conti et al. [CON 17]. Nous avons insisté sur deux caractères qui font la distinction entre ce nouveau paradigme et l'approche classique. Premièrement, le problème aux limites en mécanique est reformulé dans le cadre variationnel en tant qu'un problème de minimisation de distance sous contrainte couplé avec un problème d'optimisation combinatoire : les états physiquement admissibles doivent respecter la compatibilité cinématique et l'équilibre, tout en minimisant la distance par rapport aux états matériellement admissible qui prennent des valeurs discrètes dans une base de données. Ce problème numérique est résolu par un schéma dédié qui consiste en une résolution du problème éléments finis linéaire avec un algorithme performant de recherche de données dans un espace métrique. Deuxièmement, le résultat DDCM converge

vers le résultat obtenu par loi de comportement quand l'échantillonnage des données dans l'espace de phase augmente. La question de la paramétrisation du paramètre artificiel dans le but de garantir la précision et le taux de convergence optimal a été aussi abordée. Il apparaît judicieux d'utiliser un tenseur avec des grandeurs comparables par rapport à l'opérateur tangent sur la variété matérielle cachée.

L'extension de cette nouvelle méthode pour les comportements irréversibles gouvernés par des lois à seuil a été abordée dans le chapitre 3. Afin de prendre en compte des évolutions inélastiques, la base de données a été augmentée par l'inclusion des opérateurs tangents définis localement sur des données. La formulation variationnelle originale a été adaptée en conséquence et la dépendance du tenseur artificiel de direction de recherche a été éliminée. La non-unicité des réponses en contrainte a été résolue par la classification a priori des données selon leur comportement tangentiel et la sélection des bases de données pour la recherche locale est pilotée par la fonction seuil élasto-plastique classique. Bien que ce choix implique l'existence du pseudo potentiel de dissipation, seule la forme de la fonction seuil a été considérée en faisant l'hypothèse de l'écroutissage isotrope et aucun modèle d'écroutissage n'était considéré. Le caractère explicite de la formulation étendue qui nuit à la performance vis-à-vis la décharge élastique a été résolu par la sélection cohérente des opérateurs tangents dans le cadre d'un schéma prédiction-correction. Une méthode d'augmentation des données synthétiques utilisées pour des exemples numériques a été aussi proposée dans l'optique d'amélioration de la couverture de l'espace de phase des données séquentielles dans le contexte élasto-plastique.

Finalement, une application au calcul thermomécanique a été présentée. Afin d'éviter la dépendance à l'hypothèse d'écroutissage isotrope et étendre l'approche sur d'autres types d'écroutissages, la base de données est encore étendue plus loin par le stockage de l'énergie libre. Avec cette dernière extension et les principes de la TPI, un nouveau critère de transition des bases de données a été présenté. Le résultat tiré d'un benchmark simple sur l'essai Satoh a montré la flexibilité de cette nouvelle approche dans la prise en compte d'un écroutissage complexe sans faire appel à des forces thermodynamiques supplémentaires.

Perspectives

Des perspectives pour l'amélioration et les applications industrielles de la stratégie proposée peuvent être envisagées :

- Le schéma de projection alternée utilisé dans toute la thèse est sous-optimal et une donc autre heuristique est à envisager dans l'optique de développer un solveur plus robuste pour une application industrielle. Ce point est particulièrement critique pour une extension éventuelle en grande transformation comme mentionné dans [PLA 20] car les contraintes physiques deviennent fortement non-linéaires. Des possibilités sont, soit d'étendre l'approche avec l'opérateur tangent vers le schéma de maximisation d'entropie [KIR 17b] ou soit un passage à la formulation MIQP de Kanno [KAN 19]

- Le point absolument critique dans cette thèse est la génération de la base de données. Nous avons considéré uniquement des données synthétiques et vu que la nécessité d'un échantillonnage très spécifique dans l'espace de phase, l'approche DDCM n'est pas applicable dans l'immédiat avec des données expérimentales réelles qui comportent du bruit et ne sont pas disponibles avec un large spectre de problèmes. Les travaux futurs devraient soit porter sur l'utilisation des bases de données générées objectivement par l'approche DDI développée par Leygue et al. [LEY 18], ou soit des données générées par des calculs multi-échelles dans le cadre proposé par Karapiperis et al. [KAR 21]. La stratégie de couplage entre le paradigme DDCM avec les calculs à l'échelle micro en utilisant des données vraies vont ouvrir des possibilités pour une application industrielle.

Annexe - Aspect pratique d'implémentation du solveur DDCM

Pendant toute la thèse, la programmation a été réalisée avec MATLAB. Vu sa capacité de calcul matriciel, une grande attention a été portée sur la vectorisation ainsi que la possibilité d'utiliser ses bibliothèques. Cette annexe n'a pas la vocation de détailler toute l'architecture du code. Le but est de revenir sur des astuces déduites à partir de nos expériences de programmation pendant cette thèse.

Accélération des opérations sur les champs mécaniques

```
%% Separating data set by material behavior
index = zeros(1,size(C_T,3));
parfor i=1:size(C_T,3)
    if C_T(:,:,i) == C_ref
        index(i) = 0;
    else
        index(i) = 1;
    end
end
%Number of point in yield
nnz(index)
```

FIGURE 4.10 – Classification des données par la comparaison de l'opérateur tangent

Plusieurs opérations dans le solveur DDCM sont à effectuer sur tous les points de Gauss dans la discrétisation par éléments finis. Etant indépendant vis-à-vis des points de Gauss, l'astuce pratique ici est de créer une matrice d'état contenant des vecteurs colonnes d'état pour un point de Gauss. On a deux possibilités suivantes :

Si les opérations ne sont pas faciles à vectoriser, la première possibilité est d'utiliser la boucle *parfor*. Cette fonction consiste à distribuer la tâche sur plusieurs workers (*travailleur*, grosso modo plusieurs instances de MATLAB tournant en parallèle). En

général, bien que cela soit facile à mettre en œuvre, cette stratégie sert souvent comme un dernier recours si l'opération n'est pas vectorisable. Un exemple est la classification des données par ses opérateurs tangents. L'opération de comparaison n'est pas vectorisable. Dans le morceau de code illustré dans la figure 4.10, le résultat de comparaison est stocké dans un tableau à une dimension.

Une autre possibilité est d'exploiter les opérations matricielles et les bibliothèques standards de MATLAB. Un exemple est la transformation des coordonnées co-énergétiques vers des coordonnées Euclidiennes. Dans notre cas test en 2D plan, un vecteur d'état local (physique ou matériel) consiste en un vecteur colonne à dimension 8×1 et donc la matrice d'état est une matrice $8 \times M$. La transformation se fait par la multiplication avec une matrice de transformation, comme illustrée dans la figure 4.11. La fonction *blkdiag* sert à construire une matrice en blocs diagonaux. La fonction *sqrtm* sert à calculer la matrice $C^{1/2}$ par l'algorithme des blocs de Schur [DEA 12].

```
C_demi = sqrtm(C_hyper);  
S = C_hyper\eye(size(C_hyper));  
S_demi = sqrtm(S);  
scaling_matrix = blkdiag(C_demi,S_demi);
```

FIGURE 4.11 – Matrice de transformation euclidienne

Un autre exemple est l'évaluation de la métrique Euclidienne sur tous les vecteurs d'état. La fonction *vecnorm* permet d'évaluer la norme Euclidienne pour toutes les vecteurs colonnes d'une matrice donnée en argument.

Cartographie de la mémoire - *Memory mapping*

Dans certains exemples numériques pour l'étude de la convergence en données, nous sommes conduits à l'utilisation des bases de données massives (jusqu'à 10^8 points). Afin d'opérer sur ces bases de données en évitant de les charger dans la mémoire d'ordinateur, la technique *Memory mapping* est utilisée. Les bases de données après l'enrichissement sont sauvegardées sous format binaire (voir la figure 4.12).

```

fileID = fopen('data_elas_record.dat','w');
fwrite(fileID, data_elas,'double');
fclose(fileID);
fileID = fopen('data_plas_record.dat','w');
fwrite(fileID, data_plas,'double');
fclose(fileID);
fileID = fopen('data_ctan_record.dat','w');
fwrite(fileID,C_T_plas,'double');
fclose(fileID);

```

FIGURE 4.12 – Sauvegarde des données sous format binaire

```

map1 = memmapfile(strcat(path,database,'data_elas_record.dat'), 'Format',{'double',[8,data_size(1)],'elas'});
% Elastic behaviour dataset
map2 = memmapfile(strcat(path,database,'data_plas_record.dat'), 'Format',{'double',[8,data_size(2)],'plas'});
% Plastic behavior dataset
map3 = memmapfile(strcat(path,database,'data_ctan_record.dat'), 'Format',{'double',[4,4,data_size(2)],'ctan'});

```

FIGURE 4.13 – Création de la cartographie des données

La fonction *memmapfile* (voir la figure 4.13) permet de créer des variables de cartographie. La cartographie de mémoire est un mécanisme qui met une partie d'un fichier, ou un fichier entier, sur le disque dur à une plage d'adresses mémoire dans l'espace d'adressage de MATLAB. MATLAB peut alors accéder aux fichiers sur le disque de la même manière qu'il accède à la RAM, ce qui accélère la lecture et l'écriture des fichiers. Cette technique permet de travailler avec les données d'un fichier comme s'il s'agissait d'un tableau MATLAB, notamment le passage des données par leur indice.

La recherche du voisinage le plus proche. Fonction *knn-search*

Cette fonction est le cœur de la partie de recherche des données. Elle permet de trouver le plus proche voisin dans la base de données X pour chaque point de requête Y et renvoie les indices des plus proches voisins dans Idx , un vecteur colonne. Idx a le même nombre de lignes que Y . Le format des requêtes accepté par cette fonction est donc, en effet, la transposée de la matrice d'états décrit précédemment. L'exemple d'utilisation dans le solveur DDCM pour l'élasto-plasticité est illustré dans la figure 4.15. Ainsi, remarquons que nous avons utilisé l'accès des données par leur indices directement sur la cartographie des données.

Avant d'utiliser cette fonction avec la recherche par arbre k-d, ce dernier doit être créé par la fonction *KDTreeSearcher*. Cette fonction prend la base des données avec les coor-

données déjà transformées vers la métrique Euclidienne et retourne la structure d'arbre k-d (voir la figure 4.14).

```
data_elas_s = scaling_matrix*data_elas;
data_plas_s = scaling_matrix*data_plas;
%Calling k-d tree constructor
%Normalement la fonction KdTree prend en argument la matrice data avec
%colonne = feature, ligne = observations. Nous c'est la transpose
elas_searcher = KDTreeSearcher(data_elas_s', 'Distance', 'euclidean');
plas_searcher = KDTreeSearcher(data_plas_s', 'Distance', 'euclidean');
```

FIGURE 4.14 – Création de la structure de recherche k-d tree

```
% Material behavior classification
physic_array_s = scaling_matrix*physic_array;
physic_array_e_s = physic_array_s(:,data_indicator == 0);
physic_array_p_s = physic_array_s(:,data_indicator == 1);

% Find the closest data point with kdtree. Don't forget that the kd tree
% was built with Euclidean scaling.
Index_e = knnsearch(kd_tree_e,physic_array_e_s', 'K', 1, 'IncludeTies', false, 'SortIndices', false);
Index_p = knnsearch(kd_tree_p,physic_array_p_s', 'K', 1, 'IncludeTies', false, 'SortIndices', false);

data_array = zeros(size(physic_array));
data_array(:,data_indicator==0) = data_map_e(:,Index_e);
data_array(:,data_indicator==1) = data_map_p(:,Index_p);
```

FIGURE 4.15 – Etape de minimisation locale réalisée par la fonction *knnsearch*

Bibliographie

- [AND 17] ANDONI A., LAARHOVEN T., RAZENSHTEYN I., WAINGARTEN E.
Optimal Hashing-based Time-Space Trade-offs for Approximate Near Neighbors. *Proceedings of the Twenty-Eighth Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms* Society for Industrial and Applied Mathematics, 2017.
- [ANG 16] ANGERMUELLER C., PÄRNAMAA T., PARTS L., STEGLE O.
Deep learning for computational biology. *Molecular systems biology*, vol. 12, n° 7, 2016, page 878.
- [ART 07] ARTHUR D., VASSILVITSKII S.
k-means++ : the advantages of careful seeding. *ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms*, 2007.
- [AYE 18] AYENSA-JIMÉNEZ J., DOWEIDAR M. H., SANZ-HERRERA J. A., DOBLARE M.
A new reliability-based data-driven approach for noisy experimental data with physical constraints. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 328, 2018, p. 752-774.
- [AYE 19] AYENSA-JIMÉNEZ J., DOWEIDAR M. H., SANZ-HERRERA J. A., DOBLARE M.
An unsupervised data completion method for physically-based data-driven models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 344, 2019, p. 120-143.
- [BAH 12] BAHMANI B., MOSELEY B., VATTANI A., KUMAR R., VASSILVITSKII S.
Scalable K-Means++. *Proc. VLDB Endow.*, vol. 5, n° 7, 2012, p. 622–633, VLDB Endowment.
- [BAH 21] BAHMANI B., SUN W.
A kd-tree-accelerated hybrid data-driven/model-based approach for poroelasticity problems with multi-fidelity multi-physics data. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 382, 2021, page 113868.
- [BAH 22] BAHMANI B., SUN W.
Manifold embedding data-driven mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 166, 2022, page 104927.

- [BAY 99] BAY B. K., SMITH T. S., FYHRIE D. P., SAAD M.
Digital volume correlation : Three-dimensional strain mapping using X-ray tomography. *Experimental Mechanics*, vol. 39, n° 3, 1999, p. 217-226.
- [BEC 90] BECKMANN N., KRIEGEL H.-P., SCHNEIDER R., SEEGER B.
The R*-Tree : An Efficient and Robust Access Method for Points and Rectangles. *SIGMOD Record*, vol. 19, n° 2, 1990, p. 322–331, Association for Computing Machinery.
- [BEG 15] BEGAU C., SUTMANN G., HARTMAIER A.
. « Free energy function of dislocation densities by large scale atomistic simulation », 2015.
- [BEL 14] BELYTSCHKO T., LIU W., MORAN B., ELKHODARY K.
Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures. Wiley, 2014.
- [BEN 75] BENTLEY J. L.
Multidimensional Binary Search Trees Used for Associative Searching. *Communications of the ACM*, vol. 18, n° 9, 1975, p. 509–517, Association for Computing Machinery.
- [BIS 06] BISHOP C. M., NASRABADI N. M.
Pattern recognition and machine learning, vol. 4. Springer, 2006.
- [BRU 16] BRUNTON S. L., PROCTOR J. L., KUTZ J. N.
Discovering governing equations from data by sparse identification of nonlinear dynamical systems. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 113, n° 15, 2016, p. 3932-3937.
- [BUL 22] BULIN J., HAMAEEKERS J., ARIZA M., ORTIZ M.
Interatomic-Potential-Free, Data-Driven Molecular Dynamics. *arXiv preprint arXiv :2208.04937*, , 2022.
- [CAR 20] CARRARA P., DE LORENZIS L., STAINIER L., ORTIZ M.
Data-driven fracture mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 372, 2020, page 113390.
- [CAR 21] CARRARA P., ORTIZ M., DE LORENZIS L.
Data-driven rate-dependent fracture mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 155, 2021, page 104559.
- [CEL 13] CELEBI M. E., KINGRAVI H. A., VELA P. A.
A comparative study of efficient initialization methods for the k-means clustering algorithm. *Expert Systems with Applications*, vol. 40, n° 1, 2013, p. 200-210.
- [CHI 13] CHINESTA F., LEYGUE A., BORDEU F., AGUADO J. V., CUETO E., GONZÁLEZ D., ALFARO I., AMMAR A., HUERTA A.
PGD-based computational vademecum for efficient design, optimization and control. *Archives of Computational methods in Engineering*, vol. 20, n° 1, 2013, p. 31–59, Springer.
- [CIF 22] CIFTCI K., HACKL K.
Model-free data-driven simulation of inelastic materials using structured data sets, tan-

- gent space information and transition rules. *Computational Mechanics*, , 2022, p. 1–11, Springer.
- [CON 17] CONTI S., MÜLLER S., ORTIZ M.
Data-Driven Problems in Elasticity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, vol. 229, 2017, p. 79-123.
- [CON 20] CONTI S., MÜLLER S., ORTIZ M.
Data-Driven Finite Elasticity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, vol. 237, n° 1, 2020, p. 1–33.
- [DAL 19] DALÉMAT M., CORET M., LEYGUE A., VERRON E.
Measuring stress field without constitutive equation. *Mechanics of Materials*, vol. 136, 2019, page 103087.
- [DEA 12] DEADMAN E., HIGHAM N. J., RALHA R.
Blocked Schur algorithms for computing the matrix square root. *International Workshop on Applied Parallel Computing* Springer, 2012, p. 171–182.
- [DEP 04] DEPRADEUX L.
Simulation numérique du soudage - Acier 316L : validation sur cas tests de complexité croissante. Thèse de doctorat, 2004. Thèse de doctorat dirigée par Jullien, Jean-François Génie civil Lyon, INSA 2004.
- [EGG 19] EGGERSMANN R., KIRCHDOERFER T., REESE S., STAINIER L., ORTIZ M.
Model-Free Data-Driven inelasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 350, 2019, p. 81-99.
- [EGG 21a] EGGERSMANN R., STAINIER L., ORTIZ M., REESE S.
Efficient data structures for model-free data-driven computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 382, 2021, page 113855.
- [EGG 21b] EGGERSMANN R., STAINIER L., ORTIZ M., REESE S.
Model-free data-driven computational mechanics enhanced by tensor voting. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 373, 2021, page 113499.
- [ERI 09] ERIKSSON A., VAN DEN HENGEL A.
Optimization on the manifold of multiple homographies. *2009 IEEE 12th International Conference on Computer Vision Workshops, ICCV Workshops*, 2009, p. 242-249.
- [FLA 21] FLASCHEL M., KUMAR S., DE LORENZIS L.
Unsupervised discovery of interpretable hyperelastic constitutive laws. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 381, 2021, page 113852.
- [FLA 22] FLASCHEL M., KUMAR S., DE LORENZIS L.
Discovering plasticity models without stress data. *npj Computational Materials*, vol. 8, n° 1, 2022, page 91.
- [FOR 65] FORGY E. W.
Cluster analysis of multivariate data : efficiency versus interpretability of classifications. *Biometrics*, vol. 21, 1965, p. 768-769.

- [FRE 16] FREITAS R., ASTA M., DE KONING M.
Nonequilibrium free-energy calculation of solids using LAMMPS. *Computational Materials Science*, vol. 112, 2016, p. 333-341.
- [FRI 77] FRIEDMAN J. H., BENTLEY J. L., FINKEL R. A.
An algorithm for finding best matches in logarithmic expected time. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, vol. 3, n° 3, 1977, p. 209–226, ACM New York, NY, USA.
- [FUH 22] FUHG J. N., HAMEL C. M., JOHNSON K., JONES R., BOUKLAS N.
. « Modular machine learning-based elastoplasticity : generalization in the context of limited data », 2022.
- [GAL 21] GALETZKA A., LOUKREZIS D., DE GERSEM H.
Data-driven solvers for strongly nonlinear material response. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 122, n° 6, 2021, p. 1538-1562.
- [GAU 16] GAUDINIER A., BRADY S. M.
Mapping transcriptional networks in plants : data-driven discovery of novel biological mechanisms. *Annual review of plant biology*, vol. 67, 2016, p. 575–594, Annual Reviews.
- [GEB 20] GEBHARDT C., SCHILLINGER D., STEINBACH M. C., ROLFES R.
A framework for Data-Driven Structural Analysis in general elasticity based on non-linear optimization : The static case. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 365, 2020, page 112993.
- [GHA 91] GHABOUSSI J., GARRETT JR J., WU X.
Knowledge-based modeling of material behavior with neural networks. *Journal of engineering mechanics*, vol. 117, n° 1, 1991, p. 132–153, American Society of Civil Engineers.
- [GIE 22] GIERDEN C., KOCHMANN J., WAIMANN J., SVENDSEN B., REESE S.
A Review of FE-FFT-Based Two-Scale Methods for Computational Modeling of Microstructure Evolution and Macroscopic Material Behavior. *Archives of Computational Methods in Engineering*, vol. 29, n° 6, 2022, p. 4115-4135.
- [GOL 84] GOLDAK J. A., CHAKRAVARTI A. P., BIBBY M.
A new finite element model for welding heat sources. *Metallurgical Transactions B*, vol. 15, 1984, p. 299-305.
- [GON 17] GONZALEZ D., AGUADO J. V., CUETO E., ABISSET-CHAVANNE E., CHINESTA F.
kPCA-Based Parametric Solutions Within the PGD Framework. *Archives of Computational Methods in Engineering*, vol. 25, 2017, p. 69-86.
- [HAL 75] HALPHEN B., SON NGUYEN Q.
Sur les matériaux standard généralisés. *Journal de Mécanique*, vol. 14, n° 1, 1975, p. 39-63.

- [HAS 04] HASHASH Y. M. A., JUNG S., GHABOUSSI J.
Numerical implementation of a neural network based material model in finite element analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 59, n° 7, 2004, p. 989–1005. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/nme.905>.
- [HE 20] HE Q., CHEN J.-S.
A physics-constrained data-driven approach based on locally convex reconstruction for noisy database. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 363, 2020, page 112791.
- [HEY 09] HEY A. J., TANSLEY S., TOLLE K. M. et al.
The fourth paradigm : data-intensive scientific discovery, vol. 1. Microsoft research Redmond, WA, 2009.
- [HU 08] HU J., GUO H., TSAI H.
Weld pool dynamics and the formation of ripples in 3D gas metal arc welding. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 51, n° 9, 2008, p. 2537-2552.
- [HUA 20] HUANG D., FUHG J. N., WEIBENFELS C., WRIGGERS P.
A machine learning based plasticity model using proper orthogonal decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 365, 2020, page 113008.
- [IBA 17] IBANEZ R., BORZACCHIELLO D., AGUADO J. V., ABISSET-CHAVANNE E., CUETO E., LADEVEZE P., CHINESTA F.
Data-driven non-linear elasticity : constitutive manifold construction and problem discretization. *Computational Mechanics*, vol. 60, n° 5, 2017, p. 813–826.
- [IBA 18] IBANEZ R., ABISSET-CHAVANNE E., AGUADO J. V., GONZALEZ D., CUETO E., CHINESTA F.
A Manifold Learning Approach to Data-Driven Computational Elasticity and Inelasticity. *Archives of Computational Methods in Engineering*, vol. 25, n° 1, 2018, p. 47–57.
- [IBA 19] IBANEZ R., ABISSET-CHAVANNE E., GONZALEZ D., DUVAL J.-L., CUETO E., CHINESTA F.
Hybrid constitutive modeling : data-driven learning of corrections to plasticity models. *International Journal of Material Forming*, vol. 12, n° 4, 2019, p. 717–725.
- [KAI 18] KAISER E., KUTZ J. N., BRUNTON S. L.
Discovering conservation laws from data for control. *2018 IEEE Conference on Decision and Control (CDC) IEEE*, 2018, p. 6415–6421.
- [KAN 19] KANNO Y.
Mixed-integer programming formulation of a data-driven solver in computational elasticity. *Optimization Letters*, , 2019, p. 1-10.
- [KAN 20] KANNO Y.
A kernel method for learning constitutive relation in data-driven computational elasticity. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, , 2020, p. 1-39.

- [KAR 21] KARAPIPERIS K., STAINIER L., ORTIZ M., ANDRADE J.
Data-Driven multiscale modeling in mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 147, 2021, page 104239.
- [KET 96] KETCHEN D. J., SHOOK C. L.
The application of cluster analysis in strategic management research : an analysis and critique. *Strategic Management Journal*, vol. 17, n° 6, 1996, p. 441-458.
- [KHA 04] KHAN S. S., AHMAD A.
Cluster center initialization algorithm for K-means clustering. *Pattern Recognition Letters*, vol. 25, n° 11, 2004, p. 1293-1302.
- [KIN 71] KINOSHITA N., MURA T.
Elastic fields of inclusions in anisotropic media. *physica status solidi (a)*, vol. 5, n° 3, 1971, p. 759-768.
- [KIR 16] KIRCHDOERFER T., ORTIZ M.
Data-driven computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 304, 2016, p. 81 – 101.
- [KIR 17a] KIRCHDOERFER T., ORTIZ M.
Data-driven computing in dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 113, 2017, p. 1697-1710.
- [KIR 17b] KIRCHDOERFER T., ORTIZ M.
Data Driven Computing with Noisy Material Data Sets. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 326, 2017, p. 622-641.
- [KOC 16] KOCHMANN J., WULFINGHOFF S., REESE S., MIANROODI J. R., SVENDSEN B.
Two-scale FE–FFT- and phase-field-based computational modeling of bulk microstructural evolution and macroscopic material behavior. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 305, 2016, p. 89-110.
- [KON 01] KONONENKO I.
Machine learning for medical diagnosis : history, state of the art and perspective. *Artificial Intelligence in medicine*, vol. 23, n° 1, 2001, p. 89–109, Elsevier.
- [LAD 10] LADEVÈZE P., PASSIEUX J.-C., NÉRON D.
The LATIN multiscale computational method and the Proper Generalized Decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 199, n° 21, 2010, p. 1287-1296. Multiscale Models and Mathematical Aspects in Solid and Fluid Mechanics.
- [LAN 89] LANGLEY P., ZYTKOW J. M.
Data-driven approaches to empirical discovery. *Artificial Intelligence*, vol. 40, n° 1-3, 1989, p. 283–312, Elsevier.
- [LEE 77] LEE D.-T., WONG C.-K.
Worst-case analysis for region and partial region searches in multidimensional binary search trees and balanced quad trees. *Acta Informatica*, vol. 9, n° 1, 1977, p. 23–29, Springer.

- [LEE 07] LEE J. A., VERLEYSSEN M.
Nonlinear dimensionality reduction, vol. 1. Springer, 2007.
- [LEY 18] LEYGUE A., CORET M., RÉTHORÉ J., STAINIER L., VERRON E.
Data-based derivation of material response. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 331, 2018, p. 184-196.
- [LEY 19] LEYGUE A., SEGHIR R., RÉTHORÉ J., CORET M., VERRON E., STAINIER L.
Non-parametric material state field extraction from full field measurements. *Computational Mechanics*, , 2019, p. 1-9.
- [LIN 16] LING J., KURZAWSKI A., TEMPLETON J.
Reynolds averaged turbulence modelling using deep neural networks with embedded invariance. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 807, 2016, p. 155–166, Cambridge University Press.
- [LIN 21] LINKA K., HILLGARTNER M., ABDOLAZIZI K. P., AYDIN R. C., ITSKOV M., CYRON C. J.
Constitutive artificial neural networks : A fast and general approach to predictive data-driven constitutive modeling by deep learning. *Journal of Computational Physics*, vol. 429, 2021, page 110010.
- [LLO 82] LLOYD S. P.
Least squares quantization in PCM. *IEEE Trans. Inf. Theory*, vol. 28, 1982, p. 129-136.
- [LU 17] LU Y.
Construction d’abaques numériques dédiés aux études paramétriques du procédé de soudage par des méthodes de réduction de modèles espace-temps. Theses, Université de Lyon, novembre 2017.
- [LU 18a] LU Y., BLAL N., GRAVOUIL A.
Space–time POD based computational vademecums for parametric studies : application to thermo-mechanical problems. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, vol. 5, n° 1, 2018, page 3.
- [LU 18b] LU Y., BLAL N., GRAVOUIL A.
Multi-parametric space-time computational vademecum for parametric studies : Application to real time welding simulations. *Finite Elements in Analysis and Design*, vol. 139, 2018, p. 62-72.
- [LU 19] LU Y., BLAL N., GRAVOUIL A.
Datadriven HOPGD based computational vademecum for welding parameter identification. *Computational Mechanics*, vol. 64, n° 1, 2019, p. 47-62.
- [MAC 67] MACQUEEN J.
Classification and analysis of multivariate observations. *5th Berkeley Symp. Math. Statist. Probability*, 1967, p. 281–297.

- [MAN 99] MANEEWONGVATANA S., MOUNT D. M.
Analysis of approximate nearest neighbor searching with clustered point sets. *arXiv preprint cs/9901013*, , 1999.
- [MAR 22] MARENIC E., SEYCHAL G., PASSIEUX J.-C.
Data driven approach in multiphysics framework : Application to coupled electro-mechanical problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 395, 2022, page 114959.
- [MAT 17] MATOUŠ K., GEERS M. G., KOUZNETSOVA V. G., GILLMAN A.
A review of predictive nonlinear theories for multiscale modeling of heterogeneous materials. *Journal of Computational Physics*, vol. 330, 2017, p. 192–220, Elsevier.
- [MER 16] MERCHANT N., LYONS E., GOFF S., VAUGHN M., WARE D., MICKLOS D., ANTIN P.
The iPlant collaborative : cyberinfrastructure for enabling data to discovery for the life sciences. *PLoS biology*, vol. 14, n° 1, 2016, page e1002342, Public Library of Science San Francisco, CA USA.
- [MON 19] MONTÁNS F. J., CHINESTA F., GÓMEZ-BOMBARELLI R., KUTZ J. N.
Data-driven modeling and learning in science and engineering. *Comptes Rendus Mécanique*, vol. 347, n° 11, 2019, p. 845-855. Data-Based Engineering Science and Technology.
- [MUJ 14] MUJA M., LOWE D. G.
Scalable Nearest Neighbor Algorithms for High Dimensional Data. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, vol. 36, n° 11, 2014, p. 2227-2240.
- [NGU 18] NGUYEN L. T. K., KEIP M.-A.
A data-driven approach to nonlinear elasticity. *Computers & Structures*, vol. 194, 2018, p. 97 – 115.
- [NGU 20] NGUYEN L. T. K., RAMBAUSEK M., KEIP M.-A.
Variational framework for distance-minimizing method in data-driven computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 365, 2020, page 112898.
- [NGU 22] NGUYEN L. T. K., AYDIN R. C., CYRON C. J.
Accelerating the distance-minimizing method for data-driven elasticity with adaptive hyperparameters. *Computational Mechanics*, vol. 70, n° 3, 2022, p. 621-638.
- [PEñ 99] PEÑA J., LOZANO J., LARRAÑAGA P.
An empirical comparison of four initialization methods for the K-Means algorithm. *Pattern Recognition Letters*, vol. 20, n° 10, 1999, p. 1027-1040.
- [PLA 20] PLATZER A.
Mécanique numérique en grandes transformations pilotée par les données : De la génération de données sur mesure à une stratégie adaptative de calcul multiéchelle. Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Nantes, 2020. Thèse de doctorat dirigée par Stainier, Laurent Mécanique des solides, des matériaux, des structures et des surfaces Ecole centrale de Nantes 2020.

- [PLA 21] PLATZER A., LEYGUE A., STAINIER L., ORTIZ M.
Finite element solver for data-driven finite strain elasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 379, 2021, page 113756.
- [POE 22] POELSTRA K., BARTEL T., SCHWEIZER B.
A data-driven framework for evolutionary problems in solid mechanics. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, vol. n/a, n° n/a, 2022, page e202100538.
- [PRU 23] PRUME E., REESE S., ORTIZ M.
Model-free Data-Driven inference in computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 403, 2023, page 115704.
- [RAJ 15] RAJANI N., MCARDLE K., DHILLON I. S.
Parallel k-nearest neighbor graph construction using tree-based data structures. *1st High Performance Graph Mining workshop*, vol. 1, 2015, p. 3–11.
- [RAM 17] RAMPRASAD R., BATRA R., PILANIA G., MANNODI-KANAKKITHODI A., KIM C.
Machine learning in materials informatics : recent applications and prospects. *npj Computational Materials*, vol. 3, n° 1, 2017, p. 1–13, Nature Publishing Group.
- [ROG 00] ROGER F.
Etude et modélisation de la formation d'un cordon de soudure à l'arc. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, LMS", 2000. Thèse de doctorat.
- [ROG 20] ROGER M., SCHWEIZER B.
Relaxation analysis in a data driven problem with a single outlier. *Calculus of Variations and Partial Differential Equations*, vol. 59, n° 4, 2020, page 119.
- [ROU 87] ROUSSEEUW P. J.
Silhouettes : A graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 20, 1987, p. 53-65.
- [RYC 09] RYCKELYNCK D.
Hyper-reduction of mechanical models involving internal variables. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 77, n° 1, 2009, p. 75-89.
- [RYC 12] RYCKELYNCK D., VINCENT F., CANTOURNET S.
Multidimensional a priori hyper-reduction of mechanical models involving internal variables. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 225, 2012, p. 28–43, Elsevier.
- [RÉT 18] RÉTHORÉ J., LEYGUE A., CORET M., STAINIER L., VERRON E.
Computational measurements of stress fields from digital images. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 113, n° 12, 2018, p. 1810-1826.
- [SAL 22] SALAHSHOOR H., ORTIZ M.
A model-free Data-Driven paradigm for in situ patient-specific prediction of human brain response to ultrasound stimulation. *bioRxiv*, , 2022, Cold Spring Harbor Laboratory.

- [SAT 69] SATOH K., OHNISHI T.
Transient Thermal Stresses of Weld Heat-Affected Zone by Both-Ends-Fixed Bar Analogy. *Journal of the Japan Welding Society*, vol. 38, n° 4, 1969, p. 359-371.
- [SCH 21] SCHMIDT D., MAULIK R., LYRAS K.
Machine learning accelerated turbulence modeling of transient flashing jets. *Physics of Fluids*, vol. 33, n° 12, 2021, page 127104.
- [SHA 06] SHAKHNAROVICH G., DARRELL T., INDYK P.
Nearest-Neighbor Methods in Learning and Vision : Theory and Practice (Neural Information Processing). The MIT Press, 2006.
- [SIM 00] SIMO J., HUGHES T.
Computational Inelasticity. Interdisciplinary Applied Mathematics Springer New York, 2000.
- [STA 19] STAINIER L., LEYGUE A., ORTIZ M.
Model-free data-driven methods in mechanics : material data identification and solvers. *Computational Mechanics*, , 2019, p. 1-13.
- [Ste 19] STEVEN L. BRUNTON, J. NATHAN KUTZ
Data-Driven Science and Engineering. Cambridge University Press, 2019.
- [SUQ 04] SUQUET
Rupture et Plasticité, vol. 1. Éditions de l'École polytechnique, 2004.
- [TEN 00] TENENBAUM J., DE SILVA V., LANGFORD J.
A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction. *Science*, vol. 290 5500, 2000, p. 2319-23.
- [TRI 08] TRINH NGOC T.
Sur la modélisation du comportement thermomécanique et métallurgique des aciers : application au procédé de soudage et de traitement thermiques. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, LMS, 2008. Thèse de doctorat dirigée par Dang Van, Ky Mécanique et matériaux Palaiseau, Ecole polytechnique 2008, 2008EPXX0035.
- [VAN 09] VAN DER MAATEN L., POSTMA E., VAN DEN HERIK J. et al.
Dimensionality reduction : a comparative review. *Journal of Machine Learning Research*, vol. 10, n° 66-71, 2009, page 13.
- [WAN 18] WANG K., SUN W.
A multiscale multi-permeability poroplasticity model linked by recursive homogenizations and deep learning. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 334, 2018, p. 337-380, Elsevier.
- [WEB 98] WEBER R., SCHEK H.-J., BLOTT S.
A Quantitative Analysis and Performance Study for Similarity-Search Methods in High-Dimensional Spaces. *VLDB*, 1998.
- [WU 20] WU L., NGUYEN V. D., KILINGAR N. G., NOELS L.
A recurrent neural network-accelerated multi-scale model for elasto-plastic heterogeneous materials subjected to random cyclic and non-proportional loading paths. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 369, 2020, page 113234.

[YIA 93] YIANILOS P. N.

Data Structures and Algorithms for Nearest Neighbor Search in General Metric Spaces.
Proceedings of the Fourth Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms,
SODA '93, USA, 1993 Society for Industrial and Applied Mathematics, p. 311–321.



FOLIO ADMINISTRATIF

THESE DE L'INSA LYON, MEMBRE DE L'UNIVERSITE DE LYON.

NOM : PHAM

(avec précision du nom de jeune fille, le cas échéant)

DATE de SOUTENANCE : 10/01/2023

Prénoms : Duc Khai Nguyen

TITRE : Mécanique computationnelle pilotée par les données – Extension pour l'élasto-plasticité et application thermomécanique

NATURE : Doctorat

Numéro d'ordre : 2023ISAL0001

Ecole doctorale : MEGA (ED162)

Spécialité : Génie Mécanique

RESUME :

La simulation des procédés thermomécaniques tels que le soudage demande une description fine des comportements du matériau afin de prendre en compte divers phénomènes multi-physiques. Vu l'aspect multiparamétrique de la loi retenue, l'identification et la calibration des paramètres deviennent difficiles dans certaines conditions extrêmes où les hypothèses ne sont plus valables.

Aujourd'hui, les techniques de mesure de champ complet et les stratégies de calcul multi-échelle permettent d'accéder à une large quantité sans précédent de données sur la réponse matérielle. La modélisation des comportements de matériau devient un goulot d'étranglement dans le flux des données. Au contraire, Kirchdoefer et Ortiz ont proposé une nouvelle approche, dénommée Data Driven Computational Mechanics \cite{kirchdoefer_data-driven_2016}, permettant d'incorporer les données du comportement du matériau dans la simulation prédictive. La réponse matérielle est représentée seulement par des données discrètes sous forme des couples tensoriels de déformation - contrainte. Le problème aux limites standard est reformulé en tant qu'une minimisation de distance entre les états physiquement admissibles du corps solide et la base de données. Dans cette thèse, nous explorons cette approche dans l'optique de développer une première preuve de concept visant des applications de la simulation du soudage. Premièrement, nous représentons les idées originales de Kirchdoefer et Ortiz dans un cadre variationnel pour faciliter la compréhension et l'implémentation dans les logiciels de calcul par éléments finis standards. Deuxièmement, nous proposons une extension pour l'élasto-plasticité dont la réponse matérielle contient des phénomènes irréversibles en exploitant l'espace tangent de la variété constitutive cachée et les lois de transition sous forme des lois à seuil. Finalement, une nouvelle approche pour gouverner la transition des bases de données, dérivée de la Thermodynamique des Processus Irréversibles (TPI) est présentée. La vérification se réalise par des cas tests académiques et un benchmark qui simule un essai thermomécanique de type Satoh.

MOTS-CLÉS : Data Driven, Elasto-Plasticité, Thermomécanique, Espace tangent, TPI.

Laboratoire (s) de recherche : LAMCOS

Directeur de thèse : Anthony GRAVOUIL, Nawfal BLAL

Président de jury : A déterminer

Composition du jury: David NERON, Laurent STAINIER, David RYCKELYNCK, Delphine BRANCHERIE, Anthony GRAVOUIL, Nawfal BLAL.