

# Calibration élastique de milieux discrets via une réduction de modèle PGD

J. Girardot<sup>1</sup>, E. Prulière<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Arts et Métiers ParisTech, CNRS, I2M Bordeaux, 33400 Talence  
jeremie.girardot@ensam.eu

**Résumé** — Les méthodes discrètes actuelles permettent de modéliser un comportement mécanique continu à partir d'un ensemble de liens mécaniques reliés entre eux. Les méthodes lattice en sont un bon exemple. L'inconvénient majeur de cette approche est la nécessité de réaliser des opérations de calibrations préalables pour relier le comportement mécanique émergent attendu aux paramètres rhéologiques du lien qualifié de 'microscopique'. Il est proposé dans ce travail d'utiliser une technique de réduction de modèle déjà éprouvée pour les analyses paramétriques : la décomposition propre généralisée (PGD). Les résultats sur un milieu discret composé de poutres élastiques ont montré l'efficacité de cette technique pour établir des abaques de calibration. Plusieurs hypothèses sur le comportement de ces structure ont aussi pu être vérifiées.

**Mots clés** — DEM, milieux discrets, calibration, PGD, lattice, poutre élastique

## 1 Introduction

L'approche discrète a initialement été développée pour les milieux granulaires [1]. Elle consiste à faire le bilan d'efforts de contacts sur une multitude d'éléments dits 'discrets' et généralement sphériques. Le suivi de la position de ces éléments au cours du temps est ensuite réalisé via une intégration des accélérations, dans le cas de la dynamique des contacts régularisés [2]. Cette approche a été élargie aux milieux continus et homogènes par plusieurs auteurs [3, 4, 5], entre autres..., au moyen de liens cohésifs. Dans ces différents travaux, ces liens sont positionnés grâce à leurs extrémités nodales. La position de ces noeuds est obtenue via différents algorithmes qui peuvent être regroupés en deux catégories :

- des algorithmes basés sur un problème d'empilement granulaire d'éléments discrets [6] ;
- des algorithmes basés sur une dispersion aléatoire d'un quadrillage régulier de noeuds [7].

Le domaine finale est donc un milieu dit 'discret' mais ayant un comportement émergent continu et homogène. L'avantage de ce type de représentation se trouve alors dans sa capacité à pouvoir facilement (au sens numérique) représenter des mécanismes de fissuration et de contact.

Une calibration est néanmoins nécessaire pour relier les paramètres du lien cohésif à celui du matériau homogène désiré [8, 9]. Dans les approches utilisant un lien élastique et une cinématique de poutre de Bernoulli, la calibration relie ainsi le module d'Young, le coefficient de Poisson et le rayon de la poutre (supposée cylindrique) au module d'Young et au coefficient de Poisson du matériau à simuler.

Actuellement, cette étape de calibration s'effectue à chaque nouveau travail de simulation et il n'existe pas à la connaissance des auteurs d'abaques pour faciliter la mise en oeuvre numérique.

En se basant sur le travail de Prulière *et al.* [10], le travail proposé ici s'attache à développer une approche de réduction de modèle basée sur la méthode 'Proper Generalized Decomposition' (PGD) pour construire en des temps de calcul très courts une abaque complète d'un milieu discret considéré. Cette étude se limitera aux liens cohésifs de type poutre élastique et pour une stratégie de positionnement des noeuds de type granulaire basée sur les travaux de André *et al.* [6]. Après avoir détaillé la mise en oeuvre PGD paramétrique appliquée à un ensemble de poutres, les résultats de calibration seront ensuite comparés à une référence de la littérature. Enfin, l'influence sur les courbes de calibration de la densité de liens cohésifs au sein du domaine discret sera analysée.

## 2 Génération du domaine

### 2.1 Empilement granulaire

Dans ces travaux, la génération du domaine se base sur les travaux de André *et al.* [6, 9]. Un assemblage granulaire est réalisé dans une géométrie cylindrique en trois dimensions afin d'obtenir à la fin la position des éléments discrets respectant des propriétés classiques de remplissage granulaire tel qu'un nombre de coordination proche de 6.2. Ces propriétés d'agencement granulaires assurent un positionnement homogène des éléments dans un volume 3D. Ensuite, un lien cohésif est inséré entre chaque particule en contact. La figure 1 représente le résultat final de cette opération de création de notre géométrie initiale avec le positionnement des éléments discrets (dont le rayon est tiré aléatoirement selon une loi gaussienne) avec le réseau de liens cohésifs résultant.

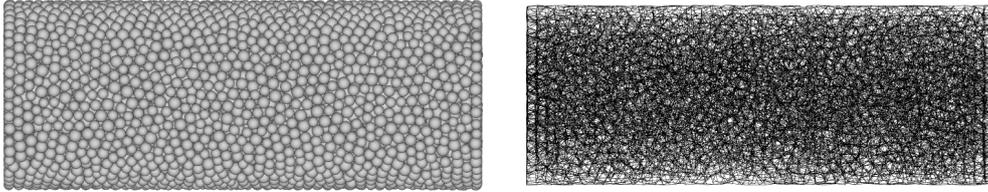


FIGURE 1 – Échantillon cylindrique (vue orthographique) issue d'un agencement granulaire 3D (à gauche) et visualisation des liens résultants (à droite).

Dans la suite de ces travaux, les analyses de calibrations seront menées sur différentes densités de poutres dans le même volume. La figure 2 présente trois densités différentes correspondant à un nombre croissant de liens cohésifs.

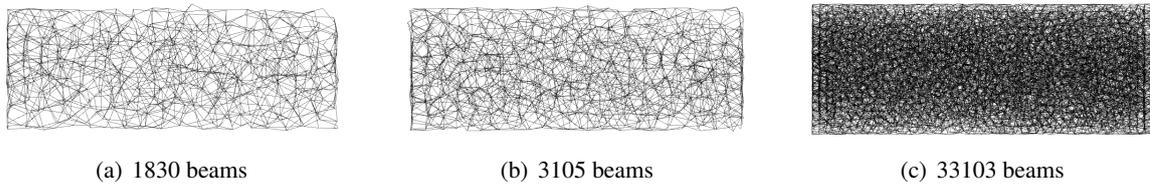


FIGURE 2 – Trois échantillons de densité de liens croissantes (600, 1000 et 10000 poutres).

### 2.2 Modèle de poutre

Une poutre standard de Bernoulli est considéré par la suite avec les coordonnées de son repère local  $(x, y, z)$  défini tel que la longueur de la poutre soit suivant l'axe  $\vec{x}$ . Les déplacements et rotations sont notés respectivement :  $u$ ,  $v$ ,  $w$ ,  $\theta_x$ ,  $\theta_y$ , et  $\theta_z$  et le vecteur dit 'déplacement' devient :

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \\ \theta_x \\ \theta_y \\ \theta_z \end{pmatrix} \quad (1)$$

On utilise des poutres cylindriques de longueur  $L$  et de diamètre  $D$ . Les moments quadratiques par rapport aux axes  $y$  et  $z$  sont :

$$I_{yy} = I_{zz} = I = \frac{\pi D^4}{32} \quad (2)$$

Le moment quadratique par rapport au centre de surface est donc  $J = I/2$  et l'aire de la section est  $S = \frac{\pi}{4}D^2$ . Le matériau constitutif des poutres est supposé avoir un comportement linéaire, élastique avec

un module d'élasticité  $E$  et un coefficient de Poisson  $\nu$ . Le second coefficient de Lamé est donc :

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (3)$$

La forme faible de l'équation d'équilibre de la poutre en négligeant les effets d'inertie est donnée par :

$$\int_0^L ES \frac{du^*}{dx} \frac{du}{dx} + \frac{\mu I}{2} \frac{d\theta_x^*}{dx} \frac{d\theta_x}{dx} + EI \frac{d\theta_y^*}{dx} \frac{d\theta_y}{dx} + EI \frac{d\theta_z^*}{dx} \frac{d\theta_z}{dx} dx = \mathcal{W}_{ext}(\vec{u}^*) \quad (4)$$

$\mathcal{W}_{ext}(\vec{u}^*)$  est le travail virtuel associé au chargement extérieur. En négligeant la déformation liée au cisaillement transverse, les rotations de section sont liées aux déplacements par :  $\theta_y = \frac{dw}{dx}$  et  $\theta_z = \frac{dv}{dx}$ .

### 3 Proper Generalized Decomposition for a parametric Bernoulli Beam

#### 3.1 Parametric Proper Generalized Decomposition approximation

Pour construire l'ensemble des solutions dans l'espace des paramètres considérés, nous cherchons les solutions de l'Eq. (4) pour des valeurs de  $E$  dans l'intervalle  $[E_{min}, E_{max}]$ , pour des valeurs de  $\nu$  dans l'intervalle  $[\nu_{min}, \nu_{max}]$  et pour des valeurs de  $D$  dans l'intervalle  $[D_{min}, D_{max}]$ .  $E$ ,  $\nu$  et  $D$  sont supposés constantes le long de la poutre.

Plusieurs stratégies sont envisageable pour construire l'ensemble des solutions paramétriques du problème (surfaces de réponses, Monte-Carlo, ...). L'idée de la PGD paramétrique telle que détaillée dans [10] est de considérer les paramètres comme des coordonnées additionnelles. La solution est alors recherchée sous forme approchée en séparant les variables suivant l'expression :

$$\vec{u}(\vec{x}, E, \nu, D) \approx \sum_{i=1}^n \vec{F}_i(\vec{x}) \times G_i(E) \times H_i(\nu) \times K_i(D) \quad (5)$$

où  $G_i$ ,  $H_i$  et  $K_i$  sont des fonctions scalaires et  $F_i$  est une fonction vectorielle pour tout entier  $i \in [0, n]$ .  $\vec{F}_i$  est définie par :

$$\vec{F}_i = \begin{pmatrix} F_i^u \\ F_i^v \\ F_i^w \\ F_i^{\theta_x} \\ F_i^{\theta_y} \\ F_i^{\theta_z} \end{pmatrix} \quad (6)$$

#### 3.2 Formulation faible du problème global paramétrique

Comme dit, précédemment, on souhaite chercher une solution pour toutes les valeurs des paramètres avec une seule simulation en traitant les paramètres comme des coordonnées additionnelles. Le problème est donc formulé en dimension 6 : 3 dimensions pour l'espace ( $x$ ,  $y$  and  $z$ ) et 3 dimensions pour les paramètres ( $E$ ,  $\nu$  and  $D$ ). Bien sur, une poutre est modélisé par un domaine 1D, mais il faut noter qu'un maillage DEM utilisé pour représenter un milieu continu est une structure lattice 3D dense avec un grand nombre de degrés de liberté.

La formulation faible Eq. (4) est ainsi modifiée pour inclure les coordonnées paramétriques :

$$\int_{E_{min}}^{E_{max}} \int_{\nu_{min}}^{\nu_{max}} \int_{D_{min}}^{D_{max}} \int_0^L E \frac{\pi D^2}{4} \frac{du^*}{dx} \frac{du}{dx} + \mu \frac{\pi D^4}{64} \frac{d\theta_x^*}{dx} \frac{d\theta_x}{dx} + E \frac{\pi D^4}{32} \frac{d\theta_y^*}{dx} \frac{d\theta_y}{dx} + E \frac{\pi D^4}{32} \frac{d\theta_z^*}{dx} \frac{d\theta_z}{dx} dx dD d\nu dE = \mathcal{W}_{ext}(\vec{u}^*) \quad (7)$$

Il est bien connu que la résolution d'un problème en haute dimension est extrêmement coûteuse en raison de l'explosion du nombre de degrés de liberté, connu sous le nom de "malédiction de la dimension". Pour un problème 6D, en utilisant 100 noeuds par dimension, on doit traiter  $10^{12}$  noeuds. L'utilisation de l'approximation PGD Eq. (5) permet de traiter ce grand nombre de degrés de liberté.

Comme le déplacement est approché sous une forme séparée, on peut supposé qu'un champ virtuel cinématiquement admissible doit aussi pouvoir s'écrire sous forme séparée :

$$\vec{u}^*(\vec{x}, E, \nu, D) = \vec{F}^*(\vec{x}) \times G^*(E) \times H^*(\nu) \times K^*(D) \quad (8)$$

En introduisant les Eqs. (5) et (8) dans la forme faible Eq. (7) et en utilisant la définition de  $\mu$  Eq. (3), on trouve :

$$\sum_{i=1}^n \Psi(\vec{F}^*, G^*, H^*, K^*, \vec{F}_i, G_i, H_i, K_i) = \mathcal{W}_{ext}(\vec{u}^*) \quad (9)$$

avec la fonction  $\Psi$  définie par :

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{F}^*, G^*, H^*, K^*, \vec{F}_i, G_i, H_i, K_i) = & \\ & \left( \int_0^L \frac{dF^{u*}}{dx} \frac{dF_i^u}{dx} dx \right) \left( \int_{E_{min}}^{E_{max}} EG^* G_i dE \right) \left( \int_{\nu_{min}}^{\nu_{max}} H^* H_i d\nu \right) \left( \int_{D_{min}}^{D_{max}} \frac{\pi D^2}{4} K^* K_i dD \right) \\ & + \left( \int_0^L \frac{dF^{\theta_x*}}{dx} \frac{dF_i^{\theta_x}}{dx} dx \right) \left( \int_{E_{min}}^{E_{max}} EG^* G_i dE \right) \left( \int_{\nu_{min}}^{\nu_{max}} \frac{1}{2(1+\nu)} H^* H_i d\nu \right) \left( \int_{D_{min}}^{D_{max}} \frac{\pi D^4}{64} K^* K_i dD \right) \\ & + \left( \int_0^L \frac{dF^{\theta_y*}}{dx} \frac{dF_i^{\theta_y}}{dx} dx \right) \left( \int_{E_{min}}^{E_{max}} EG^* G_i dE \right) \left( \int_{\nu_{min}}^{\nu_{max}} H^* H_i d\nu \right) \left( \int_{D_{min}}^{D_{max}} \frac{\pi D^4}{32} K^* K_i dD \right) \\ & + \left( \int_0^L \frac{dF^{\theta_z*}}{dx} \frac{dF_i^{\theta_z}}{dx} dx \right) \left( \int_{E_{min}}^{E_{max}} EG^* G_i dE \right) \left( \int_{\nu_{min}}^{\nu_{max}} H^* H_i d\nu \right) \left( \int_{D_{min}}^{D_{max}} \frac{\pi D^4}{32} K^* K_i dD \right) \end{aligned} \quad (10)$$

La résolution du problème (9) est réalisée au moyen d'un algorithme itératif basé sur des enrichissements successifs de la solution. A l'itération  $i$ , les fonctions sur chaque sous-domaine ( $F_i$ ,  $G_i$ ,  $H_i$  et  $K_i$ ) sont modifiées alternativement jusqu'à obtenir la convergence de l'itération. Cette approche se révèle performante dans notre cas. Pour plus de détails, le lecteur est invité à consulter les références : [11, 12, 13].

## 4 Résultats

Toutes les erreurs de convergence des simulations de ce travail sont reportées sur la figure 3. Ces résultats montrent la bonne convergence pour une erreur inférieure à  $10^{-5}$ , seuil d'erreur de convergence, à partir de 20 à 40 itérations.

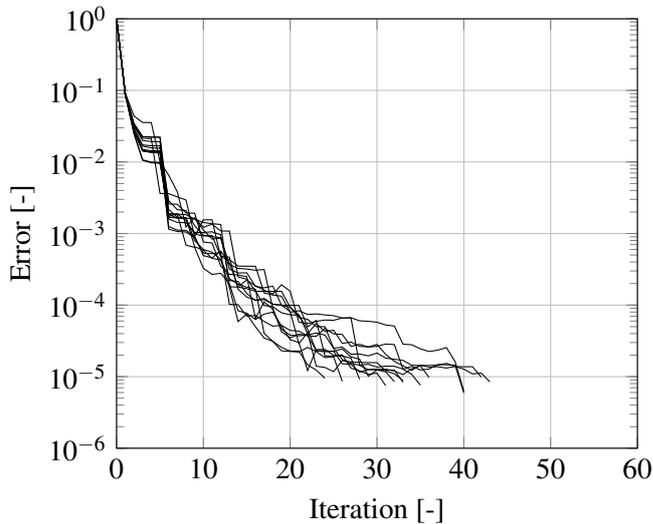


FIGURE 3 – PGD error during each simulations presented in this work.

Le résultat du calcul PGD est représenté sur deux courbes (on parle ainsi du couple représentant un abaque de calibration). Comme le montre les figures 4 et 5, il a été choisi de représenter le rapport des modules des poutres et du matériaux homogène ainsi que le coefficient de Poisson homogène en fonction du rapport (noté Radius ratio  $\tilde{r}$ ) du rayon moyen des éléments discrets dans l'agencement granulaire sur

celui du rayon de la poutre. Cette simplification de l'analyse paramétrique est issue de nombreuses autres analyses qui ne seront pas détaillées dans ce papier.

Il est observée une influence du rapport de rayon sur les deux paramètres de calibration. Concernant le rapport des modules, il n'est pas observé d'influence sur la densité des poutres alors que pour obtenir l'effet Poisson de la structure émergente, une influence importante est observée.

Concernant l'évaluation du coefficient de Poisson, trois courbes correspondants à des faibles nombres de poutres (inférieur à 300) présentent une allure non conforme à toutes les autres. Cet effet n'a pour l'instant pas été analysé et provient certainement du calcul PGD.

Néanmoins, la figure 5 valide l'approche numérique et retrouvent bien les mêmes valeurs de calibration de André dans [6].

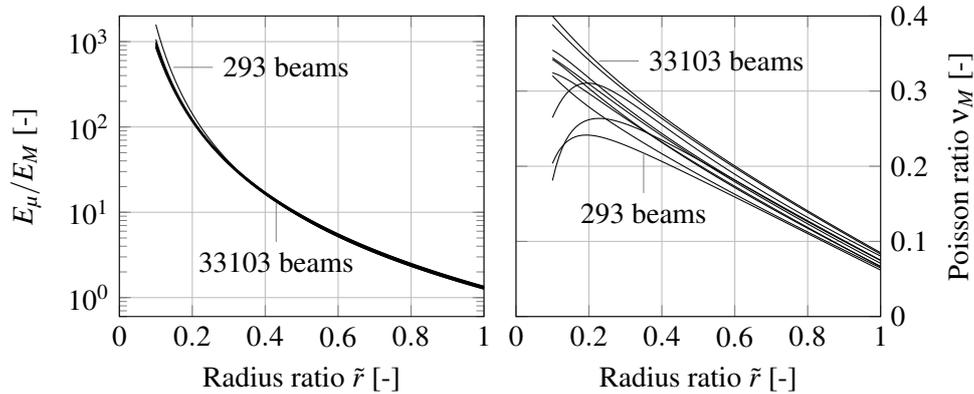


FIGURE 4 – Convergence results on the number of beams on the calibration curves.

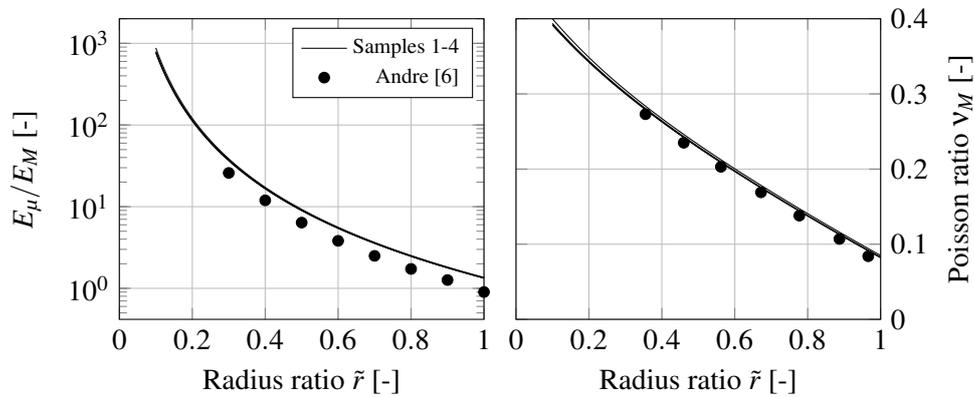


FIGURE 5 – Comparison of the calibration curves with results from Andre [6] for 33103 beams.

Une analyse de l'influence du nombre de coordination (voir figure 6) a été réalisée. La figure 7 montre ainsi que la calibration d'une structure lattice est influencée aussi par la nature de la construction du maillage, et de manière significative, que ce soit pour le rapport des modules, où un décalage vertical des courbes est observé mais aussi pour l'effet Poisson où même les tendances sont différentes.

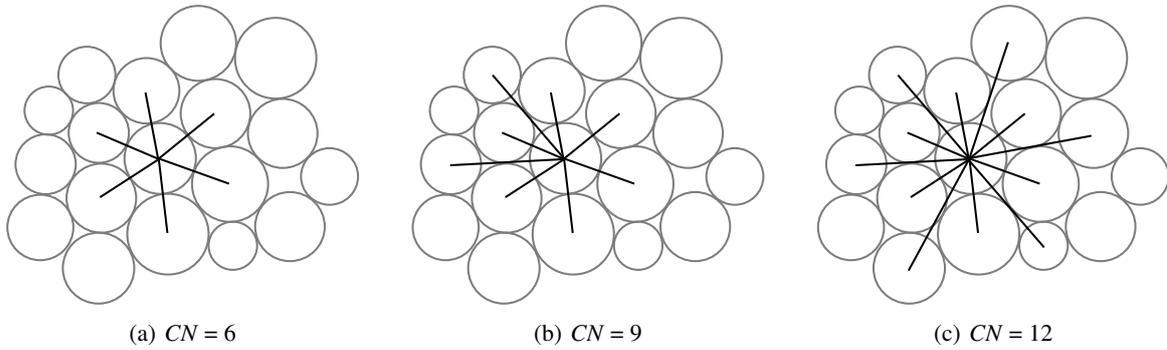


FIGURE 6 – Three different coordination number of beams for the same node positions.

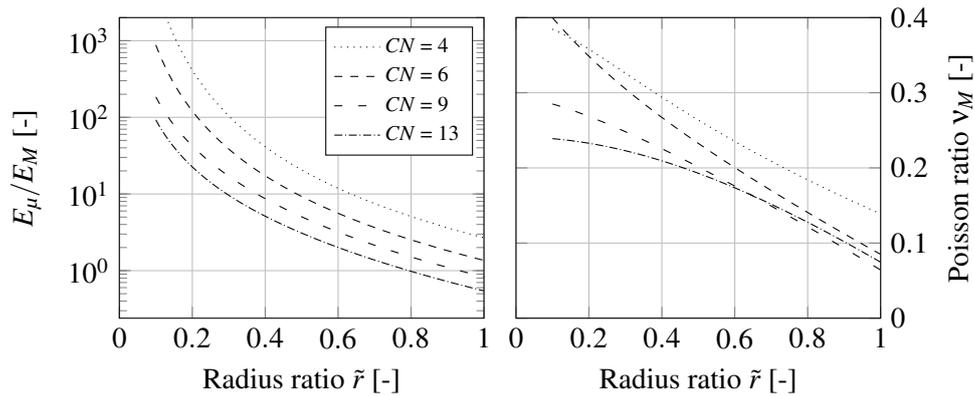


FIGURE 7 – Influence of the coordination number  $CN$  on the calibration.

## 5 Conclusion

L'utilisation d'une technique de réduction appliquée au problème de calibration de milieu discret se révèle pertinente. Les temps de calcul très réduits ont ainsi permis de confirmer certains résultats de la littérature mais surtout de fournir à la communauté des abaques de calibration pour un comportement élastique homogène. Il conviendra par la suite d'analyser l'influence de la construction du maillage sur la calibration ainsi que d'introduire des non-linéarités de comportement dans l'analyse PGD, notamment des mécanismes visqueux et/ou irréversibles.

## Références

- [1] P. A. Cundall and O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29 :47–65, 1979.
- [2] Michel Jean, Vincent Acary, and Yann Monerie. Non-smooth contact dynamics approach of cohesive materials. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series A Mathematical and Physical Sciences* (19. 359(1789) :2497–2518, 2001.
- [3] W Pompe, HJ Herrmann, and S Roux. Statistical models for the fracture of disordered media. *Crystal Research and Technology*, 26(8) :1076–1076, 1991.
- [4] A. Delaplace and A. Ibrahimbegovic. Discrete modeling of cracking of brittle materials in large relative motion and localization problem. In Christian Miehe, editor, *IUTAM Symposium on Computational Mechanics of Solid Materials at Large Strains*, pages 375–383, Dordrecht, 2003. Springer Netherlands.

- [5] M. Jebahi, D. André, I. Terreros, and I. Iordanoff. Discrete Element Method to Model 3D Continuous Materials. Wiley, 2015.
- [6] Damien André, Ivan Iordanoff, Jean-luc Charles, and Jérôme Néauport. Discrete element method to simulate continuous material by using the cohesive beam model. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 213-216 :113–125, mar 2012.
- [7] M. Vassaux, C. Oliver-Leblond, B. Richard, and F. Ragueneau. Beam-particle approach to model cracking and energy dissipation in concrete : Identification strategy and validation. Cement and Concrete Composites, 70 :1–14, July 2016.
- [8] A. Delaplace and R. Desmorat. Discrete 3d model as complimentary numerical testing for anisotropic damage. International Journal of Fracture, 148(2) :115, Mar 2008.
- [9] Damien André, Ivan Iordanoff, Jean luc Charles, and Jérôme Néauport. The granoo workbench, a new tool for developing discrete element simulations, and its application to tribological problems. Advances in Engineering Software, 2014.
- [10] E. Pruliere, F. Chinesta, and A. Ammar. On the deterministic solution of multidimensional parametric models using the proper generalized decomposition. Mathematics and Computers in Simulation, 81(4) :791–810, December 2010.
- [11] Gregory Beylkin and Martin J. Mohlenkamp. Algorithms for numerical analysis in high dimensions. SIAM J. Sci. Comput., 26(6) :2133–2159, June 2005.
- [12] D. Ryckelynck, F. Chinesta, E. Cueto, and A. Ammar. On thea priori model reduction : Overview and recent developments. Archives of Computational Methods in Engineering, 13(1) :91–128, Mar 2006.
- [13] A. Ammar, B. Mokdad, F. Chinesta, and R. Keunings. A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modelling of complex fluids : Part ii : Transient simulation using space-time separated representations. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 144(2) :98 – 121, 2007.