

# Simulation Data-Driven à partir d'une base de donnée expérimentale. Test préliminaire sur des données synthétiques

A. Leygue<sup>1</sup>, L. Stainier<sup>1</sup>, M. Ortiz<sup>2</sup>

<sup>1</sup> GeM, Ecole Centrale Nantes, {adrien.leygue, laurent.stainier}@ec-nantes.fr

<sup>2</sup> Division of Engineering and Applied Sciences, CalTech, ortiz@aero.caltech.edu

**Résumé** — La *Data-Driven Computational Mechanics* (DDCM)[1] offre une autre façon de résoudre un problème aux limites. La loi de comportement y est remplacée par une base de données échantillonnant la réponse du matériau. La *Data-Driven Identification* (DDI) [3], basée sur la DDCM, permet d'échantillonner la réponse mécanique d'un matériau à partir de mesures de champ (*i.e.* DIC). On montre qu'il est possible de combiner les deux techniques pour simuler par DDCM un comportement identifié par DDI.

**Mots clés** — Data-Driven Computational Mechanics, corrélation d'images, réponse mécanique

## 1 Introduction

Le concept de loi de comportement est central en ingénierie mécanique et en calcul de structure car il permet de relier directement, dans le cas d'un comportement élastique, les déformations et les contraintes au sein d'un matériau. Une loi de comportement comporte en général un jeu de paramètres qui sont ajustés à partir d'un ensemble de données expérimentales [6]. Récemment, Kirchdoerfer & Ortiz [1, 2] ont introduit le concept de *Data-Driven Computational Mechanics* (DDCM) pour le calcul de structure impliquant des matériaux élastiques. Dans cette approche, le concept de loi de comportement s'efface au profit d'une base de données de couples déformation-contrainte qui échantillonnent la réponse mécanique du matériau. Cette approche demande de repenser l'identification de la réponse mécanique des matériaux. Dans le cadre de la DDCM, Leygue et. al [3] ont proposé une procédure appelée *Data-Driven Identification* (DDI) qui permet d'extraire des états matériaux à partir d'une collection de mesures de champ non homogènes correspondant à différents cas de chargement d'une même éprouvette. Ces mesures sont typiquement obtenues à l'aide de méthodes de corrélation d'image[7].

Dans ce travail, on illustre le chaînage de la DDI et de la DDCM en réalisant d'abord l'identification de la base de donnée matériau à l'aide de la DDI, puis en utilisant cette base afin de prédire la réponse d'une autre structure via une simulation DDCM. Les deux sections suivantes sont dédiées respectivement à la description de la DDCM, et de la DDI. Dans la section 4 on applique ces méthodes sur des données manufacturées.

## 2 Simulation Data-Driven

Le concept de Data-Driven Computational Mechanics, récemment proposé par Kirchdoerfer et Ortiz [1, 2] pour des problèmes d'élasticité offre une vision nouvelle de l'utilisation de relations de comportement en calcul de structure. Les aspects les plus importants de la méthode sont :

- la substitution de la loi de comportement, utilisée classiquement, par une base de données discrète d'états admissible pour le matériau considéré,
- un algorithme de minimisation de distance permettant d'assigner à chaque point de la structure un état de la base de donnée.

Considérons un système discrétisé de  $N$  nœuds et  $M$  points matériels provenant par exemple d'une discrétisation du problème par la méthode des éléments finis. Le déplacement du système est noté  $\mathbf{u} = \{\mathbf{u}_a\}_{a=1}^N$  où le déplacement  $\mathbf{u}_a$  du nœuds  $a$  est un vecteur de dimension  $n_a$ , typiquement 2 ou 3. Les forces appliquées au système sont notées  $\mathbf{f} = \{\mathbf{f}_a\}_{a=1}^N$ . En chaque point matériel du système, l'état mécanique est

caractérisé par un couple déformation-contrainte noté  $\mathbf{z}_e = (\boldsymbol{\epsilon}_e, \boldsymbol{\sigma}_e)$ . L'état mécanique global du système est noté  $\mathbf{z} = \{(\boldsymbol{\epsilon}_e, \boldsymbol{\sigma}_e)\}_{e=1}^M$ .

Sans aucun a priori sur le comportement, l'état mécanique global du système est soumis à la compatibilité des déformations et à l'équilibre des contraintes, qu'on note :

$$\boldsymbol{\epsilon}_e = \sum_a \mathbf{B}_{ea} \cdot \mathbf{u}_a, \forall e, \quad (1)$$

$$\sum_e w_e \mathbf{B}_{ea}^T \cdot \boldsymbol{\sigma}_e = \mathbf{f}_a \quad \forall a, \quad (2)$$

où  $\{\mathbf{B}_{ea}\}_{e=1, a=1}^{e=M, a=N}$  est donné par la géométrie et la connectivité du maillage et  $w_e$  est le poids d'intégration du point  $e$ .

Dans l'approche classique, le problème est fermé en considérant un modèle de comportement reliant les contraintes aux déformations :  $\boldsymbol{\sigma}_e = \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\epsilon}_e)$ . Dans l'approche Data-Driven on considère que le comportement n'est spécifié que par une base de données  $D$ , un ensemble discret d'états, appelés *états matériau* :  $D = \{(\boldsymbol{\epsilon}_i^*, \boldsymbol{\sigma}_i^*)\}_{i=1}^{N^*}$ . La taille de la base de donnée matériau est notée  $N^*$ . A chaque point matériel, on associe un état matériau :

$$\mathbf{y}_e = (\boldsymbol{\epsilon}_e^*, \boldsymbol{\sigma}_e^*) \in D. \quad (3)$$

L'état matériau global du système est noté  $\mathbf{y} = \{\mathbf{y}_e\}_{e=1}^M$ . La résolution d'un problème aux limites consiste alors à trouver un état mécanique global  $\mathbf{z}$ , compatible et équilibré, et un état matériau global  $\mathbf{y}$  *aussi proches l'un de l'autre que possible*. La proximité entre l'état matériau local et l'état mécanique local est évaluée via l'introduction d'une norme énergétique :

$$\|\mathbf{z}_e\|_{\mathbb{C}_e}^2 = \boldsymbol{\epsilon}_e : \mathbb{C}_e : \boldsymbol{\epsilon}_e + \boldsymbol{\sigma}_e : \mathbb{C}_e^{-1} : \boldsymbol{\sigma}_e,$$

où  $\mathbb{C}_e$  est un tenseur du quatrième ordre symétrique et défini positif. La distance entre l'état mécanique global et l'état matériau global est alors définie comme :

$$d(\mathbf{z}, \mathbf{y}) = \left( \sum_{e=1}^M w_e \|\mathbf{z}_e - \mathbf{y}_e\|_{\mathbb{C}_e}^2 \right)^{1/2}.$$

La solution d'un problème Data-Driven au sens de [1, 2] est définie comme :

$$\arg \min_{\mathbf{z}, \mathbf{y}} d(\mathbf{z}, \mathbf{y}), \quad (4)$$

sous trois contraintes :

1. la compatibilité des déformations mécaniques (1),
2. l'équilibre global des contraintes mécaniques (2),
3. l'appartenance de l'état matériau à la base de donnée (3).

La nature discrète de la dernière contrainte donne au problème une complexité combinatoire. Kirchdoerfer & Ortiz ont ainsi proposé pour sa résolution un algorithme dans lequel on effectue la minimisation de (4) alternativement sur  $\mathbf{z}$  et  $\mathbf{y}$  jusqu'à stagnation. La compatibilité (1) est imposée en effectuant la minimisation par rapport au champ de déplacement  $\mathbf{u}$ , l'équilibre (2) est imposé via des multiplicateurs de Lagrange  $\{\boldsymbol{\eta}_a\}_{a=1}^N$  et (3) est assuré via une recherche exhaustive de chaque de chaque état matériau local  $\mathbf{y}_e$  dans la base de donnée.

L'algorithme global s'écrit :

1. Initialisation de l'état matériau  $\mathbf{y} = \{(\boldsymbol{\epsilon}_e^*, \boldsymbol{\sigma}_e^*)\}_{e=1}^M$ .

2. Minimisation par rapport à  $\mathbf{z}$  :

$$\sum_k \sum_e w_e \mathbf{B}_{ej}^T : \mathbb{C}_e : \mathbf{B}_{ek} \mathbf{u}_k = \sum_e w_e \mathbf{B}_{ej}^T \mathbb{C}_e : \boldsymbol{\epsilon}_e^*, \forall j, \quad (5)$$

$$\boldsymbol{\epsilon}_e = \sum_j \mathbf{B}_{ej} \cdot \mathbf{u}_j, \forall e,$$

$$\sum_k \sum_e w_e \mathbf{B}_{ej}^T : \mathbb{C}_e : \mathbf{B}_{ek} \boldsymbol{\eta}_k = \mathbf{f}_j^X - \sum_e w_e \mathbf{B}_{ej}^T \boldsymbol{\sigma}_e^*, \forall j, \quad (6)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_e = \boldsymbol{\sigma}_e^* + \mathbb{C}_e : \sum_j \mathbf{B}_{ej} \cdot \boldsymbol{\eta}_j, \forall e.$$

3. Minimisation par rapport à  $\mathbf{y}$  :

$$\mathbf{y}_e = \arg \min_{\tilde{\mathbf{y}}_e \in D} \|\mathbf{z}_e - \tilde{\mathbf{y}}_e\|_{\mathbb{C}_e}^2, \forall e. \quad (7)$$

4. Itération de 2 et 3 jusqu'à convergence.

La résolution de (5) et (6) s'apparente à la résolution d'un problème d'élasticité linéaire pour lequel la matrice de raideur ne varie pas au cours des itérations. On peut donc utiliser un solveur efficace basé sur la factorisation de Cholesky de cette dernière. La résolution de (7) impose une recherche dans toute la base de données qui peut être accélérée à l'aide d'arbres de recherche de type *KdTree*. La convergence de l'algorithme proposé est explorée dans [1].

### 3 Identification Data-Driven

La méthode DDCM exposée dans la section précédente repose sur la disponibilité d'une base de donnée  $D$  représentative de la réponse mécanique du matériau. La nature multidimensionnelle de l'état matériau et la nécessité d'un échantillonnage suffisant de l'espace des phases peuvent rendre la construction de  $D$  complexe et coûteuse à l'aide de méthodes de caractérisation classiques (chargement uniaxial, biaxial, cisaillement pur). Leygue et al. ont proposé [3] une méthode, basée sur la DDCM, permettant d'identifier  $D$  à partir d'un ensemble de champs de déplacements générant des déformations non homogènes sur l'éprouvette et des efforts associés (ou leur résultante). La méthode DDI (Data-Driven Identification) est présentée ci-dessous.

La DDI considère un ensemble  $N^\alpha$  de données déjà discrétisées en espace (ou snapshots) indexés par  $\alpha$  obtenues sur des éprouvettes possiblement différentes comprenant :

- les déplacements nodaux  $\mathbf{u}^\alpha = \{\mathbf{u}_a^\alpha\}$ ,
- les matrices  $\mathbf{B}_{ea}^\alpha$  et les poids  $w_e^\alpha$ , permettant de calculer les déformations  $\epsilon_e^\alpha$  et d'évaluer l'équilibre mécanique,
- les forces nodales  $\{\mathbf{f}_a^\alpha\}$ . Dans le cadre d'un problème quasi-statique sans forces volumiques et uniquement sujet à des conditions de Neumann homogènes, toutes ces forces sont nulles excepté aux nœuds dont le déplacement est contraint (*i.e.* dans les mors).

En adoptant les notations de la section précédente on observe qu'à travers les déplacements  $\mathbf{u}^\alpha$  supposés connus, l'état mécanique  $\mathbf{z}^\alpha$  des différents snapshots est partiellement connu. Seules les contraintes mécaniques  $\sigma_e^\alpha$  sont indéterminées. L'état mécanique complet ainsi que la base de données  $D$  est déterminé via la résolution d'un problème similaire à (4) :

$$\arg \min_{\sigma_e^\alpha} \min_{\mathbf{y}_e^\alpha} \min_D \sum_{\alpha=1}^{N^\alpha} \sum_{e=1}^M w_e^\alpha \|\mathbf{z}_e^\alpha - \mathbf{y}_e^\alpha\|_{\mathbb{C}_e}^2, \quad (8)$$

sous deux contraintes :

1. l'équilibre global des contraintes mécaniques de chaque snapshot (2),
2. l'appartenance de l'état matériau de chaque snapshot à la base de donnée (3).

Afin de simplifier les notations on considère par la suite que  $\mathbb{C}_e^\alpha$  ne dépend ni de  $e$  ni de  $\alpha$ . L'algorithme de résolution proposé dans [3] adopte aussi une stratégie de minimisation alternée dont une version simplifiée peut s'écrire :

1. Initialisation de  $D$ . Les déformations  $\epsilon_j^*$  sont initialisées via l'algorithme des *k-means* avec  $k = N^*$ . Les contraintes  $\sigma_i^*$  sont initialisées à zéro.
2. Initialisation de l'état matériau  $\mathbf{y}_e^\alpha$  sur base du *clustering* résultant des *k-means* [5, 4].
3. Minimisation par rapport à  $\mathbf{z}^\alpha$  :

$$\begin{aligned} \sum_k \sum_e w_e^\alpha (\mathbf{B}_{ej}^\alpha)^T : \mathbb{C} : \mathbf{B}_{ek}^\alpha \eta_k &= \mathbf{f}_j^\alpha - \sum_e w_e^\alpha (\mathbf{B}_{ej}^\alpha)^T (\sigma_e^*)^\alpha, \forall j, \alpha, \\ \sigma_e^\alpha &= (\sigma_e^*)^\alpha + \mathbb{C} : \sum_j \mathbf{B}_{ej}^\alpha \cdot \eta_j, \forall e. \end{aligned}$$

4. Minimisation par rapport à  $D$  : chaque élément de  $D$  est remplacé par la moyenne, pondérée par  $w_e^\alpha$ , des états mécaniques qui lui sont associés.
5. Minimisation par rapport à  $\mathbf{y}$  :

$$\mathbf{y}_e^\alpha = \arg \min_{\mathbf{y}_e^\alpha \in D} \|\mathbf{z}_e^\alpha - \mathbf{y}_e^\alpha\|_{\mathbb{C}}^2, \forall e, \alpha. \quad (9)$$

6. Itération de 3..5 jusqu'à convergence.

Une étude paramétrique préliminaire des paramètres de l'algorithme DDI est faite dans [3].

## 4 Application

Dans cette section, on illustre l'identification, via la DDI, d'une base de donnée matériau à partir d'un ensemble de snapshots représentatifs de données expérimentales ; puis le calcul de la réponse d'une structure différente à l'aide de la DDCM en utilisant la base de données identifiée. Tous les problèmes présentés supposent des déformations infinitésimales et concernent des structures minces sous chargement quasi-statique avec l'hypothèse de contraintes planes.

### 4.1 Identification

On considère l'éprouvette virtuelle illustrée à la figure 1. Pour le maillage considéré on a  $N = 1340$  et  $M = 2416$ . Les déplacements sont bloqués sur le bord inférieur. Le champ de déplacement total  $\mathbf{u}^\alpha$  est supposé mesuré pour  $N^\alpha = 40$  snapshots pour lesquels on impose progressivement un déplacement vertical uniforme sur le bord supérieur de l'éprouvette. L'amplitude maximale de déplacement est égale à 5% de la hauteur de l'éprouvette. Les données sont générées à l'aide de la méthode des éléments finis pour le comportement élastique non-linéaire isotrope incompressible suivant :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= G(\boldsymbol{\epsilon} + 50\boldsymbol{\epsilon}^3) - p\mathbf{I}, \\ p &= -(\boldsymbol{\epsilon}_{xx} + \boldsymbol{\epsilon}_{yy}) - \alpha(\boldsymbol{\epsilon}_{xx} + \boldsymbol{\epsilon}_{yy})^3. \end{aligned}$$

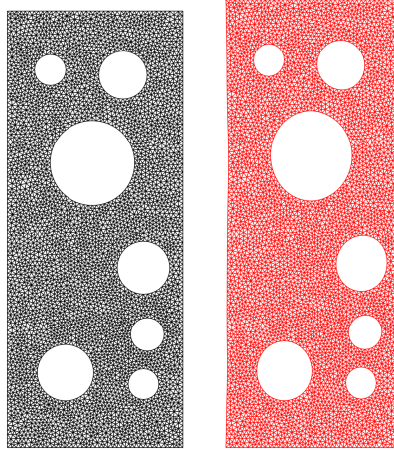


FIGURE 1 – Eprouvette virtuelle utilisée pour l'identification par DDI. Configuration non déformée (gauche) et déformée au maximum (droite),  $h/h_0 = 1.05$ .

Outre le champ de déplacement on mesure la résultante verticale  $F^\alpha$  des efforts sur le bord supérieur de l'éprouvette. On a choisi  $N^* = 5000$  afin d'avoir le ratio  $\frac{N^*M}{N^*} \approx 20$  qui semble être le rapport optimal d'après une étude paramétrique préliminaire. Le paramètre  $\mathbb{C}$  est un pseudo-tenseur d'élasticité linéaire pour lequel on a considéré un module de cisaillement égal à  $100G$ . L'algorithme DDI décrit dans la section précédente est appliqué avec une seule modification. Etant donné qu'on ne connaît que la résultante des efforts sur le bord supérieur, l'équation d'équilibre considérée à la place de (2) est :

$$\sum_e w_e^\alpha (\mathbf{B}_{ea}^\alpha)^T \cdot \boldsymbol{\sigma}_e^\alpha = 0, \quad (10)$$

pour les noeuds  $a$  n'appartenant pas aux bords supérieur et inférieur de l'éprouvette ; associée à :

$$\left( \sum_{a \in \Gamma_{\text{up}}} \sum_e w_e^\alpha (\mathbf{B}_{ea}^\alpha)^T \cdot \boldsymbol{\sigma}_e^\alpha \right) \cdot \mathbf{e}_y = F^\alpha, \quad (11)$$

où  $\Gamma_{\text{up}}$  est l'ensemble des nœuds appartenant au bord supérieur de l'éprouvette.

L'algorithme DDI converge en quelques dizaines d'itérations. L'étape la plus couteuse en temps de calcul est l'initialisation des déformations de la base de données (*k-means*). La figure 2 montre la comparaison entre les contraintes mécaniques  $\boldsymbol{\sigma}_e^\alpha$  identifiées et les *vraies* contraintes calculées à partir de la loi de comportement sous-jacente. On observe dans l'ensemble une bonne identification des contraintes, sauf pour  $\sigma_{xx}$ , ce qui est prévisible étant donné que l'éprouvette est sollicitée suivant  $y$ . On a moins de signal suivant  $x$  et l'amplitude de  $\sigma_{xx}$  dépend de l'amplitude de  $\sigma_{yy}$  à travers le couplage avec  $\sigma_{xy}$ .

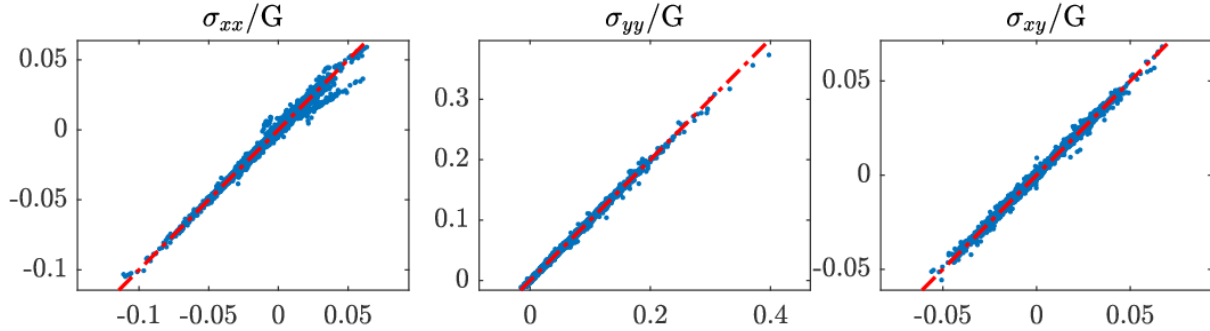


FIGURE 2 – Contraintes mécaniques identifiées en fonction des contraintes calculées via la loi de comportement (10).

## 4.2 Simulation

La base de donnée matériau  $\{(\boldsymbol{\epsilon}_i^*, \boldsymbol{\sigma}_i^*)\}_{i=1}^{N^*}$  identifiée ci-dessus est maintenant utilisée pour simuler, par l'algorithme DDCM, la structure représentée à la figure 3.

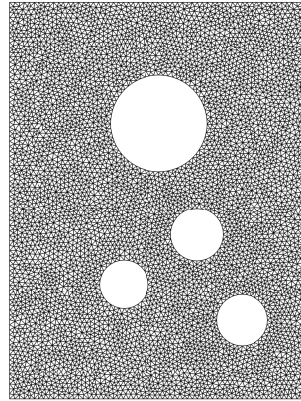


FIGURE 3 – Epreuve virtuelle utilisée pour la simulation DDCM,  $\Delta h_{\text{max}}/h_0 = 05$ .

Le bord inférieur est maintenu fixe tandis qu'on impose un déplacement vertical sur le bord supérieur de l'éprouvette. Afin d'avoir un chargement compatible avec la base de donnée identifiée, l'amplitude maximale de déplacement est égale à 5% de la hauteur de l'éprouvette. Pour toutes les étapes de chargement, la DDCM converge en moins de 20 itérations. A la figure 4, on compare déformations et contraintes mécaniques calculées par l'approche DDCM avec celles obtenues via une simulation EF équivalente. Les conclusions sont similaires : la nature même des données utilisées pour la DDI induit de bien meilleures prédictions et moins de dispersion pour  $\epsilon_{xy}, \epsilon_{yy}, \sigma_{xy}, \sigma_{yy}$  que pour  $\epsilon_{xx}$  et  $\sigma_{xx}$ . La résultante des efforts dans le mors supérieur en fonction du déplacement est affichée à la figure 5 pour la simulation DDCM et pour la simulation EF. Etant donnée la bonne prédiction des contraintes, il n'est pas surprenant d'observer un très bon accord entre FE et DDCM.

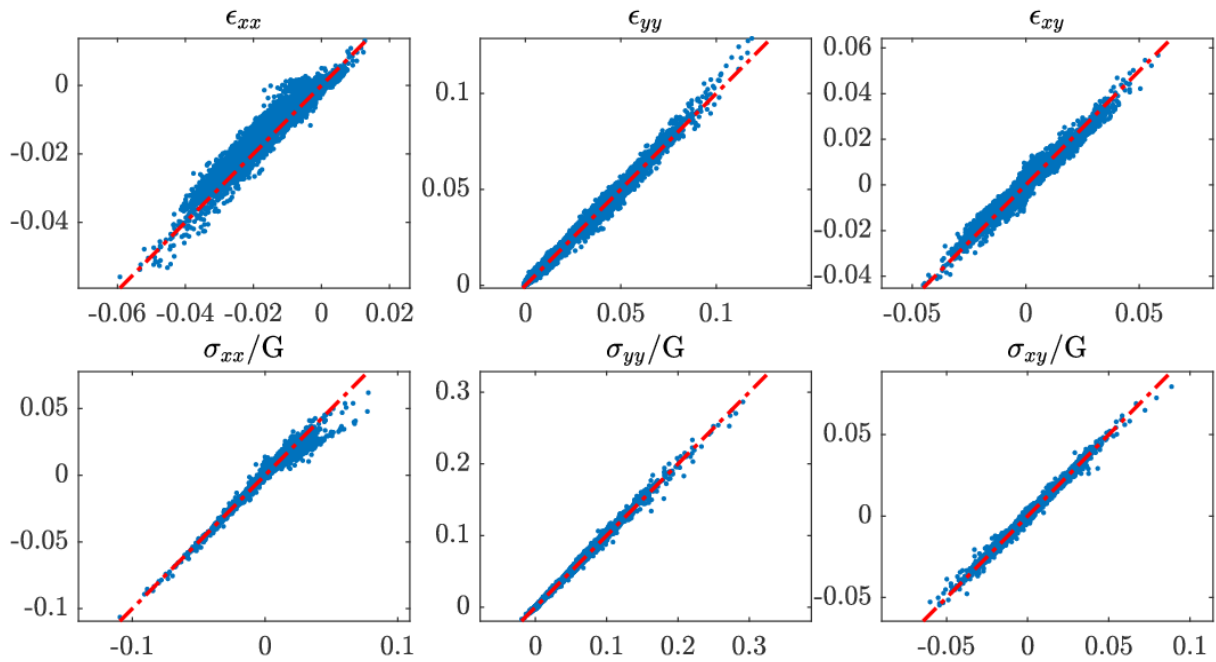


FIGURE 4 – Etats mécaniques calculés par DDCM en fonction des valeurs calculées par éléments finis via la loi de comportement (10).

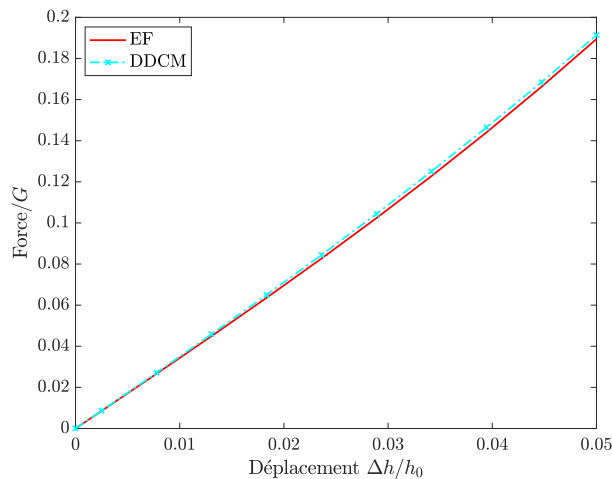


FIGURE 5 – Force dans le mors supérieur en fonction du déplacement.

## 5 Discussion & Conclusions

On a montré comment il est possible de combiner les approches DDCM et DDI afin de réaliser un cycle complet d'identification de la réponse d'un matériau suivi de la simulation d'une structure à l'aide de la base de donnée matériau identifiée. Les résultats montrent l'importance d'utiliser des données riches de par le fait que la base de donnée est à l'image des données qui servent à la calculer. Il est toutefois possible d'obtenir de très bonnes prédictions par la DDCM dans le cas où les données d'identification sont à l'image de l'utilisation qui sera faite de la base de données.

Un des atouts principaux de cette méthode réside dans le peu de paramètres algorithmiques et l'absence de choix à priori d'un modèle de comportement pour le matériau identifié. La base de données calculée s'ajuste pour expliquer au mieux les données d'identification. En particulier les comportements linéaires et non-linéaires sont traités de façon équivalente.

Les travaux futurs et en cours doivent permettre d'étendre la méthodologie proposée au cas de déformations finies ainsi qu'à des comportements non-élastiques.

## Références

- [1] T. Kirchdoerfer, & M. Ortiz, *Data-driven computational mechanics*. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 304, 81–101, 2016.
- [2] T. Kirchdoerfer, & M. Ortiz, *Data-Driven Computing with Noisy Material-Data Sets*. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 326, 622–641, 2017.
- [3] A. Leygue, M. Coret, J. Réthoré, L. Stainier, E. Verron, *Data-based derivation of material response*. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 331, 184–196, 2018.
- [4] S. Lloyd, *Least squares quantization in PCM*. IEEE Transactions on Information Theory, 28(2), 129–137. <http://doi.org/10.1109/tit.1982.1056489>, 1982.
- [5] J. MacQueen, *Some methods for classification and analysis of multivariate observations*. Presented at the Proceedings of the fifth Berkeley symposium on Mathematical Statistics and Probability, 1,281–297, 1967.
- [6] J. Réthoré, Muhibulah, T. Elguedj, M. Coret, P. Chaudet, & A. Combescure, *Robust identification of elastoplastic constitutive law parameters from digital images using 3D kinematics*. International Journal of Solids and Structures, 50(1), 73-85, (2013).
- [7] M.A. Sutton, J.J. Orteu, & H. Schreier, *Image Correlation for Shape, Motion and Deformation Measurements*. Springer Science & Business Media, 2009.