Note courte sur l'implémentation PF_OED.py

Décomposition énergétique avec projecteurs (forme fermée 2D)

Dorian Nezzar

Objectif

Ce script propose un exemple de rupture fragile par champ de phase en 2D (élément Q4, déformation plane) avec :

- Décomposition de l'énergie par la méthode *Orthogonal Energy Decomposition* (OED) He [2024], Nguyen et al. [2020]
- variable historique H pour l'irréversibilité
- chargement triangulaire $0 \to U^+ \to 0 \to U^- \to 0$
- deux variantes OED : `OED_method={projector,eig}`

Cinématique et élasticité (Voigt)

On utilise la convention Voigt $\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \gamma_{xy}]^T$ avec $\gamma_{xy} = 2\varepsilon_{xy}$. Le tenseur d'élasticité C (plane strain isotrope) donne l'énergie

$$\psi(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\varepsilon}^T C\, \boldsymbol{\varepsilon}, \qquad \boldsymbol{\sigma} = C\, \boldsymbol{\varepsilon}.$$

Principe de la décomposition OED

L'idée OED est de séparer la déformation en parties *traction* et *compression* de manière **orthogonale dans la norme d'énergie** définie par C. On introduit la transformation énergétique

$$\tilde{\varepsilon} \;=\; C^{1/2}\, \boldsymbol{\varepsilon},$$

et on effectue la split dans cet espace, puis on revient avec $C^{-1/2}$:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^+ = C^{-1/2}\, \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^+, \qquad \boldsymbol{\varepsilon}^- = C^{-1/2}\, \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^-.$$

Propriétés clés :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^+ + \boldsymbol{\varepsilon}^-, \quad (\boldsymbol{\varepsilon}^+)^T C\, \boldsymbol{\varepsilon}^- = 0, \quad \psi = \psi^+ + \psi^-, \quad \psi^\pm = \frac{1}{2}\,(\boldsymbol{\varepsilon}^\pm)^T C\, \boldsymbol{\varepsilon}^\pm.$$

La contrainte unilatérale utilisée ensuite est

$$\boldsymbol{\sigma} \;=\; g(d)\, C\, \boldsymbol{\varepsilon}^+ \;+\; C\, \boldsymbol{\varepsilon}^-, \qquad g(d) = (1-d)^2 + k.$$

Méthode `OED_method="projector"` (forme fermée 2D)

Cette option **évite tout calcul de vecteurs propres**. On travaille avec le tenseur 2×2 symétrique

$$\tilde{\varepsilon} \;=\; \begin{bmatrix} t_{xx} & t_{xy} \\ t_{xy} & t_{yy} \end{bmatrix} \quad \text{tel que} \quad \big[t_{xx},\, t_{yy},\, 2t_{xy}\big]^T = C^{1/2}\, \boldsymbol{\varepsilon}.$$

On calcule les invariants

$$\mathrm{tr} = t_{xx} + t_{yy}, \qquad \det = t_{xx}t_{yy} - t_{xy}^2,$$

puis les valeurs propres (fermées, sans diagonalisation)

$$\lambda_{1,2} = \tfrac{1}{2}\Big(\mathrm{tr} \pm \sqrt{\mathrm{tr}^2 - 4\det}\Big), \quad \lambda_1 \ge \lambda_2.$$

Les **projecteurs** sont construits sans vecteurs propres :

$$E_1 = \frac{\tilde{\varepsilon} - \lambda_2 I}{\lambda_1 - \lambda_2}, \qquad E_2 = I - E_1.$$

On scinde alors

$$\tilde{\varepsilon}^+ = \lambda_1^+ E_1 + \lambda_2^+ E_2, \qquad \tilde{\varepsilon}^- = \lambda_1^- E_1 + \lambda_2^- E_2, \qquad \lambda^{\pm} = \max / \min(\lambda, 0).$$

Enfin, on revient en Voigt via $C^{-1/2}$ (attention au facteur $\gamma_{xy} = 2\varepsilon_{xy}$).

Cas dégénéré ($\lambda_1 \approx \lambda_2$) : on prend $E_1 = I$, $E_2 = 0$ si $\lambda_1 \ge 0$ (tout en traction), sinon $E_1 = 0$, $E_2 = I$.

Option `OED_method="eig"`

Même logique OED, mais en diagonalisation classique $\tilde{\varepsilon} = V \Lambda V^T$, puis $\tilde{\varepsilon}^{\pm} = V \Lambda^{\pm} V^T$. Implémentation simple, mais plus coûteuse.

Champ de phase et irréversibilité

Le champ d est piloté par la **variable historique** (locale, PointGauss)

$$H^{n+1}(x) \;=\; \max\big(H^n(x),\, \psi^+(x)\big), \qquad \psi^+ = \tfrac{1}{2}\, (\boldsymbol{\varepsilon}^+)^T C\, \boldsymbol{\varepsilon}^+.$$

La forme faible implémentée conduit, au niveau élémentaire, à une matrice $K_\phi = G_c\, l_0\, (\nabla N)^T \nabla N + \big(G_c/l_0 + 2H\big) N^T N$ et un résidu $R_\phi = 2H\, N$, puis on résout $K_\phi\, d = R_\phi$. Pour **enforcer l'irréversibilité nodale**, on applique la projection

$$d^{n+1} \leftarrow \max\big(d^{n+1},\, d^n\big) \quad \text{et on borne} \quad d \in [0,1].$$

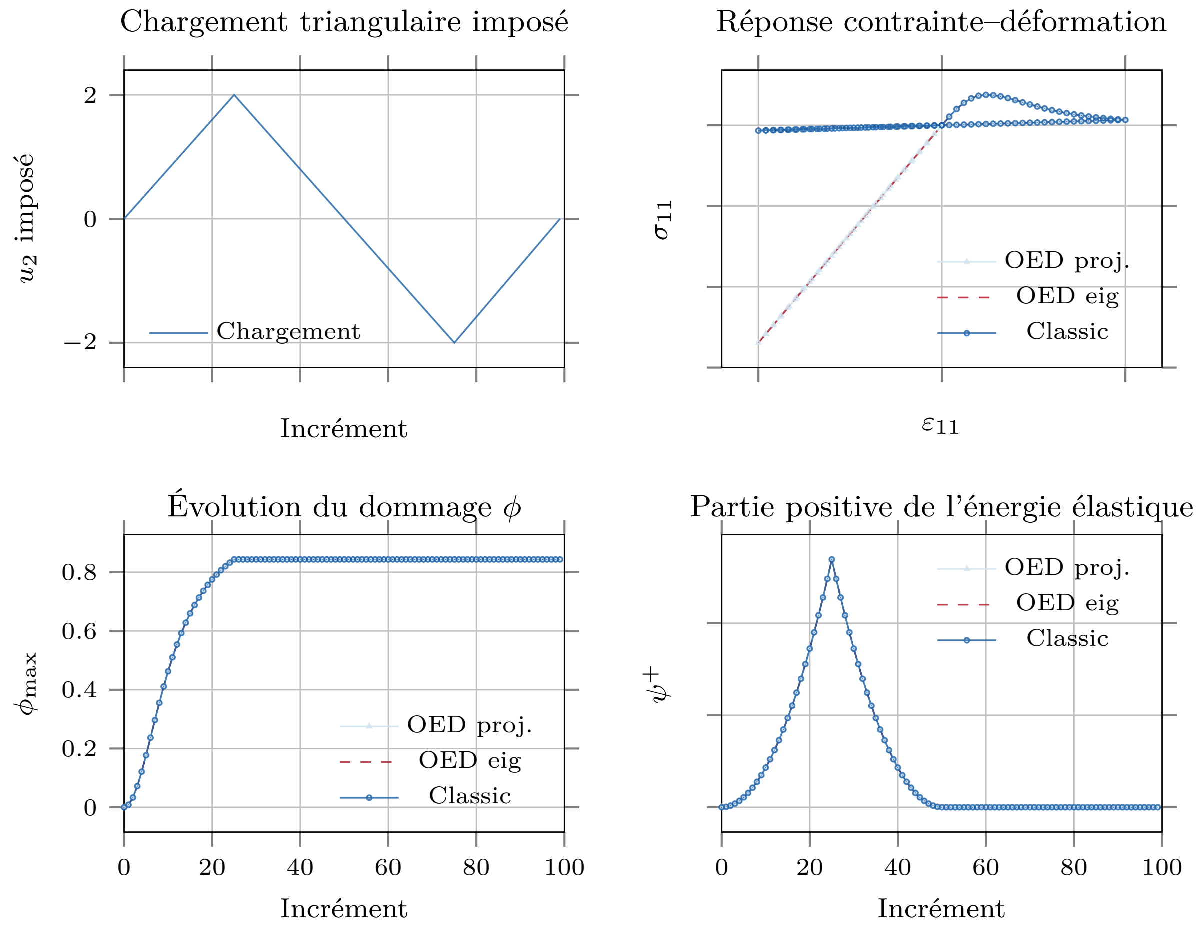
Algorithme d'un incrément (résumé)

1. Construire le déplacement imposé U et obtenir $\boldsymbol{\varepsilon} = B\, U$ aux 4 PointGauss.
2. **split (mode OED)** :
   (a) `projector` : invariants $\to \lambda_{1,2}$ fermés, projecteurs (E_1, E_2), calcul de $\boldsymbol{\varepsilon}^{\pm}$;
   (b) `eig` : EVD de $\tilde{\varepsilon}$, calcul de $\boldsymbol{\varepsilon}^{\pm}$.
3. Calcul de $\psi^+ = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\varepsilon}^+)^T C\, \boldsymbol{\varepsilon}^+$, puis mise à jour $H \leftarrow \max(H, \psi^+)$.
4. Résolution du champ d avec H et projection nodale $d^{n+1} \ge d^n$.
5. Contraintes aux PointGauss : $\boldsymbol{\sigma} = g(d)\, C\, \boldsymbol{\varepsilon}^+ + C\, \boldsymbol{\varepsilon}^-$.

Options de calcul

- `mode="OED"` : split OED (unilatéralité sur la contrainte).
- `mode="classic"` : énergie positive construite à partir des déformations principales positives de $\boldsymbol{\varepsilon}$ (sans $C^{1/2}$), et dégradation appliquée à la contrainte complète $g(d)\, C\, \boldsymbol{\varepsilon}$.
- `OED_method="projector" ou "eig"` : choix de la mise en œuvre de OED.

Les deux méthode OED (projector/eig) donnent des résultats identiques (voir figure)



References

Q.-C. He. Three-dimensional strain and stress orthogonal decompositions via an elastic energy preserving transformation. *International Journal of Solids and Structures*, 295: 112818, 2024. ISSN 0020-7683. doi: https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2024.112818. URL `https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002076832400177X`.

T.-T. Nguyen, J. Yvonnet, D. Waldmann, and Q.-C. He. Implementation of a new strain split to model unilateral contact within the phase field method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 121(21):4717–4733, 2020. doi: https://doi.org/10.1002/nme.6463. URL `https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nme.6463`.