

La régularisation Lipschitz pour la méthode Data Driven

V. Kamasamudram¹, L. Stainier¹

¹ Nantes Université, Ecole Centrale de Nantes, CNRS, GeM, 1 rue de la Noë, Nantes, France {vasudevan.kamasamudram, laurent.stainier}@ec-nantes.fr

Résumé — La notion de mécanique numérique pilotée par les données (Data Driven Computational Mechanics, DDCM) a été introduite dans l'article de Kirchdoerfer et Ortiz, CMAME, 2016, où le comportement des matériaux est décrit par une base de données contraintes-déformations plutôt qu'un modèle constitutif. L'objectif de cet article est d'appliquer la méthodologie DDCM aux cas où le matériau peut subir des effets d'adoucissement, tels que des endommagements. Pour que le problème soit bien posé dans le régime d'adoucissement, une régularisation est nécessaire, qui introduit la longueur caractéristique manquante. Cet article introduit la méthode de régularisation Lipschitz à cette fin et démontre l'efficacité de la méthode pour les problèmes impliquant des endommagements en 1D.

Mots clés — Data-Driven, Régularisation Lipschitz, endommagement

1 Introduction

La notion de DDCM a été introduite dans [1], où les données contrainte-déformation obtenues à partir d'essais, par exemple, sont utilisées directement pour décrire le comportement du matériau, plutôt que d'utiliser un modèle constitutif. Comme cela sera décrit en détail ci-dessous, l'objectif de la DDCM est d'obtenir les états mécaniques et matériaux qui sont les plus proches les uns des autres. Les états matériaux appartiennent à la base de données obtenue à partir des expériences ou des simulations réalisées à des échelles inférieures et décrivent donc le comportement du matériau. Cette approche a été appliquée avec succès à l'élasticité, à l'élastodynamique [2], à l'inélasticité [3], aux matériaux granulaires [4], etc. Cependant, son application à des scénarios impliquant un adoucissement et une localisation reste relativement ouverte. Dans [4], la DDCM a été utilisée pour prédire l'apparition de bandes de cisaillement dans les matériaux granulaires. Pour exclure la dépendance de la solution de la taille du maillage lors de l'analyse des bandes de cisaillement dans les milieux granulaires, [4] traite le matériau comme un milieu de Cosserat. En plus de décrire la relation entre les contraintes de Cauchy et les déformations, une base de données supplémentaire est utilisée pour décrire la relation entre les contraintes et déformations d'ordre supérieur. Cependant, il est bien connu qu'une telle technique de régularisation n'est pas efficace pour les applications qui n'impliquent pas de chargement en cisaillement, par exemple pour une fissure chargée en mode I.

En général, pour les matériaux qui présentent un comportement d'adoucissement, une forme de régularisation est nécessaire pour prévenir la dépendance de la solution à la taille du maillage. La régularisation est introduite de diverses manières : par exemple, en introduisant le gradient d'endommagement dans la fonctionnelle d'énergie [5, 6], les méthodes de gradient de déformation implicites et explicites [7], où on utilise les gradients de déformation dans la fonctionnelle d'énergie, donnant lieu à des milieux d'ordre supérieur [8], et la méthode Lipfield [9]. Toutes les approches mentionnées jusqu'à présent, à l'exception des milieux d'ordre supérieur de gradient de déformation, nécessitent la définition d'une variable interne telle que l'endommagement. Dans la DDCM, les variables internes ne sont pas explicitement définies. Par conséquent, une régularisation Lipschitz basée sur la déformation a été introduite dans [10], où les gradients de déformation sont contraints à se situer dans un certain intervalle. L'efficacité de cette approche a été démontrée pour une application en 1D dans cet article, où un modèle constitutif a été utilisé pour décrire le comportement du matériau.

Dans cet article, l'efficacité de l'approche introduite dans [10] sera démontrée pour des applications utilisant la DDCM. Tout d'abord, la notion de DDCM sera brièvement introduite. Ensuite, une brève description de la technique de régularisation suivra. Son application à un cas 1D sera ensuite réalisée avec une brève description et une discussion des résultats obtenus.

2 La méthode Data Driven

En DDCM, les niveaux de contrainte et de déformation du corps sont décrits par les états mécaniques et les états matériaux. Les états mécaniques sont les paires contrainte-déformation, où les états de contrainte satisfont les équations d'équilibre, tandis que les états de déformation satisfont les conditions de compatibilité. Les états matériaux sont les paires contrainte-déformation qui appartiennent à la base de données matérielle et décrivent ainsi le comportement du matériau. La solution du problème aux conditions limites est ensuite recherchée sous la forme de la paire d'états mécaniques-matériaux qui sont les plus proches les uns des autres.

Par exemple, considérons le problème d'une barre attachée à un ressort de raideur connue qui est soumise à un déplacement à son extrémité droite (Figure 1). Dans ce cas, puisque la raideur du ressort est connue, les contraintes dans la barre peuvent être exprimées en fonction du déplacement appliqué, u_0 , comme $\sigma = k(u_0 - u)$, où u est le déplacement à l'extrémité droite de la barre, et k est la raideur du ressort. Ainsi, les contraintes et les déformations dans la barre satisfont l'équation $\frac{\sigma}{kL} + \varepsilon = \frac{u_0}{L}$, où L est la longueur de la barre et $\varepsilon = u/L$. Les paires contrainte-déformation qui satisfont cette condition sont représentées par la ligne bleue sur la Figure 2. Si la base de données matérielle est telle que présentée par les points rouges sur la Figure 2, les solutions DD sont les points qui appartiennent à ces deux états qui sont les plus proches les uns des autres - représentés par des croix rouges (état matériel) et bleues (état mécanique) sur la Figure 2.

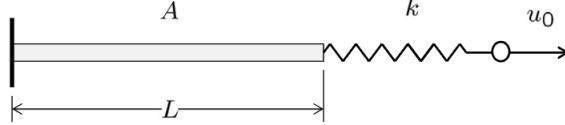


FIGURE 1 – Barre soumise à un déplacement [1].

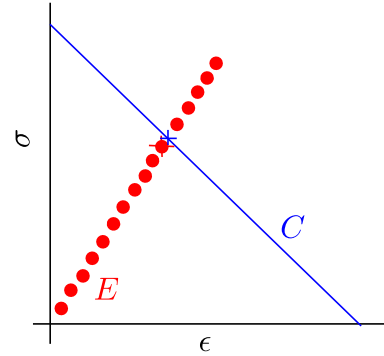


FIGURE 2 – États mécaniques et états matériaux.

De manière formelle, en désignant les états mécaniques comme (ε, σ) et les états matériaux comme $(\varepsilon^*, \sigma^*)$, la solution basée sur les données est définie comme suit :

$$\text{Sol} \in \arg \min_{(\sigma, \varepsilon) \in C} \min_{(\sigma^*, \varepsilon^*) \in E} d(\sigma, \varepsilon, \sigma^*, \varepsilon^*), \quad (1)$$

où

$$d(\sigma, \varepsilon, \sigma^*, \varepsilon^*) = \left(\frac{(\sigma - \sigma^*)^2}{2C} + \frac{C}{2}(\varepsilon - \varepsilon^*)^2 \right), \quad (2)$$

désigne la distance entre les états mécaniques (ε, σ) et les états matériaux $(\varepsilon^*, \sigma^*)$. Les variétés mécaniques et matérielles sont données par

$$C = \{(\varepsilon, \sigma) | \varepsilon = u_{,x}, \text{div } \sigma = 0, u = u_D \text{ sur } \partial\Omega_d\}, \quad (3)$$

$$E = \{(\varepsilon^*, \sigma^*) \text{ dans la base de données des matériaux}\}. \quad (4)$$

La métrique C utilisée dans la distance est a priori indépendante du comportement du matériau.

2.1 Application aux scénarios avec adoucissement

Pour les matériaux qui subissent des effets d'adoucissement tels que l'endommagement, il est nécessaire d'introduire une longueur caractéristique pour rendre le problème bien posé. Pour introduire cette longueur dans les problèmes impliquant la DDCM, une régularisation Lipschitz basée sur la déformation a été introduite dans [10]. Dans cet article, la longueur caractéristique est introduite en contraignant le gradient des déformations à se situer dans un certain intervalle. En bref, si u représente le champ de déplacement, alors le gradient de déformation, $u_{,xx}$, est contraint de se situer dans l'intervalle $[-1/\ell_c, -1/\ell_c]$,

pour une certaine valeur donnée de ℓ_c . Cela empêche la localisation de la déformation, et donc de l'endommagement, dans un élément, introduisant ainsi une échelle de longueur dans le problème. Ici, cette approche sera appliquée à un problème 1D d'adoucissement en conjonction avec l'algorithme axé sur les données.

Le problème est d'abord discrétisé, où \mathbf{u} représente le vecteur des déplacements nodaux, $\boldsymbol{\epsilon}$ et $\boldsymbol{\sigma}$ représentent respectivement les déformations et les contraintes dans les éléments. La déformation est donnée par $\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{B}\mathbf{u}$, où \mathbf{B} est la matrice qui correspond à l'opérateur gradient discrétisé. Les équations d'équilibre sont exprimées comme $\mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} = 0$. Dans la formulation originale, la solution au problème basé sur les données est alors recherchée sous forme de la paire d'états mécaniques et matériaux qui rendent la fonctionnelle suivante stationnaire :

$$\Pi = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^*)^T \mathbf{S}(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^*) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^*)^T \mathbf{C}(\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^*) + \boldsymbol{\eta}^T \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} \leftarrow \text{Stat!} \quad (5)$$

Ici, $\boldsymbol{\eta}$ représente le vecteur des multiplicateurs de Lagrange qui imposent les contraintes d'équilibre. \mathbf{C} et $\mathbf{S} = \mathbf{C}^{-1}$ désignent la "métrique" qui est utilisée pour égaliser les contributions des termes de contrainte et de déformation dans la distance.

Dans le cas où les gradients des déformations sont contraints à se situer dans un certain intervalle, $|u_{,xx}| \leq 1/\ell_c$, les équations d'équilibre sont modifiées comme $\sigma_{,x} + \tau_{,xx} = 0$ (voir les équations (36) et (37) de [10]), où τ est le multiplicateur de Lagrange qui correspond à la contrainte d'inégalité $|u_{,xx}| \leq 1/\ell_c$. Dans le cas actuel, l'inclusion des multiplicateurs de Lagrange modifie le lagrangien dans l'équation (5) comme suit :

$$\Pi = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^*)^T \mathbf{S}(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^*) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^*)^T \mathbf{C}(\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^*) + \boldsymbol{\eta}^T \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} + \lambda_u \left(\mathbf{P}\mathbf{u} - \frac{1}{\ell_c} \right) + \lambda_\eta \left(\mathbf{P}(\mathbf{u} + \boldsymbol{\eta}) - \frac{1}{\ell_c} \right), \quad (6)$$

où $\lambda_u \geq 0$ sont les multiplicateurs de Lagrange qui correspondent aux contraintes d'inégalité et $\lambda_\eta = -\lambda_u$ à la convergence est le micro-moment qui entre dans les équations d'équilibre. Cela sera clarifié ci-dessous. L'opérateur \mathbf{P} correspond au second gradient discret.

Remarque. Les contraintes $|u_{,xx}| \leq 1/\ell_c$ peuvent être écrites séparément comme $u_{,xx} \leq 1/\ell_c$ et $-u_{,xx} \leq 1/\ell_c$. Il convient de noter qu'au plus une seule de ces contraintes est active à un point donné dans le corps.

2.1.1 États mécaniques étant donné des états matériaux

Reprenant les variations du lagrangien dans l'équation 6 en supposant que les états matériaux soient donnés, on obtient

$$\delta \Pi^u = \mathbf{B}^T \mathbf{C} \mathbf{B} \mathbf{u} - \mathbf{B}^T \mathbf{C} \boldsymbol{\epsilon}^* + \mathbf{P}^T \lambda_u + \mathbf{P}^T \lambda_\eta = 0, \quad (7)$$

$$\delta \Pi^\eta = \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{P}^T \lambda_\eta = 0, \quad (8)$$

$$\delta \Pi^\sigma = \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^* - \mathbf{C} \mathbf{B} \boldsymbol{\eta} = 0, \quad (9)$$

$$\delta \Pi^{\lambda_u} = \mathbf{P}\mathbf{u} - \frac{1}{\ell_c} = 0, \quad (10)$$

$$\delta \Pi^{\lambda_\eta} = \mathbf{P}\{\mathbf{u} + \boldsymbol{\eta}\} - \frac{1}{\ell_c} = 0. \quad (11)$$

En éliminant $\boldsymbol{\sigma}$ des équations (8) et (9), on obtient :

$$\mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}^* + \mathbf{B}^T \mathbf{C} \mathbf{B} \boldsymbol{\eta} + \mathbf{P}^T \lambda_\eta = 0. \quad (12)$$

Les équations ci-dessus peuvent être écrites sous une forme matricielle comme suit :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B}^T \mathbf{C} \mathbf{B} & 0 & \mathbf{P}^T & \mathbf{P}^T \\ 0 & \mathbf{B}^T \mathbf{C} \mathbf{B} & 0 & \mathbf{P}^T \\ \mathbf{P} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{P} & \mathbf{P} & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \boldsymbol{\eta} \\ \lambda_u \\ \lambda_\eta \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{B}^T \mathbf{C} \boldsymbol{\epsilon}^* \\ -\mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}^* \\ 1/\ell_c \\ 1/\ell_c \end{Bmatrix} \quad (13)$$

Remarque. Puisque, à la convergence, $\epsilon = \epsilon^*$ et $\sigma = \sigma^*$, il est possible de voir à partir de l'équation (7) que $\mathbf{P}^T \lambda_u + \mathbf{P}^T \lambda_\eta = 0$ et donc, $\mathbf{P}^T \lambda_\eta = -\mathbf{P}^T \lambda_u$. L'équation 8 devient alors $\mathbf{B}^T \sigma - \mathbf{P}^T \lambda_u = 0$, ce qui correspond à l'équation (36) de [10]. Ainsi, à la convergence, les résultats obtenus en résolvant les équations ci-dessus devraient être les mêmes que ceux obtenus dans [10].

2.1.2 États matériaux étant donné des états mécaniques

Idéalement, étant donné un état mécanique, les états matériaux sont trouvés en utilisant une recherche des voisins les plus proches comme dans [3]. Dans le cas présent, on suppose que les états matériaux sont connus et décrits par des équations linéaires par morceaux (voir la Figure 3). Les états matériaux les plus proches, étant donné les états mécaniques, sont donc trouvés de manière analytique. En supposant que les états matériaux sont décrits par la relation $\sigma^* = m\epsilon^* + c$, l'état matériel le plus proche de l'état mécanique peut être obtenu par :

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon^*} \left(\frac{(\sigma - m\epsilon^* - c)^2}{2C} + \frac{C(\epsilon - \epsilon^*)^2}{2} \right) = 0, \quad \sigma^* = m\epsilon^* + c. \quad (14)$$

Cela permet de séparer les difficultés et de se focaliser sur la régularisation, supposant une base de données idéale.

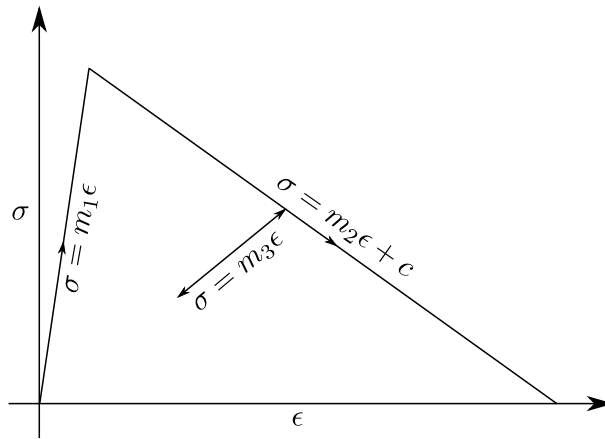


FIGURE 3 – Base de données d'un matériau endommageable.

2.1.3 Algorithme Data driven

La solution d'un problème aux conditions limites est désormais trouvée en itérant de manière répétée entre les états mécaniques et matériaux, par une méthode de point fixe. Par exemple, les états matériaux sont initialement pris comme étant égaux à ceux de l'itération précédente. Les états mécaniques sont ensuite trouvés comme décrit dans la section 2.1.2. Les états mécaniques obtenus sont ensuite maintenus fixes et les états matériaux sont obtenus comme décrit dans la section 2.1.1. Ce processus est répété jusqu'à ce que la solution converge. Cela peut être le cas, par exemple, lorsque les états matériaux ne changent plus entre les itérations.

3 Application à un problème 1D

L'efficacité de la technique de régularisation pour les méthodes basées sur les données est démontrée sur un problème 1D comme décrit ci-dessous. Considérons une barre avec une imperfection géométrique au centre (voir la Figure 4). L'imperfection déclenche la localisation initiale de la déformation au centre. L'extrémité gauche de la barre est fixe, tandis que l'extrémité droite est soumise à un certain déplacement.

La minimisation contrainte de la fonctionnelle de distance en présence de contraintes d'égalité et d'inégalité (équation 6) est réalisée dans ce cas en utilisant l'algorithme SLSQP de la sous-routine fmincon dans Matlab.

```
x = fmincon(distance,x0,Inequality LHS,Inequality RHS,Equality LHS,Equality RHS)
```

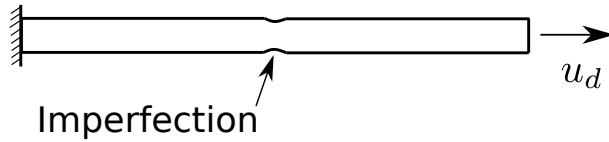


FIGURE 4 – Barre 1D avec imperfection.

3.1 Maillage

Les déplacements sont discrétisés à l'aide d'éléments linéaires par morceaux (voir la Figure 5). Les déformations sont donc constantes par morceaux à l'intérieur de chaque élément. Pour imposer les contraintes sur le gradient de déformation, un maillage dual, comme indiqué en rouge dans la Figure 5, a été utilisé. Les déformations calculées sur les éléments en noir sont interpolées linéairement sur les éléments en rouge. Ainsi, les gradients de déformation sont constants dans les éléments rouges.

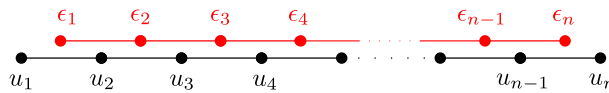


FIGURE 5 – Maillage primal et dual.

L'opérateur P dans l'équation (6) peut donc être identifié comme la composition des matrices B sur les maillages rouge et noir : $P = B^{dual} B$.

Remarque. Une fois que la valeur de l'endommagement en un point atteint la valeur de 1, la contrainte en ce point doit être supprimée. Cela garantit que la déformation se localise dans l'élément qui est complètement endommagé.

3.2 Résultats

3.2.1 Distribution de déformation

La variation de la déformation dans la barre à différentes valeurs de déplacements appliqués peut être observée dans la Figure 6 pour deux tailles de maillage. On peut voir que la largeur de la distribution de déformation est indépendante de la taille du maillage. On peut voir que les déformations commencent à se localiser vers le centre de la barre et le profil s'étend vers l'extérieur à mesure que la charge appliquée (déplacement imposé) augmente. La largeur de la région lorsque la barre est complètement endommagée est égale à $2\ell_c$.

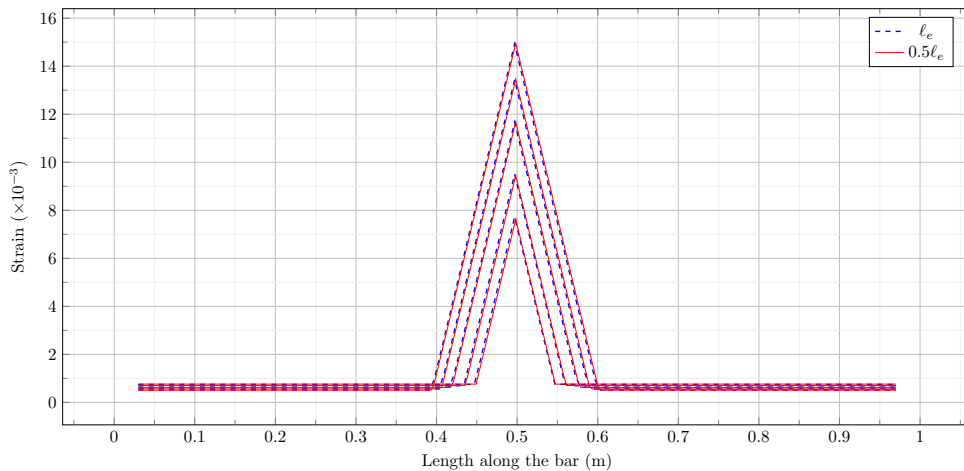


FIGURE 6 – Distribution de déformation - deux maillages.

3.2.2 Courbes charge-déplacement

La courbe charge-déplacement pour les deux tailles de maillage peut être observée dans la Figure 7. On peut voir que la charge augmente d'abord jusqu'à une valeur maximale, puis commence progressivement à diminuer à mesure que le déplacement augmente. La force de réaction devient nulle une fois qu'un élément est entièrement endommagé et que la contrainte est supprimée. Une fois de plus, les résultats sont indépendants de la taille du maillage.

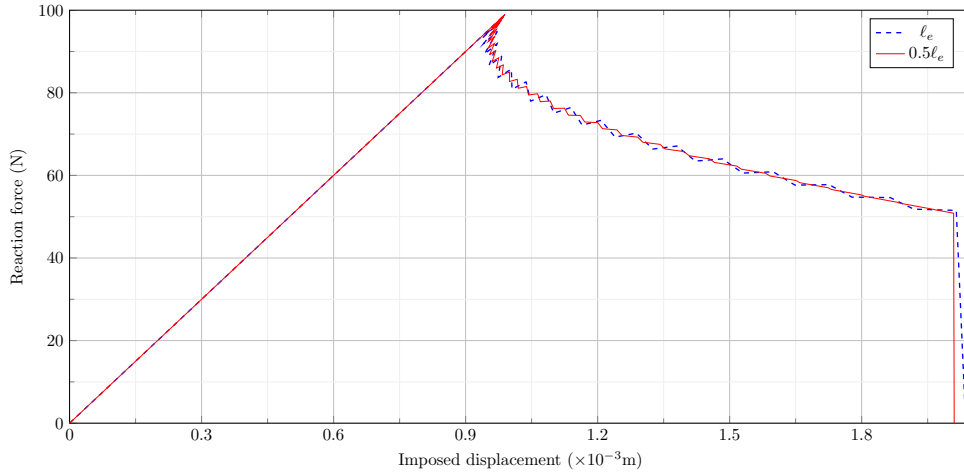


FIGURE 7 – Courbes charge-déplacement - deux maillages.

3.2.3 Effet de l_c

L'effet de l_c dans l'équation 6 sur le profil de déformation dans le corps lorsque la barre est complètement endommagée peut être observé dans la Figure 8. On peut voir que la largeur finale du profil de déformation dépend de l_c , celle-ci devient plus large avec une augmentation de l_c , comme prévu.

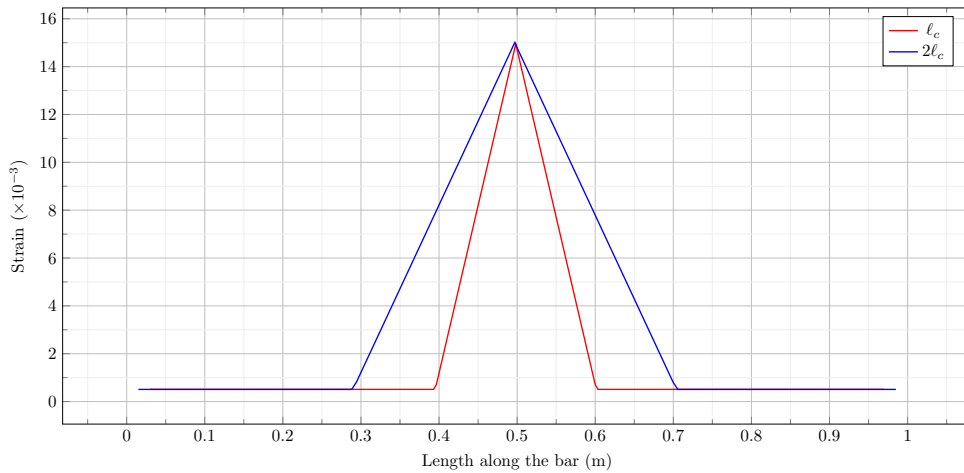


FIGURE 8 – Effet de l_c sur le profil de déformation.

4 Conclusions

Cet article présente l'application de la méthode de Data Driven aux problèmes impliquant l'adoucissement. Une régularisation Lipschitz basée sur la déformation a été utilisée pour introduire une échelle de longueur dans le problème. L'utilisation de la variable de déformation pour introduire une échelle de longueur dans le problème rend la méthode plus utile dans le contexte de la DDCM. En l'appliquant à un cas 1D, l'efficacité de cette méthode a été démontrée. Les résultats ont été observés comme étant indépendants de la taille du maillage utilisée.

Perspectives

Dans le cas 2D, la contrainte peut être écrite comme suit :

$$\tilde{\psi}(\nabla\epsilon) = a_1 k_{iik} k_{kjj} + a_2 k_{ijj} k_{ikk} + a_3 k_{iik} k_{jjk} + a_4 k_{ijk} k_{ijk} + a_5 k_{ijk} k_{kji} \leq \frac{1}{\ell_c^2}, \quad (15)$$

pour une certaine valeur ℓ_c' , où $k_{ijk} = \epsilon_{jk,i}$, le gradient de déformation. La mise en œuvre de la contrainte et la démonstration de son application dans un problème de DDCM en 2D sont l'objet de recherches en cours et futures.

Remerciements

Ces travaux ont bénéficié d'un financement de l'ISite NEXt (Nantes Université) au travers du projet IRP iDDrEAM.

Références

- [1] T. Kirchdoerfer and M. Ortiz. Data-driven computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 304 :81–101, 2016.
- [2] T. Kirchdoerfer et M. Ortiz. Data-driven computing in dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 113 :1697–1710, 2018.
- [3] R. Eggersmann, T. Kirchdoerfer, S. Reese, L. Stainier, and M. Ortiz. Model-free data-driven inelasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 350 :81–99, 2019.
- [4] K. Karapiperis, M. Ortiz, and J. E. Andrade. Data-driven nonlocal mechanics : Discovering the internal length scales of materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 386 :114039, 2021.
- [5] Jean-Jacques Marigo, Corrado Maurini, and Kim Pham. An overview of the modelling of fracture by gradient damage models an overview of the modelling of fracture by gradient damage models an overview of the modelling of fracture by gradient damage models. *Meccanica*, page 51, 2016.
- [6] C. Miehe, F. Welschinger, and M. Hofacker. Thermodynamically consistent phase-field models of fracture : Variational principles and multi-field fe implementations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 83 :1273–1311, 9 2010.
- [7] R. H. J. Peerlings, R. DE Borst, W. A. M. Brekelmans, and J. H. P. DE Vree. Gradient enhanced damage for quasi-brittle materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 39 :3391–3403, 10 1996.
- [8] Raymond David Mindlin and N. Eshel. On first strain-gradient theories in linear elasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 4 :109–124, 1968.
- [9] Nicolas Moës and Nicolas Chevaugeon. Lipschitz regularization for softening material models : The lip-field approach. *Comptes Rendus - Mécanique*, 349 :415–434, 2021.
- [10] Vasudevan Kamasamudram and Laurent Stainier. A strain based lipschitz regularization for materials undergoing damage. *Comptes Rendus. Mécanique*, 351(G1) :125–149, 2023.