

Le calcul de structure piloté par les données en mécanique non linéaire

P. Ladevèze, D. Néron, P.-W. Gerbaud

LMT (ENS Paris-Saclay / CNRS / Université Paris-Saclay), {ladeveze,neron}@lmt.ens-cachan.fr

Résumé — Le concept de « Variété Constitutive Expérimentale » introduit ici, ainsi que les outils pour la construire, devraient permettre d'étendre le calcul piloté par les données (en anglais *data-driven computation*) aux problèmes à comportement fortement non linéaire et dépendant du temps.

Mots clefs — Big data, calcul de structure, non linéaire.

1. Introduction

Le calcul de structure piloté par les données fait partie, depuis peu, des problématiques impactées par le Big Data. En anglais, on parle de *data-driven computation*. Les travaux pionniers sont dus à Ortiz et Chinesta et leurs équipes [5,6,18,14,3]. Ortiz propose une vision où les données sont exploitées directement sans le moindre traitement. Par contre, Chinesta introduit une vision où la culture « matériaux » est prise en compte, au moins partiellement. Le travail [13] est lui aussi dans la même problématique, mais dans une vision multiéchelle des matériaux. Ces travaux pionniers et les contributions qui ont suivi apportent des réponses originales et très efficaces à des situations qui peuvent être qualifiées de particulières, car elles sont limitées à des comportements réellement simples, essentiellement élastiques. En conséquence, le traitement des comportements complexes reste un véritable challenge pour lequel nous introduisons ici une tentative de réponse pour les comportements en petites perturbations de type viscoplastique [10,11].

2. Principes et finalité

La démarche que nous proposons repose tout d'abord sur la séparation des équations sur l'espace-temps en :

- équations d'équilibre et de compatibilité ;
- relation de comportement.

Cette séparation est la base de la méthode LATIN de calcul de structures qui sera ici la méthode de calcul idéale [7,8,9] et c'est aussi le fondement de la méthode de l'erreur en relation de comportement [20]. Ici, nous nous plaçons dans le cadre des modèles de matériaux à variables internes ou cachées où le comportement est traduit par deux types de relations : les équations d'état et les équations qui régissent l'évolution de celui-ci. Il est aisé de voir que les variables internes additionnelles ne sont pas intrinsèques, ce qui nous a amené à introduire la formulation « normale » du comportement où les variables internes additionnelles « cinématiques » et « statiques » sont équivalentes au sens où les opérateurs qui les relient peuvent être choisis unitaires [7,8]. La conséquence est que le volet expérimental ne joue plus sur les équations d'état, excepté le tenseur de Hooke que nous supposons connu. Écrit en grandeurs généralisées, une interprétation géométrique du problème est donnée sur la Figure 1.

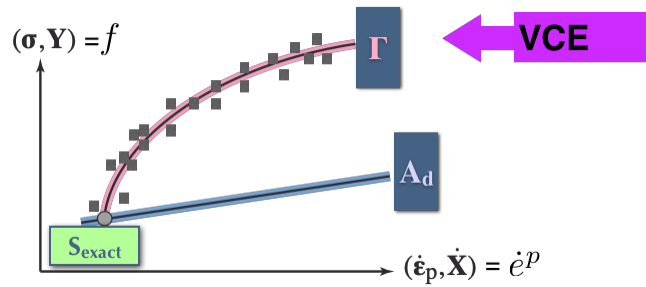


Figure 1 — Situation idéale

Dans le schéma précédent, la variété (\mathbf{Ad}), correspondant à l'admissibilité, regroupe les équations que l'on peut qualifier d'exactes. Par contre, la variété (Γ) est issue d'un certain nombre d'essais et de la Science des Matériaux. C'est uniquement la loi d'évolution de l'état qui est impactée par les données expérimentales qui dans le futur pourront être capitalisées et donc couvrir de façon dense l'espace d'intérêt. Ces points expérimentaux définissent ce que nous appelons la « Variété Constitutive Expérimentale » (VCE), dont la construction n'est pas une trivialité dès que l'on considère des comportements non linéaires et dépendant du temps.

La situation idéale décrite par la Figure 1 est le cas où la VCE est recouverte de points expérimentaux de façon suffisamment dense pour la définir en pratique. La résolution ne pose pas de difficulté particulière, la LATIN-PGD étant le solveur idéal car il sépare parfaitement la VCE des équations « exactes ».

Le calcul de structure piloté par les données nécessite un volume d'informations expérimentales qui, même s'il est minimisé, reste gigantesque et donc prohibitif. Aussi, nous en proposons une vision réaliste en revoyant complètement les objectifs des travaux pionniers. Pour nous, il ne s'agit plus de se placer à côté du savoir en Mécanique des Matériaux accumulé depuis des siècles, et qui continue à se développer, mais au contraire de l'exploiter, de l'incorporer pour essayer de faire mieux avec les méthodes du Big Data. C'est un changement de philosophie par rapport aux autres travaux en cours, où la Mécanique des Matériaux n'est exploitée que très partiellement. Il se traduit par les deux objectifs suivants que nous mettons ici en avant :

- rapprocher les points de calcul des résultats expérimentaux bruts et définir des indicateurs de proximité expérimentale ;
- élaborer de nouvelles générations de « modèles matériaux » au plus proche des résultats expérimentaux notamment dans les situations où la démarche « matériau » classique ne fonctionne pas bien, par exemple pour prendre en compte l'anisotropie ou des phénomènes additionnels comme la température, le vieillissement, la fatigue...

3. Construction de la Variété Constitutive Expérimentale

3.1. Les données expérimentales brutes

Supposons que l'on a accès à des histoires du couple taux de déformation inélastique / contrainte. En introduisant la déformation inélastique cumulée en tant que temps « matériau », les données expérimentales sont :

- $\mathbf{s}^i(p)$ sur $[0, P^i]$ $i \in N(p)$
- $\mathbf{s}^i(p) = (\boldsymbol{\varepsilon}_{p,p}^i, \boldsymbol{\sigma}^i, \dot{p}^i)(p)$ (1)
- $p = \int_0^t |\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p| dt$

On définit alors la Variété Constitutive Expérimentale par:

$$(\Sigma) = \{ \Sigma(p) | p \in [0, P] \} \text{ avec } \Sigma(p) = \{s^i(p) \ i \in N(p)\} \quad (2)$$

Notons d'abord, et c'est un point fondamental, que l'approche fonctionnelle du comportement des matériaux est à exclure pour les comportements complexes car elle exige un volume prohibitif d'essais : toutes les histoires virtuelles doivent être testées. La voie qu'il nous semble souhaitable d'emprunter est la vision à variables internes ou cachées dans le cadre de la Thermodynamique des Processus Irréversibles, vision en vogue depuis un demi-siècle. Ces variables internes ou cachées sont à ce stade complètement inconnues et bien sûr, la variété « brute » $\Sigma(p)$ ne permet pas en général de décrire le comportement du matériau à p fixé.

3.2. Variables internes et VCE

Les variables internes sont associées à une description hiérarchique et différentielle qui s'écrit dans le cas d'une seule variable interne additionnelle \mathbf{X} et à p fixé :

$$\begin{aligned} \bullet \quad \varepsilon_{p,p}^i &= \mathbf{g}(\sigma^i, \mathbf{X}^i), i \in N(p), \dot{p} > 0 \quad (\mathbf{P}(p)) \\ \bullet \quad \mathbf{X}_{,p}^i &= \mathbf{h}(\sigma^i, \mathbf{X}^i), i \in N(p), \dot{p} > 0 \quad (\mathbf{Q}(p)) \\ \bullet \quad \dot{p} &= \mathbf{f}(\sigma^i, \mathbf{X}^i), i \in N(p) \quad (\dot{\mathbf{p}}(p)) \end{aligned} \quad (3)$$

Les sous-variétés (\mathbf{P}) , (\mathbf{Q}) et $(\dot{\mathbf{p}})$ définissent la VCE structurée, toujours notée (Σ) . Leur construction est ce que nous appelons le « problème central ».

3.3. Le problème central

Le problème central est en fait la construction des variables internes ou cachées qui définissent les sous-variétés (\mathbf{P}) , (\mathbf{Q}) et $(\dot{\mathbf{p}})$. Le nombre de points expérimentaux est considérable et ainsi un premier réflexe est de se tourner vers les méthodes du Big Data comme KPCA, LLE, Laplacian, t-SNE... Ces méthodes, en fait très proches, cherchent à construire un système de coordonnées optimal de la variété. Elles reposent sur la notion de proximité définie généralement par la distance euclidienne [12,13, 15,16,17]. Ici, nous connaissons uniquement la variété $\Sigma(p)$ « brute » et sa structuration définie par (3) à laquelle est assujettie la variable interne \mathbf{X} a priori inconnue. Construire \mathbf{X} est un nouveau problème qui n'est pas atteignable aujourd'hui par les méthodes du Big Data. La démarche que nous avons élaborée part du fait que les fonctions \mathbf{g} , \mathbf{h} et \mathbf{f} sont univoques. C'est ainsi que nous avons introduit un « indicateur d'univocité » qui permet de voir si une fonction est, ou n'est pas univoque. Dans le cas où la fonction n'est pas univoque, il permet aussi de construire la variable interne ou cachée qui rend la fonction univoque. Appliquée aux relations (3), la variable interne \mathbf{X} est alors définie par la minimisation d'un potentiel \mathbf{u} :

$$(\mathbf{X}^i(p), i \in N(p), p \in [0, P]) = \arg \min_{\mathbf{X}} \mathbf{u}((s^i(p), \mathbf{X}^i(p)) \ i \in N(p), p \in [0, P]) \quad (4)$$

Les points expérimentaux sont alors :

$$(\varepsilon_{p,p}, \sigma, \mathbf{X}, \dot{p}) \ i \in N(p) \quad (5)$$

Pour décrire aisément la variété engendrée c'est à dire la VCE discrète, on utilise une des techniques du Big Data pour construire le système de coordonnées optimal au sens où le nombre de coordonnées est minimal.

3.4. Extrapolation

La VCE discrète étant définie par relativement peu de points expérimentaux, son exploitation nécessite de combler les « trous ». La technique Big Data exploitée précédemment propose également une extrapolation qui peut être intéressante mais qui a peu à voir avec la Physique. Aussi nous proposons de se tourner vers la Science des Matériaux et d'exploiter localement les modèles mathématiques classiques.

4. Capitalisation des points expérimentaux

Le calcul piloté par les données n'a de sens que dans le contexte où des volumes de résultats expérimentaux conséquents sont accessibles. Les techniques de mesure de champs, qui connaissent une véritable révolution [1,2] au niveau expérimental, sont indispensables. Ici nous considérons des mesures de champs surfaciques de déplacements. Ainsi, sur la zone de mesure, on connaît : le champ de déplacement \underline{u}_d et la contrainte normale qui est nulle.

Pour un comportement donné, la simulation de l'essai se traduit par un problème mal posé pour lequel on peut construire une solution en minimisant l'erreur en relation de comportement. Cette erreur est nulle si le comportement est bien décrit par la VCE. Dans le cas contraire, une stratégie itérative a été introduite pour compléter la VCE discrète constituée de points expérimentaux. La méthode est originale car contrairement à l'habitude en matière d'identification, la VCE n'est pas paramétrée. En d'autres termes, on n'identifie pas des paramètres.

4. Conclusion

Ce travail est une première réponse au calcul de structure basée sur les données pour des comportements complexes, à la fois non linéaires et dépendant du temps. Le solveur idéal est le solveur LATIN-PGD. La démarche que nous proposons met en avant le concept de Variété Constitutive Expérimentale et des outils originaux pour la construire. Pour finir, nous montrons comment les points « expérimentaux » peuvent être définis à partir des mesures par un procédé itératif. Nous sommes conscients que c'est une première étape, mais une réponse qui peut servir de paradigme pour la prise en compte des comportements les plus complexes : endommagement, viscoélasticité, vieillissement, grandes transformations... La prise en compte des dispersions dues au matériau et également des erreurs de mesure est une question majeure qui a toute notre attention et qui fera l'objet de travaux ultérieurs.

Références

- [1] Neggers J., Allix O., Hild F., Roux S. Big Data in Experimental Mechanics and Model Order Reduction: Today's Challenges and Tomorrow's Opportunities Archives of Computational Methods in Engineering, Springer Verlag, 25 (1):143-164, 2018
- [2] Hild F. et al. Toward 4D mechanical correlation, Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences 3: 17 doi-org/10.1186/s40323-016-0070-z, 2016
- [3] Ibanez R., Borzacchiello D., Aguado J., Abisset-Chavanne E., Cueto E., Ladevèze P., Chinesta F. Data-driven inverse analysis and simulation: constitutive manifold construction and problem discretization in nonlinear elasticity, Computational Mechanics, DOI 10.1007/s00466-017-1440-1, 2017
- [4] Kirchdoerfer T., Ortiz M. Data-driven computational mechanics, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 304: 81-101, 2016
- [5] Kirchdoerfer T., Ortiz M. Data-driven computing in dynamics, Computational Physics, arXiv:1706.04061v1, 2017
- [6] Kirchdoerfer T., Ortiz M. Data-driven computing with noisy material-data sets, Computational Physics, arXiv:1702.01574v2, 2017
- [7] Ladevèze P. The large time increment method for the analysis of structures with non linear constitutive relation described by internal variables, Comptes Rendus Académie Sciences Paris 309: 1095-1099, 1989
- [8] Ladevèze P. Nonlinear computational structural mechanics – New approaches and non- incremental methods of calculation, Springer NY (translated by J. G. Simmonds from Hermes 1996), 1999
- [9] Ladevèze P. On reduced models in nonlinear solid mechanics, European Journal of Mechanics A/Solids 60: 227-237, 2016
- [10] Ladeveze P., Chinesta F. Le concept de Variété Constitutive Expérimentale en Mécanique Non linéaire, Rapport LMT-2-2017
- [11] Ladeveze P. Le calcul de structure pilotée par les données en Mécanique Nonlinéaire, Rapport LMT-2018
- [12] Lee J., Verleysen M. Nonlinear dimensionality reduction, Springer, 2007
- [13] Liu Z., Bessa M., Liu W. K. Self-consistent clustering analysis: an efficient multi-scale scheme for inelastic heterogeneous materials, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 306: 319-341, 2016

- [14] Lopez E., Gonzalez D., Aguado J., Abisset-Chavanne E., Cueto E., Binetruy C., Chinesta F. A manifold learning approach for integrated computational material engineering, *Archives of Computational Methods in Engineering*, 1-11, 2016
- [15] Shaham U., Steinerberger S. Stochastic neighbor embedding separates well-separated clusters, *Machine Learning*, 2017
- [16] Van der Maaten L., Hinton G. Visualizing data using t-SNE, *Journal of Machine Learning Research*, 9: 2579-2605, 2008
- [17] Van der Maaten L. Learning a parametric embedding by preserving local structure, *Proceeding of the 12th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, 5: 384-391, 2009
- [18] Leygue A., Coret M., Réthoré J., Stainier L., Verron E. Data-based derivation of material response *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 331 (2018) 184–196
- [19] Bunte K., Haase S., Biehl M., Villmann T. Stochastic neighbour embedding (SNE) for dimension reduction and visualization using arbitrary divergences, *Neurocomputing* 90: 23-45, 2012
- [20] Ladeveze P., Pelle J.P. *Mastering Calculations in Linear and Nonlinear*, Springer 2005