

# Réduction des calculs non-linéaires multi-échelles FE<sup>2</sup> par clustering

S. Chaouch<sup>1</sup>, J. Yvonnet<sup>1</sup>

<sup>1</sup> MSME, Université Gustave Eiffel, Marne-la-Vallée {souhail.chaouch, julien.yvonnet}@univ-eiffel.fr

**Résumé** — Une méthode basée sur l'apprentissage non-supervisé est développée afin de réduire les calculs non-linéaires dans la méthode FE<sup>2</sup>. La technique proposée ici crée des groupes (clusters) de points de Gauss macroscopiques qui sont supposés être dans des états mécaniques proches, les variables internes sont prises en compte dans cette classification en contrôlant le nombre des clusters. Ensuite, un seul calcul non linéaire microscopique de volume élémentaire représentatif (VER) est effectué pour chaque cluster. La technique a montré des facteurs d'accélération de l'ordre de 20 pour des applications sur des composites anélastiques.

**Mots clés** — modélisation multi-échelle, apprentissage non-supervisé, k-means FE<sup>2</sup>.

## 1 Introduction

La méthode FE<sup>2</sup> [4] est l'approche la plus répandue pour la modélisation multi-échelle des matériaux hétérogènes non linéaires. Dans cette technique, un problème macroscopique est discrétisé à l'aide des éléments finis. À l'échelle microscopique, un volume élémentaire représentatif (VER) est défini et également discrétisé par des éléments finis. La loi constitutive de chaque élément est supposée inconnue à l'échelle macroscopique, et est obtenue numériquement en résolvant un problème de VER non linéaire en chaque point de Gauss macroscopique. Le principal avantage de cette approche est sa généralité, car aucune hypothèse restrictive n'est requise sur le type de non-linéarité à l'intérieur du VER. L'inconvénient évident est le coût élevé de calcul, ce qui limite sa faisabilité pour les applications industrielles.

Pour résoudre le problème du temps de calcul intrinsèque à la FE<sup>2</sup>, plusieurs techniques d'accélération de calculs ont été proposées, notamment les modèles d'ordre réduit au niveau du VER pour des comportements sans effet d'histoire [11, 9], ou pour certains problèmes incluant les effets d'histoire [17, 19, 20, 18], le remplacement du problème non linéaire du VER par un modèle de substitution "Data-driven" pour des matériaux hyperélastiques [8, 10, 5]. Des modèles basés sur l'intelligence artificielle (IA) ont été introduit de la même manière d'abord dans [2], puis dans [16, 3] pour des problèmes qui ne dépendent pas du chemin de chargement. Par la suite, les réseaux de neurones récurrents ont été utilisés, entre autres dans [15, 6, 12] pour gérer les variables internes. Des approches hybrides basées sur une combinaison d'IA et de la physique ont été récemment développées pour inclure la thermodynamique sur les réseaux de neurones [7, 1]. Dans ce travail, la réduction des temps de calcul s'appuie sur un nouveau paradigme. Elle se fait au niveau macroscopique et non au niveau microscopique. Une technique d'apprentissage automatique non supervisée basée sur le regroupement par "k-means" est introduite pour éviter les appels redondants aux VERs non linéaires à l'échelle macro dans FE<sup>2</sup>. Plusieurs améliorations importantes sont apportées à cette méthode développée dans [13] et appelée k-means clustering FE<sup>2</sup> (KMFE<sup>2</sup>). Tout d'abord, la définition de la contrainte macroscopique au sein de chaque cluster est étendue en utilisant une interpolation linéaire dans l'espace contrainte-déformation. Ensuite, Le nombre des clusters est considérablement réduit dans le cas de la présence des variables internes par rapport à l'ancien technique développée sur [13]. Enfin, des problèmes de convergence liés à l'utilisation des clusters sont abordés.

## 2 Introduction d'une version améliorée de k-means clustering FE<sup>2</sup>

### 2.1 Notions de base de la KMFE2

La méthode appelée k-means clustering FE2 (KMFE2) est présentée d'abord sous sa forme initiale comme proposée dans [13]. L'idée principale est de réduire le nombre de problèmes non linéaires microscopique en utilisant une technique d'apprentissage automatique non supervisé basée sur le 'clustering' pour sélectionner les points de Gauss dans le maillage de la macrostructure qui ont des états mécaniques proches. Ensuite, au lieu de résoudre un problème de VER non linéaire pour chaque point de Gauss, un seul problème non linéaire est résolu dans chaque groupe de points (voir figure 1 (c)). Ce processus réduit considérablement le nombre de problèmes non linéaires, sans qu'il soit nécessaire de recourir à une étape d'entraînement, contrairement aux méthodes basés sur l'apprentissage supervisés.

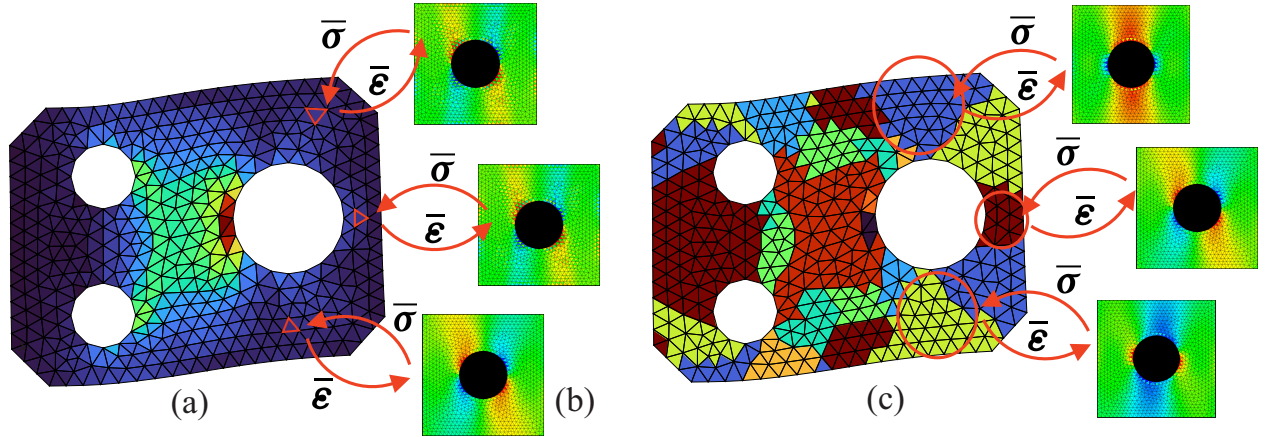


FIGURE 1 – Illustration schématique de la méthode FE<sup>2</sup> et de la méthode k-means clustering FE<sup>2</sup> (KMFE<sup>2</sup>); (a)-(b) : méthode FE<sup>2</sup> classique; (a) : maillage macroscopique; (b) maillage microscopique du VER (Volume Élémentaire Représentatif); chaque point de Gauss dans le maillage macroscopique est lié à un problème VER non linéaire; (c) KMFE<sup>2</sup> : un seul problème de VER est résolu pour chaque groupe de points de Gauss, représentés par des couleurs différentes.

Dans la méthode KMFE2 comme proposée dans [13], à chaque itération de la procédure de Newton, les points de Gauss sont classés en groupes (clusters) à l'aide de l'algorithme "k-means clustering". En prenant les composantes des tenseurs de déformation macroscopique en vecteurs  $\bar{\mathbf{v}}_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, N_G$ , avec  $N_G$  est le nombre de points de Gauss, un nombre de  $K$  clusters est défini par l'utilisateur. Ensuite, les vecteurs  $\bar{\mathbf{v}}_i$ , sont regroupés dans les clusters  $S^k$ ,  $k = 1, 2, \dots, K$ , tel que

$$S^k = \{\bar{\mathbf{v}}_i \mid \|\bar{\mathbf{v}}_i - \bar{\mathbf{v}}_k\| \leq \|\bar{\mathbf{v}}_i - \bar{\mathbf{v}}_m\|, \forall m, m \neq k\},$$

et  $\bar{\mathbf{v}}_k$  sont les valeurs moyennes des  $\bar{\mathbf{v}}_i$  qui appartiennent au cluster  $S^k$  définies par l'équation (1).

$$\bar{\mathbf{v}}_k = \frac{1}{V^k} \int_{\Omega^k} \bar{\mathbf{v}}_i d\Omega, \quad (1)$$

où  $V^k = \int_{\Omega^k} d\Omega$ , et  $\Omega^k$  est le domaine défini par l'union de tous les éléments macroscopiques qui appartiennent au même cluster  $S^k$ .

De plus, pour prendre en compte les effets des variables internes dans les VERs, une procédure heuristique basée sur l'intersection entre les anciens et les nouveaux clusters a été adoptée (voir [13] pour plus de détails). Cette procédure a l'inconvénient de créer de nombreux nouveaux clusters, appelés sous-clusters, dont le nombre ne peut être contrôlé par l'utilisateur et qui peut être élevé par rapport au nombre cible de clusters  $K$  basé uniquement sur les déformations macroscopiques.

### 2.2 Version améliorée de KMFE<sup>2</sup>

Une version améliorée de cette méthode [14] est proposée pour répondre à certaines limitations de la méthode initiale. Ces améliorations sont présentées en trois axes.

### 2.2.1 Éviter les sous-clusters

Afin d'éviter la création de sous-clusters et de réduire le temps de calcul, nous avons proposé de rajouter de nouvelles informations au vecteur de classification  $\bar{\mathbf{v}}_i$ . Cependant, l'ajout de tous un champ de variables internes  $\alpha(\mathbf{x})$  induit à une très grande dimension du vecteur de classification, ce qui rend l'algorithme k-means inefficace. Dans le cadre de cette contribution, l'analyse est limitée aux matériaux inélastiques sans endommagement. Cette classe comprend par exemple la plasticité, la viscoplasticité et la viscoélasticité. Dans ces cas, la déformation microscopique au sein du VER peut être exprimée comme suit :

$$\varepsilon(\mathbf{x}) = \varepsilon^e(\mathbf{x}) + \varepsilon^{an}(\mathbf{x}),$$

avec  $\varepsilon^{an}(\mathbf{x})$  est la déformation anélastique qui dépend des variables internes locales  $\alpha(\mathbf{x})$ . Nous supposons ici qu'en l'absence d'endommagement, le comportement local peut être exprimé comme le suivant :

$$\sigma(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \varepsilon^e(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : (\varepsilon(\mathbf{x}) - \varepsilon^{an}(\alpha(\mathbf{x}))) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) : \varepsilon(\mathbf{x}) + \sigma^{an}(\alpha(\mathbf{x})).$$

Ensuite, le comportement macroscopique peut être ré-exprimé sous la forme suivante :

$$\bar{\sigma} = \bar{\mathbb{C}} : \bar{\varepsilon}^e = \bar{\mathbb{C}} : (\bar{\varepsilon} - \bar{\varepsilon}^{an}(\alpha(\mathbf{x}))) = \bar{\mathbb{C}} : \bar{\varepsilon} + \bar{\sigma}^{an}(\alpha(\mathbf{x})), \quad (2)$$

avec  $\bar{\varepsilon}^{an}(\alpha(\mathbf{x})) = \langle \varepsilon^{an}(\mathbf{x}) \rangle$ ,  $\bar{\sigma}^{an}(\alpha(\mathbf{x})) = \langle \sigma^{an}(\mathbf{x}) \rangle$  et  $\langle \bullet \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} (\bullet) d\Omega$  désigne la moyenne spatiale sur le VER. D'après (2), on peut noter que la seule information pertinente pour récupérer la contrainte macroscopique  $\bar{\sigma}$  est  $\bar{\varepsilon}$  et  $\bar{\varepsilon}^{an}$ , ou  $\bar{\varepsilon}$  et  $\bar{\sigma}^{an}$ . Nous proposons donc d'étendre le vecteur de classification des points de Gauss en utilisant l'un ou l'autre des vecteurs suivants pour un problème en 2D :

$$\bar{\mathbf{v}}_i = \left\{ \bar{\varepsilon}_{11}^i, \bar{\varepsilon}_{22}^i, 2\bar{\varepsilon}_{12}^i, \bar{\varepsilon}_{11}^{an^i}, \bar{\varepsilon}_{22}^{an^i}, 2\bar{\varepsilon}_{12}^{an^i} \right\}, \quad \forall i \in \mathcal{S}^k,$$

ou

$$\bar{\mathbf{v}}_i = \left\{ \bar{\varepsilon}_{11}^i, \bar{\varepsilon}_{22}^i, 2\bar{\varepsilon}_{12}^i, \bar{\sigma}_{11}^{an^i}, \bar{\sigma}_{22}^{an^i}, \bar{\sigma}_{12}^{an^i} \right\}, \quad \forall i \in \mathcal{S}^k.$$

Ce dernier peut être utile dans les situations où la déformation anélastique locale  $\varepsilon^{an}(\mathbf{x})$  n'est pas disponible directement dans les calculs numériques.

### 2.2.2 Approximation linéaire de la contrainte sur les clusters

L'approximation constante de la contrainte proposée dans [13] est grossière, et pourra poser des problèmes de convergence de la procédure de Newton. Afin d'améliorer cette approximation au sein de chaque cluster, une approximation linéaire est proposée pour chaque point de Gauss macroscopique, comme suit :

$$\bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}^i) = \bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}^k) + \bar{\mathbb{C}}_{tan}^k(\bar{\varepsilon}^k) : (\bar{\varepsilon}^i - \bar{\varepsilon}^k), \quad (3)$$

où  $\bar{\varepsilon}^k$  est la moyenne des déformations macroscopiques au sein du cluster. Par conséquent, chaque point de Gauss macroscopique reçoit une valeur de contrainte différente sans ajouter de calculs VER additionnels.

### 2.2.3 Traitement de problèmes de non-convergence

Dans certains cas, même après avoir utilisé l'approximation linéaire de la contrainte (3), le résidu macroscopique ne converge pas à cause des changements perpétuels de la distribution des clusters durant les itérations macroscopiques de Newton. En d'autres termes, certains éléments passent d'un cluster à un autre à chaque changement d'itération Newton d'une manière continue, ce qui conduit à la non-convergence du résidu pour un pas de chargement donné. Pour contourner ce problème, un algorithme a été mis en place : lorsqu'une non-convergence est survenue après un certain nombre d'itérations, la solution de déplacement est enregistrée, et la distribution des clusters est fixée pour les itérations du pas de Newton actuel jusqu'à convergence, dans le cas où la non-convergence persiste encore, alors la solution de déplacement précédemment sauvegardée est reprise et les itérations de Newton continuent en utilisant une nouvelle distribution de clusters et en sauvegardant la première solution de déplacement. Cette opération, appelée un cycle, est répétée jusqu'à convergence.

### 3 Exemples numériques d'une structure composite viscoélastique

Dans cet exemple, la méthode KMFE<sup>2</sup> est appliquée à un cas qui comprend des variables internes au niveau microscopique. La géométrie et les conditions aux limites de la structure macroscopique sont données dans la figure (2)-(a), avec les dimension  $L = H = 80$  cm, et le rayon  $R = 15$  cm. Un déplacement de  $\bar{u} = 25$  cm est appliqué sur le bord supérieur de la plaque, avec une valeur maximale de 0.5 mm et puis il y est maintenue jusqu'à la fin de la simulation (voir la figure (2)-(b)). Le VER considéré se compose d'un carré avec un trou au centre de diamètre  $d = 0.48 \times l$ , où  $l = 1$  mm est le côté du carré. La matrice du VER est constitué d'un matériau viscoélastique suivant le modèle de Maxwell généralisé en utilisant deux branches de Maxwell. La fibre est constitué d'un matériau élastique linéaire rigide. Les paramètres numériques des matériaux du VER sont donnés dans le tableau 1.

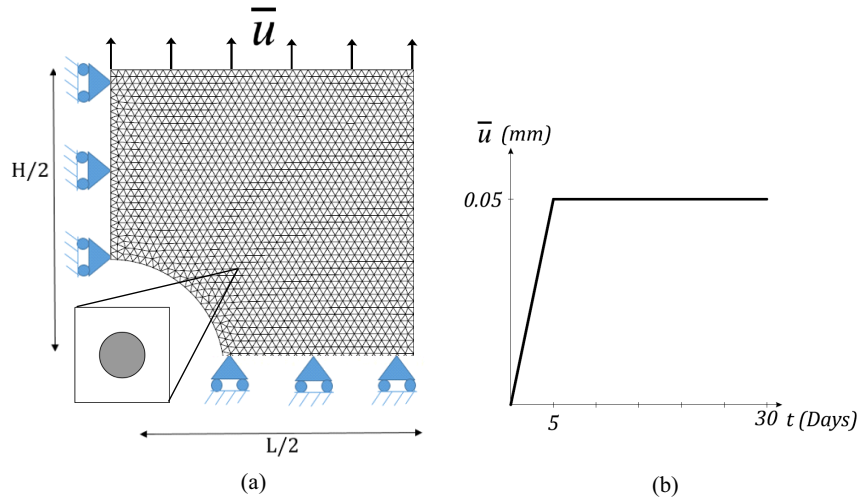


FIGURE 2 – Structure composite viscoélastique : (a) géométrie et conditions limites; (b) évolution de chargement

TABLE 1 – Paramètres des matériaux des phases du VER viscoélastique

Matrice	$E_{(i=1,2)}^{(m)}$ (MPa)	$\tau_{(i=1,2)}^{(m)}$ (j)	$\Delta T$ (j)	$E_{\infty}$ (MPa)	$\nu^{(m)}$	$\sigma_0^{(m)}$ (MPa)	$\epsilon_0^{(m)}$	$m^{(m)}$
	4.25, 6.33	4.734, 4.036	0.833	10.909	0.256	1	1	0.5
Inclusion	$E^{(i)}$ (MPa)				$\nu^{(f)}$	$\sigma_0^{(f)}$ (MPa)	$\epsilon_0^{(f)}$	$m^{(f)}$
	2398.4				0.28	1000	1	1

En utilisant la solution FE<sup>2</sup> comme celle de référence pour valider les résultats. On constate que 50 clusters sont suffisants pour reproduire la solution FE<sup>2</sup> avec un facteur d'accélération de 26.7 pour la solution convergente (50 clusters) comme montré sur le tableau 2. La figure (3) montre la convergence de la réponse par rapport au nombre de cluster en comparaison avec la solution FE<sup>2</sup>. La figure (4)-(a) montre la distribution des clusters et de la contrainte von Mises local obtenue au peak de chargement et la figure (4)-(b) montre la distribution de la contrainte von Mises de la solution de référence au même pas de chargement.

TABLE 2 – Comparaison des temps de calcul entre la méthode KMFE2 pour plusieurs nombres de cluster et la solution de référence (FE<sup>2</sup>)

Nombre de clusters	10	30	40	50	FE <sup>2</sup> (3217)
Temps de calucl (8 workers)	18 min	27 min	35 min	40 min	17h 48 min
Facteur d'accélération	60	40	30	26.7	

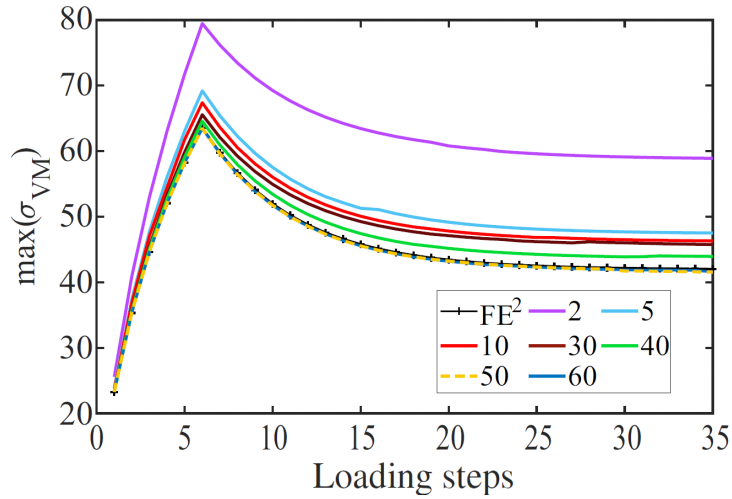


FIGURE 3 – Convergence de  $KMFE^2$  par rapport au nombre des clusters  $K$  (contrainte de von Mises Maximale).

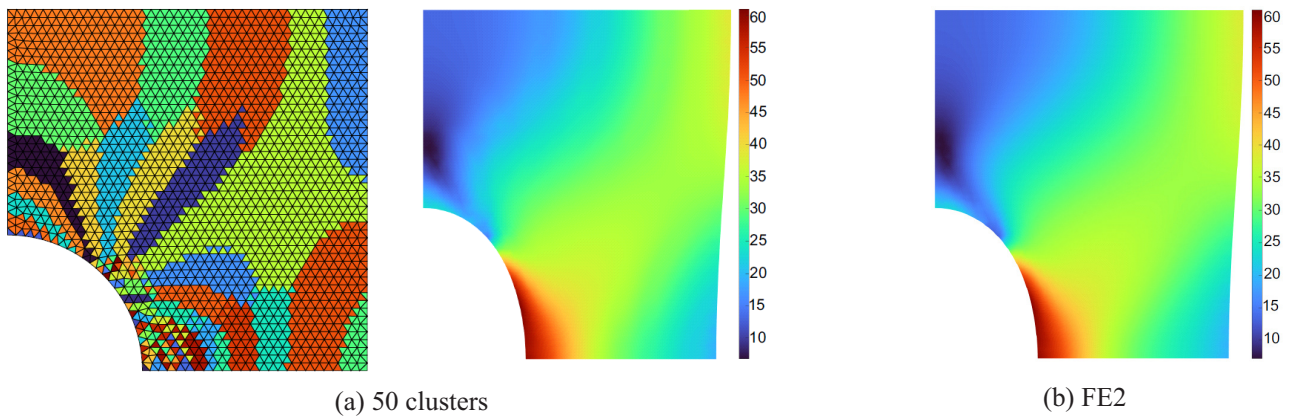


FIGURE 4 – Distribution des clusters et leur contrainte von Mises correspondante pour la solution convergente et la solution de référence au pic du chargement.

## 4 Conclusion

La méthode  $KMFE^2$  [13, 14] a été proposée pour réduire les temps de calcul dans les problèmes multi-échelles non linéaires qui dépend de l’histoire. Contrairement à la plupart des approches d’accélération existantes, comme les modèles basés sur l’apprentissage automatique qui remplacent certaines quantités microscopiques, ou les modèle d’ordre réduit qui se concentrent sur la réduction du modèle microscopique, la présente technique réduit le modèle à échelle macroscopique directement en sélectionnant des points de Gauss macro dans des états mécaniques proches à l’aide d’une technique d’apprentissage automatique de regroupement non supervisé, donc sans réduire la base ou remplacer les calculs de VERs. Par conséquent, aucune étape d’apprentissage, aucune construction de base de données, ni aucun calcul préliminaire hors ligne ne sont nécessaires, tout en maintenant des facteurs d’accélération typiques d’environ 20 par rapport à la méthode  $FE^2$  classique. La technique a été appliquée avec succès aux composites hyperélastiques, viscoélastiques et élastoplastiques dans [14]. Les développements futurs porteront sur l’endommagement à micro-échelle et le couplage de la technique avec des approches basées sur les modèles de réduction afin de réduire davantage les temps de calcul dans les simulations non linéaires à plusieurs échelles.

## Références

- [1] A. Danoun, E. Prulière, Y. Chemisky. *Thermodynamically consistent Recurrent Neural Networks to predict non linear behaviors of dissipative materials subjected to non-proportional loading paths*, Mechanics of Materials,

104436, 2022.

- [2] B. A. Le, J. Yvonnet, and Q-C. He. *Computational homogenization of nonlinear elastic materials using neural networks*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 104(12) :1061–1084, 2015.
- [3] F. Aldakheel, E. S. Elsayed, T. I. Zohdi, P. Wriggers. *Efficient multiscale modeling of heterogeneous materials using deep neural networks* Computational Mechanics, 155–171, 2023.
- [4] F. Feyel. *Multiscale FE2 elastoviscoplastic analysis of composite structures*, Computational Materials Science, 344-354, 1999.
- [5] F. Fritzen and O. Kunc. *Two-stage data-driven homogenization for nonlinear solids using a reduced order model* European Journal of Mechanics, 69 :201–220, 2018.
- [6] F. Ghavamian and A. Simone. *Accelerating multiscale finite element simulations of history-dependent materials using a recurrent neural network*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 112594, 2019.
- [7] F. Masi and I. Stefanou. *Multiscale modeling of inelastic materials with Thermodynamics-based Artificial Neural Networks (TANN)*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 115190, 2022.
- [8] I. Temizer and P. Wriggers. *An adaptive method for homogenization in orthotropic nonlinear elasticity*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 3409–3423, 2007.
- [9] J. Oliver, M. Caicedo, A.E. Huespe, J.A. Hernández, E. Roubin. *Reduced order modeling strategies for computational multiscale fracture*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 560-595, 2017.
- [10] J. Yvonnet, E. Monteiro, and Q-C. He. *Computational homogenization method and reduced database model for hyperelastic heterogeneous structures*, International Journal for Multiscale Computational Engineering, 11(3), 2013.
- [11] J. Yvonnet, Q-C. He. *The reduced model multiscale method (R3M) for the non-linear homogenization of hyperelastic media at finite strains*, Journal of Computational Physics, 341–368, 2007.
- [12] L. Wu, V. D. Nguyen, N. G. Kilingar, L. Noels. *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, 113234, 2020.
- [13] M. A. Benaïmeche, J. Yvonnet, B. Bary, Q-C. He. *A k-means clustering machine learning-based multiscale method for anelastic heterogeneous structures with internal variables*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2012–2041, 2022.
- [14] S. Chaouch, J. Yvonnet. *An unsupervised machine learning approach to reduce nonlinear FE2 multiscale calculations using macro clustering*, Submitted, 2023.
- [15] M. Mozaffar, R. Bostanabad, W. Chen, K. Ehmann, J. Cao, M.A. Bessa. *Deep learning predicts path-dependent plasticity*, Proceedings of the National Academy of Sciences, 116(52) :26414–26420, 2019.
- [16] N. N. Vlassis, R. Ma, W. Sun. *Geometric deep learning for computational mechanics Part I : anisotropic hyperelasticity*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 113299, 2020.
- [17] S. Roussette, J-C. Michel, P. Suquet. *Nonuniform transformation field analysis of elastic–viscoplastic composites*, Composites Science and Technology, 22-27, 2009.
- [18] Y. Feng, H. Yong, Y. Zhou. *A concurrent multiscale framework based on self-consistent clustering analysis for cylinder structure under uniaxial loading condition*, Composite Structures, 113827, 2021.
- [19] Z. Liu, M. A. Bessa, W. K. Liu. *Self-consistent clustering analysis : An efficient multi-scale scheme for inelastic heterogeneous materials*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 319–341, 2016.
- [20] Z. Liu, M. Fleming, W. K. Liu. *Microstructural material database for self-consistent clustering analysis of elastoplastic strain softening materials*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 547–577, 2018.