

MODÉLISATION NUMÉRIQUE ET CALCUL HAUTE PERFORMANCE

ANNÉE UNIVERSITAIRE 2019 - 2020

RAPPORT DE STAGE DU MASTER 2

MÉTHODES DE RÉDUCTION DE MODÈLE POUR PRÉDIRE L'ENDOMMAGEMENT DES MATERIAUX

Konan A. ALLALY

Encadrants : Modesar SHAKOOR
Dmytro VASIUKOV
Enseignant référent : Angelo IOLLO

1^{er} octobre 2020

stage effectué du 16 Mars 2020 au 16 Septembre 2020 au Centre d'Enseignement, Recherche et Innovation Matériaux Procédés (CERIP MP) de l'IMT de Lille Douai situé au 764 Boulevard Lahure, 59500 Douai, Bat Ingénierie Mécanique.

Symboles et Notations

- ρ : masse volumique
 u : vecteur déplacement
 λ, μ : Coefficients de Lamé
 λ_0, μ_0 : Coefficients de Lamé de référence
 I : tenseur identité
 E : module de Young
 ν : Coefficient de Poisson
 τ : tenseur de polarisation
 \mathbb{A} : tenseur de localisation des déformations
 \mathbb{B} : tenseur de concentration des contraintes
 \mathbb{C} : tenseur des constantes élastiques
 K : module d'écrouissage
 δ : symbole de Kronecker
 ξ : variable dans l'espace de Fourier
 Γ^0 : Opérateur de Green
 σ : tenseur des contraintes (microscopiques)
 $\dot{\sigma}$: taux de contrainte
 σ^M : tenseur des contraintes macroscopiques
 $\bar{\sigma}$: seuil de plasticité
 σ_Y : seuil de plasticité initial
 σ^{test} : tenseur des contraintes de test
 ε : tenseur des déformations (microscopiques)
 ε^M : tenseur des déformations macroscopiques
 $\dot{\varepsilon}$: taux de déformation
 ε^{el} : déformation élastique
 $\dot{\varepsilon}^{el}$: taux de déformation élastique
 $\dot{\varepsilon}^{in}$: taux de déformation inélastique
 ε^{pl} : déformation plastique
 $\dot{\varepsilon}^{pl}$: taux de déformation plastique
 $\bar{\varepsilon}^{el}$: déformation plastique équivalente
 $\dot{\bar{\varepsilon}}^{el}$: taux de déformation plastique équivalente
 λ^{pl} : multiplicateur plastique
 ε_0 : décalage ou déformation plastique équivalente initiale
 α_k : modes plastiques
 f : fonction de charge
 \bar{f} : contrainte effective
 s : tenseur déviateur
 s^{test} : tenseur déviateur de test
 $\chi^{(r)}$: fonction caractéristique dans la phase r
 Ψ : dissipation plastique
 Ψ^M : dissipation plastique macroscopique

Résumé

Pour mon mémoire de fin d'études, j'ai eu l'opportunité d'effectuer un stage de recherche en mécanique numérique au Centre d'Enseignement, Recherche et Innovation Matériaux & Procédés (CERI MP) de l'IMT Lille Douai sous la supervision de Modesar SHAKOOR et Dmytro VASIUKOV sans oublier mon enseignant référent Angelo IOLLO. Le CERI MP est un centre dont les travaux de recherche se concentrent sur l'amélioration des matériaux et procédés existants et l'invention de nouveaux matériaux et procédés plus performants, notamment autour des composites, des polymères et des matériaux du génie civil. Dans cet objectif, les approches numériques jouent un rôle de plus en plus important d'où les travaux sur les méthodes numériques à base de transformée de Fourier rapide (ou FFT en anglais Fast Fourier Transform), et la réduction de modèle de type NTFA. Les schémas à base de FFT sont très précis et efficaces, mais ils impliquent beaucoup de variables ce qui donne lieu à un coût computationnel très important. À ce niveau plusieurs options se présentent, soit abandonner ces méthodes au profit d'autres méthodes, soit utiliser des ordinateurs de plus en plus puissants ou s'orienter vers les méthodes de réduction de modèles, qui permettent, à partir d'un faible nombre de variables et de données pré-calculées, d'obtenir des résultats précis dans un délai relativement court. Mon stage s'inscrit dans le cadre de la troisième option, car les méthodes de réduction de modèles restent un champ de la recherche relativement peu exploité.

Notre objectif dans un premier temps était de comprendre la méthode à base de FFT, ensuite faire une étude bibliographique sur les méthodes de réduction de modèles basés sur la FFT. Et dans un second temps choisir l'une de ces méthodes, ici la NTFA (Non-Uniform Transformation Field Analysis), l'étudier pour une loi de comportement non linéaire telle que l'élastoplasticité, et dans le même temps, essayer d'appliquer cette méthode en vue de modéliser l'endommagement et la rupture de matériaux composites.

La méthode à base de FFT est une alternative attractive à la méthode des éléments finis et elle est utilisée pour la résolution des équations d'équilibre de la mécanique des milieux continus pour déterminer les propriétés effectives et les champs locaux dans les polycristaux et les matériaux composites. En effet, les schémas numériques à base de FFT permettent de résoudre l'équation de type Lippmann-Schwinger qui découlent des problèmes élastiques hétérogènes (ou pas seulement), grâce à l'utilisation des fonctions de Green modifiées d'un milieu de référence choisi de manière optimale. Les champs résultants sont obtenus dans l'espace réel grâce à l'utilisation de la transformée de Fourier inverse.

Dans ce mémoire nous commençons par présenter le problème de mécanique qui fait l'objet de notre attention. Ensuite, nous présentons l'étude des comportements tels que l'élasticité linéaire et l'élastoplasticité qui sont des comportements assez fréquents chez la plupart des matériaux. Nous présentons dans la dernière partie, une formulation de la NTFA pour les matériaux élastoplastiques et nous terminons par les résultats de nos codes.

Abstract

The objective of the internship is to investigate NTFA-type model reduction methods. The methods are based on the fast Fourier transform (FFT) and could be an alternative to the finite element method in the sense that they are easy to implement and produce satisfactory results. However, they are very costly in memory space and computing time when the number of variables is large. The model reduction accelerates the calculations by using the pre-calculated data. The review of basics in continuum mechanics, especially in constitutive laws such as linear elasticity and elastoplasticity, has been addressed. Several codes were developed in Python to solve the problem of linear elasticity and elastoplasticity by NTFA method. We noticed the efficiency of the NTFA which yields satisfactory results in a short amount of time.

Sommaire

| | |
|--|-----------|
| 1 Présentation du problème | 3 |
| 1.1 Tenseur de contrainte | 3 |
| 1.2 Tenseur de déformation | 3 |
| 1.3 Équations fondamentales de la mécanique des milieux continus | 4 |
| 1.4 Homogénéisation | 4 |
| 2 Étude des comportements Élastique et Élastoplastique | 6 |
| 2.1 Élasticité Linéaire | 6 |
| 2.1.1 Méthodes à base de FFT | 7 |
| 2.2 Élastoplasticité en petites déformations | 9 |
| 2.2.1 Surface de charge | 9 |
| 2.2.2 Contrainte effective | 9 |
| 2.2.3 Seuil de Plasticité | 10 |
| 2.2.4 Écrouissage | 10 |
| 2.2.5 Écoulement Plastique | 11 |
| 2.2.6 Résolution numérique pour la plasticité de von Mises | 11 |
| 3 Modèles d'ordre réduit (Méthodes de réduction de modèle) | 13 |
| 3.1 Généralités | 13 |
| 3.2 La POD | 13 |
| 3.3 La PGD | 13 |
| 3.4 Hyper-réduction | 14 |
| 3.5 La NTFA | 14 |
| 4 Mise en oeuvre de la NTFA | 15 |
| 4.1 Présentation du problème | 15 |
| 4.2 Champ de transformation non uniforme | 15 |
| 4.3 Variables macroscopiques | 16 |
| 4.4 POD pour la sélection des modes plastiques | 16 |
| 4.4.1 Bref résumé de la POD | 16 |
| 4.4.2 Résumé de la POD pour notre problème | 18 |
| 4.5 Équations et opérateurs de la NTFA | 18 |
| 5 Applications et résultats | 21 |
| 5.1 Élasticité linéaire | 21 |
| 5.2 Élastoplasticité | 21 |
| 5.3 NTFA pour l'élastoplasticité | 22 |

INTRODUCTION GÉNÉRALE

La simulation numérique, visant à prédire les comportements mécaniques des matériaux, nécessite la mise en place de modèles adaptés. La modélisation physique s'attache à formaliser mathématiquement des observations expérimentales dans le but d'être capable de les reproduire numériquement. Les modèles sont élaborés pour reproduire les observations spécifiques qui intéressent le modélisateur dans le cadre d'applications données. Dans les modèles physiques en mécanique, on distingue deux types d'équations particulières. Les premières sont liées aux lois de la physique. Elles rassemblent, les équations d'équilibre, les équations de compatibilité et les conditions aux limites. Ces équations sont générales au sens où elles sont valides, quel que soit le matériau. Le second type d'équations permet de caractériser spécifiquement les matériaux. Elles constituent ce qu'on appelle les lois matériaux ou lois de comportement. Elles sont généralement formulées localement en espace et l'histoire des transformations irréversibles est décrite à l'aide de variables internes. Les étapes principales de mise en place d'un modèle de comportement mécanique sont : la caractérisation expérimentale du phénomène étudié, définition du modèle le mieux adapté pour reproduire les comportements que l'on cherche à comprendre, définition des essais et des mesures expérimentales qui permettront d'ajuster et de valider le modèle et la calibration effective du modèle à partir des résultats expérimentaux et des simulations numériques.

Ces étapes qui se succèdent chronologiquement peuvent être particulièrement coûteuses en temps de calcul. Compte tenu de la nature très exploratoire des procédures et des questions posées, ces étapes impliquent nécessairement l'intervention d'experts du domaine.

Les lois matériaux sont usuellement formulées sous la forme d'équations différentielles algébriques faisant intervenir les variables mécaniques classiques (tenseur des contraintes et tenseur des déformations) et dans le cas de lois de comportement plus élaborées, des variables mécaniques internes (telles que les variables d'écrouissage, d'endommagement, ect.).

1 Présentation du problème

1.1 Tenseur de contrainte

En mécanique des milieux continus les matériaux sont assimilés à des milieux soumis à un certain nombre de principes généraux de la physique et de la mécanique (conservation d'énergie, conservation de la quantité de mouvement, etc...)

Quand un corps est soumis à l'action de forces extérieures, des contraintes internes s'établissent, celles-ci sont modélisées par le tenseur des contraintes :

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix}$$

Ces contraintes équilibrivent les sollicitations dans l'objectif de conserver l'équilibre du matériau. Le mode d'application des ces efforts est un point clé dans la conception des structures. Ainsi, la connaissance des forces locales dans le solide permet de prévenir les ruptures et les endommagements que peut subir la structure.

Soit f une force par unité de volume qui s'applique sur un petit solide au repos. L'équation d'équilibre (en 3D) se traduit donc par :

$$\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + f_i = 0 \quad \forall i = 1, 2, 3. \iff \operatorname{div} \sigma + f = 0$$

Cette équation peut se réécrire :

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + f_i = 0$$

Cette notation est due à Einstein et c'est elle que nous utiliserons dans la suite de ce mémoire.

1.2 Tenseur de déformation

Lorsqu'un solide est soumis à des sollicitations extérieures, les particules qui le composent se déplacent dans l'espace. Ces déplacements entraînent des variations d'angles et de longueurs. On appelle ces variations déformations.

Soit un solide Ω_0 à l'état initial. On considère un point $X = (X_1, X_2, X_3)$ de ce solide. On fait subir une déformation à ce solide et on obtient un solide déformé Ω_1 . Si on appelle $x = (x_1, x_2, x_3)$ un point du solide déformé. Le déplacement entre état de référence et état déformé se traduit par le vecteur :

$$u = x - X, \quad u_i = x_i - X_i, \quad i = 1, 2, 3.$$

Si on appelle ϕ la déformation, on a la relation entre déformation et déplacement :

$$\phi(X, t) = u = x - X$$

Le gradient de déformation est donné par la relation :

$$F = \nabla \phi(X, t) = \nabla u + I, \quad I \text{ est la matrice identité}$$

Le vecteur gradient de déplacement peut être décomposé en une partie symétrique ε et une partie antisymétrique ω :

$$\nabla u = \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla^T u) + \frac{1}{2}(\nabla u - \nabla^T u)$$

où :

$$\varepsilon = \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla^T u), \quad \omega = \frac{1}{2}(\nabla u - \nabla^T u)$$

On a en indiciel :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right), \quad \omega_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right), \quad i, j = 1, 2, 3.$$

La partie ε est la seule responsable de changement de forme de notre solide. Elle modélise la déformation locale. Ainsi si l'on est en petites déformations, l'état de déformation en un point P du solide est entièrement caractérisée par le tenseur ε :

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

1.3 Équations fondamentales de la mécanique des milieux continus

Comme on a pu le faire remarquer, lorsqu'un solide est soumis à des sollicitations extérieures, on observe une résistance interne qui est modélisée par le tenseur des contraintes et en fonction de l'importance de ces sollicitations on observe aussi des déformations qui elles sont modélisées par le tenseur de déformation. En fait, chaque milieu (solide) possède ses propres caractéristiques et est donc régit par des lois de comportement qui déterminent sa réponse aux sollicitations. Autrement, une loi de comportement est une relation entre contrainte et déformation. Étudier la loi de comportement d'un matériau revient à établir les relations entre contraintes et déformations propre à ce matériau. Il existe différents comportements des matériaux, parmi lesquels on peut citer, l'élasticité, la viscosité, la plasticité et leurs combinaisons.

Pour étudier des lois de comportements des matériaux, où plusieurs paramètres tels que la vitesse, la température, la viscosité et d'autres paramètres peuvent intervenir, il faut considérer l'équation de la dynamique dans sa forme générale :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{div}(\sigma) + f = \rho \ddot{u}, \text{ sur } \Omega \\ \sigma = H(\varepsilon), \text{ sur } \Omega \\ \varepsilon = \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^T) \\ CL \end{array} \right. \quad (1)$$

où ρ désigne la masse volumique, H la loi de comportement et CL les conditions aux limites.

Nous allons nous intéresser, à un cas particulier dans ce travail, c'est-à-dire la statique, où on suppose qu'il n'y a pas de force volumique (on néglige la gravité). Dans ces conditions le problème à résoudre s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{div}(\sigma) = 0, \text{ sur } \Omega \\ \sigma = H(\varepsilon), \text{ sur } \Omega \\ \varepsilon = \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^T) \\ CL \end{array} \right. \quad (2)$$

1.4 Homogénéisation

À une échelle suffisamment petite, tous les matériaux sont hétérogènes. Cependant, l'échelle des structures macroscopiques est en général si grande devant celle des hétérogénéités que l'on observe une moyenne statistique des propriétés microscopiques et il est alors justifié de considérer le matériau comme homogène. L'objectif de l'homogénéisation est de modéliser un milieu hétérogène par un milieu homogène équivalent. Ce milieu homogène équivalent doit présenter la même réponse macroscopique que le milieu hétérogène quand il est soumis à la même sollicitation macroscopique. Pour ce faire, le Volume Élémentaire Représentatif (VER) du matériau a été introduit par Hill 1963 [17]. Un VER pour un "point matériel", d'une masse donnée à l'échelle macroscopique, est un volume de matière qui est représentatif à l'échelle microscopique de la constitution interne du matériau. En général la taille du VER sera choisie suffisamment petite par rapport à la taille de la structure.

Pour un VER donné et des conditions aux limites du genre compatibilité entre les tenseurs de contrainte microscopique et macroscopique sur le contour $\partial\Omega$ du VER, on arrive à établir :

$$\sigma^M(x) = \langle \sigma(x) \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \sigma(x) dx, \quad \text{et} \quad \varepsilon^M(x) = \langle \varepsilon(x) \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \varepsilon(x) dx$$

où σ^M et ε^M désignent les valeurs macroscopiques et σ, ε les valeurs microscopiques.

Le passage des grandeurs microscopiques aux grandeurs macroscopiques s'appelle **la localisation** et elle vise principalement à définir les deux tenseurs $\mathbb{A}(x)$ et $\mathbb{B}(x)$ qui sont tels que :

$$\sigma(x) = \mathbb{B}(x) : \sigma^M, \quad \varepsilon(x) = \mathbb{A}(x) : \varepsilon^M$$

Ce problème est plutôt complexe et en général on n'arrive pas à les définir de manière exacte, ce sont donc les hypothèses que l'on va introduire qui nous permettront de les définir. Ces deux tenseurs ont des propriétés intéressantes comme :

$$\langle \mathbb{A}(x) \rangle = I, \quad \langle \mathbb{B}(x) \rangle = I$$

On proposera dans la dernière partie de ce mémoire une méthode de calcul du tenseur de localisation \mathbb{A}

2 Étude des comportements Élastique et Élastoplastique

En mécanique des milieux continus, le comportement d'un matériau est complètement caractérisé lorsque l'on peut prévoir l'état des contraintes σ qu'on connaît à partir de l'histoire des déformations ε . Lorsque lors d'un essai, la courbe effort-déformation est la même en chargement et en déchargement, le comportement du matériau est dit élastique. Le comportement élastique peut être linéaire *i.e* le tenseur des déformations est proportionnel au tenseur des contraintes au cours des sollicitations et ce type de comportement a été découvert par HOOKE (1678). Le comportement élastique peut être non linéaire : les essais montrent généralement que la courbe effort-déformation devient rapidement non linéaire. En réalité, le comportement linéaire constitue seulement une approximation ou qu'on soit dans le cas de petite déformation. Ainsi lorsque la déformation n'est plus réversible, le comportement est dit **inélastique**.

2.1 Élasticité Linéaire

La théorie de l'élasticité linéaire se situe d'une part dans le cadre de la description des solides déformables et d'autre part on impose que la loi de comportement élastique reliant le tenseur des contraintes à celui des déformations soit linéaire. La loi de comportement dans ce cas est appelée loi de Hooke :

$$\sigma(x) = \mathbb{C}(x) : \varepsilon(x), \quad \text{où} \quad \sigma_{ij} = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 \mathbb{C}_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

où " : " désigne le produit doublement contracté, σ désigne le tenseur des contraintes, ε désigne le tenseur des déformations, \mathbb{C} est un tenseur d'ordre 4 qui est le tenseur des constantes élastiques du matériau. Lorsqu'on a un matériau isotrope (*c'est-à-dire* que le matériau a les mêmes propriétés élastiques dans toutes les directions), cette relation peut se réécrire de la façon suivante :

$$\sigma = \lambda \operatorname{tr}(\varepsilon) I + 2\mu \varepsilon, \implies \sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

où λ et μ sont les coefficients de Lamé et δ_{ij} le symbole de Kronecker.

Les équations gouvernant la théorie de l'élasticité linéaire sont donc :

$$\sigma_{ij} = 2\mu \varepsilon_{ij} + \lambda \operatorname{tr}(\varepsilon_{kl}) \delta_{ij}$$

et

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E} \sigma_{ij} - \frac{\nu \delta_{ij}}{E} \operatorname{tr}(\sigma_{kl})$$

Les relations entre les paramètres de comportement sont :

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}, & \mu &= \frac{E}{2(1+\nu)} \\ E &= \frac{\mu(3\lambda+2\mu)}{\lambda+\mu}, & \nu &= \frac{\lambda}{2(\lambda+\mu)} \end{aligned}$$

E représente le module de Young, ν le coefficient de Poisson et ils sont soumis aux conditions :

$$E > 0, \quad -1 < \nu < 0,5.$$

Il existe un cas particulier, le cas incompressible par exemple, où $\nu = 0,5$ et $\lambda = +\infty$

Pour résoudre notre problème d'élasticité linéaire, on considère le problème (2) avec la loi de comportement élastique linéaire :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \operatorname{div}(\sigma) & = & 0, \quad \text{sur } \Omega \\ \sigma & = & \mathbb{C} : \varepsilon, \quad \text{sur } \Omega \\ \varepsilon & = & \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^T) \\ CL \end{array} \right. \quad (3)$$

Plusieurs méthodes numériques existent pour résoudre le problème ci-dessus. Au nombre de ces méthodes numériques, nous présenterons en détails les méthodes à base de transformée de Fourier rapide (FFT) qui sont les méthodes qui font l'objet de notre travail. Et dans la mesure du possible nous ferons une comparaison entre les performances de ces méthodes et la méthode des éléments finis.

2.1.1 Méthodes à base de FFT

Revue bibliographique des méthodes à base de FFT

Les méthodes à base de FFT sont utilisées pour résoudre les équations d'équilibre de la mécanique des milieux continus pour déterminer les propriétés effectives et les champs locaux dans les polycristaux et les matériaux composites. Elles ont été initialement introduites par Moulinec et Suquet dans [15] pour résoudre numériquement l'équation intégrale de type Lippmann-Schwinger et pour calculer la réponse micromécanique des matériaux composites élastiques, directement à partir d'une image digitalisée de leur micro-structure. La méthode itérative pour résoudre cette équation se base sur un algorithme du point fixe et est couramment appelée **schéma basique**. La convergence du schéma basique dépend fortement du contraste mécanique entre les phases et également du choix du milieu de référence.

Dans la même période, Müller [29] a aussi utilisé la FFT pour résoudre les problèmes d'élasticité linéaire hétérogène, avec des applications aux matériaux composites. Afin de réduire la sensibilité au contraste mécanique, Eyre et Milton [5] ont proposé le schéma "accéléré" (un algorithme à point fixe basé sur la réécriture de l'équation de Lippmann-Schwinger) qui converge plus vite que le schéma basique. Le schéma accéléré a été par la suite étendu à l'étude des composites thermoélastiques non-linéaires [37].

Un schéma itératif de type "Lagrangien augmenté" a, par la suite, été intégré par Michel, Moulinec et Suquet dans [20] pour résoudre le problème lié aux contrastes infinis des matériaux composites. Ce nouveau schéma est basé sur une nouvelle formulation du problème hétérogène et utilise l'algorithme itératif d'Uzawa.

Plus récemment, Monchiet et Bonnet [36] proposent un schéma itératif basé sur le tenseur de polarisation des contraintes. Ce schéma a l'avantage de converger rapidement pour les composites contenant des inclusions rigides ou des vides. Par la suite, des comparaisons ont été réalisées entre le schéma Lagrangien augmenté, le schéma accéléré de Eyre et Milton [5] et celui basé sur la polarisation des contraintes [36] par Moulinec et Silva [14], avec des discussions intéressantes sur les différents critères de convergence à utiliser pour chaque méthode. Pour une étude bibliographique plus fournie sur les méthodes spectrales à base de FFT on pourra regarder [6].

Schéma basique de Moulinec et Suquet pour l'élasticité linéaire

Nous présentons ici la démarche de Moulinec et Suquet [15] pour résoudre le problème de l'élasticité linéaire :

À partir d'un développement asymptotique on peut réécrire le tenseur de déformation comme suit :

$$\begin{cases} \varepsilon(u(x)) = \varepsilon(u^*(x)) + \varepsilon^M, & \text{dans } \Omega \\ u(x) = \varepsilon^M \cdot x + u^*(x), & \text{dans } \Omega \\ u^* \text{ périodique} \end{cases} \quad (4)$$

Le problème local en déformation s'écrit alors :

$$\begin{cases} \sigma(x) = \mathbb{C}(x) : (\varepsilon(u^*(x)) + \varepsilon^M), & \text{dans } \Omega \\ \operatorname{div}(\sigma(x)) = 0, & \text{dans } \Omega \\ u^* \text{ périodique} \end{cases} \quad (5)$$

On introduit le tenseur d'élasticité de référence \mathbb{C}^0 , et le problème devient :

$$\begin{cases} \sigma(x) = \mathbb{C}^0(x) : \varepsilon(u^*(x)) + \tau(x), & \text{dans } \Omega \\ \operatorname{div}(\sigma(x)) = 0, & \text{dans } \Omega \\ u^* \text{ périodique} \end{cases} \quad (6)$$

où τ est le tenseur de polarisation tel que

$$\tau(x) = \delta\mathbb{C}(x) : \varepsilon(u^*(x)) \quad \text{avec} \quad \delta\mathbb{C}(x) = \mathbb{C}(x) - \mathbb{C}^0$$

On introduit Γ^0 (l'opérateur de Green associé à \mathbb{C}^0), notre équation devient :

$$\varepsilon(u^*(x)) = -\Gamma^0 * \tau(x), \quad \forall x \in \Omega$$

où $*$ désigne le produit de convolution.

Dans l'espace de Fourier on obtient :

$$\begin{cases} \hat{\varepsilon}(u^*(\xi)) &= -\hat{\Gamma}^0(\xi) : \hat{\tau}(\xi), \quad \forall \xi \neq 0 \\ \hat{\varepsilon}(u^*(0)) &= 0 \end{cases} \quad (7)$$

L'opérateur Γ^0 est connu explicitement dans l'espace de Fourier lorsqu'on a un matériau de référence isotrope avec les coefficients de Lamé λ^0 et μ^0 , il prend la forme :

$$\hat{\Gamma}_{ijkh}^0(\xi) = \frac{1}{4\mu^0|\xi|^2}(\delta_{ki}\xi_h\xi_j + \delta_{hi}\xi_k\xi_j + \delta_{kj}\xi_h\xi_i + \delta_{hj}\xi_k\xi_i) - \frac{\lambda^0 + \mu^0}{\mu^0(\lambda^0 + 2\mu^0)} \frac{\xi_i\xi_j\xi_k\xi_h}{|\xi|^4}$$

On retrouvera des détails sur la détermination de $\hat{\Gamma}^0$ dans [28].

En reprenant cette équation pour un u non périodique on obtient :

$$\varepsilon(u(x)) = -\Gamma^0 * \tau(x) + \varepsilon^M, \quad \forall x \in \Omega$$

Et donc dans l'espace de Fourier on obtient :

$$\begin{cases} \hat{\varepsilon}(u(\xi)) &= -\hat{\Gamma}^0(\xi) : \hat{\tau}(\xi) + \varepsilon^M, \quad \forall \xi \neq 0 \\ \hat{\varepsilon}(u(0)) &= \varepsilon^M \end{cases} \quad (8)$$

L'algorithme suivant est le schéma basique de Moulinec et Suquet et il reprend toute la démarche que nous venons de présenter. Il est basée sur un algorithme du point fixe.

Algorithm 1 Schéma basique

Initialisation : ε^M donné

$$\varepsilon^0 \leftarrow 0$$

$$\sigma^0(x) \leftarrow \mathbb{C}(x) : \varepsilon^0, \quad \forall x \in \Omega$$

Itération : (i+1) : $\varepsilon^i(x)$ et $\sigma^i(x)$ donné

$$1. \tau^i(x) \leftarrow \sigma^i(x) - \mathbb{C}^0 : \varepsilon^i(x)$$

$$2. \hat{\tau}^i(\xi) \leftarrow FFT(\tau^i(x))$$

$$3. \hat{\varepsilon}^{i+1}(\xi) \leftarrow \varepsilon^M - \hat{\Gamma}^0(\xi) : \hat{\tau}^i(\xi),$$

$$4. \varepsilon^{i+1}(x) \leftarrow FFT^{-1}(\hat{\varepsilon}^{i+1}(\xi)), \quad \forall \xi \neq 0, \text{ et } \hat{\varepsilon}^{i+1}(0) = \varepsilon^M$$

$$5. \text{Test de convergence} : \|\varepsilon^{i+1} - \varepsilon^i\| \leq tol$$

$$6. \sigma^{i+1}(x) \leftarrow \mathbb{C}(x) : \varepsilon^{i+1}(x)$$

Cet algorithme permet de résoudre le problème des champs élastiques en élasticité linéaire et hétérogène. L'algorithme se présente en deux parties dont l'une pour l'initialisation et l'autre pour les itérations sous la condition de convergence. Durant la phase d'initialisation, on a une déformation macroscopique ε^M , et on part avec une déformation microscopique nulle $\varepsilon^0 = 0$. L'étape d'initialisation se termine par le calcul du champ de contrainte à partir de la formule de Hooke : $\sigma^0(x) = \mathbb{C}(x) : \varepsilon^0$.

Dans la boucle d'itération globale à l'étape $i + 1$, on commence par le calcul du tenseur de polarisation $\tau^i(x)$ à partir des champs de contrainte $\sigma^i(x)$ et de déformation $\varepsilon^i(x)$ à l'itération i . On calcule ensuite la *FFT* de τ . On retrouve le champ de déformation dans l'espace réel à l'aide de *IFFT* qui correspond à l'inverse de *FFT*. L'étape qui suit est le test de convergence qui est basé sur l'équilibre des contraintes dans l'espace de Fourier. L'algorithme s'arrête lorsque la convergence est atteinte. Une itération se termine par l'actualisation du champ des contraintes à partir du champ des déformations.

2.2 Élastoplasticité en petites déformations

Le concept de l'Élastoplasticité est basé sur les notions de déformation plastique, de domaine d'élasticité, de seuil de plasticité , d'écrouissage, de loi d'écoulement plastique, et d'irréversibilité. Ainsi si une déformation est réversible, c'est-à-dire si le matériau retrouve son état initial lorsque l'on retire la force, on parle de comportement **élastique**. Dans le cas où le matériau ne retourne pas à son état initial, la déformation est irréversible et on parle alors de comportement **plastique**.

L'élastoplasticité est un comportement qui dépasse le simple cadre de l'élasticité. Ainsi contrairement au cas du schéma basique où l'on applique les ou le chargement d'un coup, ici les chargements sont appliqués au cours du temps. Afin de pouvoir étudier ce type de comportements, qu'on pourrait appeler **comportements inélastiques**, il conviendra d'introduire le tenseur taux de déformation :

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial t}$$

Dans le cadre des petites déformations on supposera que le taux de déformation est composé d'une partie élastique et d'une partie inélastique :

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}^{el} + \dot{\varepsilon}^{in} \quad (9)$$

Dans notre cas de l'élastoplasticité on suppose que toute la partie inélastique vient de la plasticité , i.e : $\dot{\varepsilon}^{in} = \dot{\varepsilon}^{pl}$ Comme les déformations élastiques suivent la loi de Hooke, on peut alors écrire :

$$\dot{\sigma} = \mathbb{C}^{el} : \dot{\varepsilon}^{el} = \mathbb{C}^{el} : (\dot{\varepsilon} - \dot{\varepsilon}^{pl})$$

Dérivée temporellement le tenseur de Cauchy comme on la fait n'est pas correcte, l'étude des grandes rotations permet de s'en rendre compte. Mais ici, c'est l'équation (9) qui nous intéresse et travailler ainsi rentre dans le cadre des méthodes dites incrémentales.

Étudier l'élastoplasticité revient à pouvoir séparer la partie élastique de la partie plastique. Pour atteindre cet objectif on va introduire des concepts importants comme la surface de charge et une manière de résoudre numériquement l'équation de cette surface de charge.

2.2.1 Surface de charge

La frontière entre le domaine élastique (partie réversible) et le domaine plastique (partie irréversible) est caractérisée par la fonction scalaire f appelée fonction de charge. Le scalaire qui permet de quantifier le niveau de contrainte en un point du matériau sera appelé contrainte effective : $\bar{f} = \bar{f}(\sigma)$. Si cette contrainte effective est inférieure à un certain seuil $\bar{\sigma}$, alors il n'y a pas d'écoulement plastique. On appelle $\bar{\sigma}$ le seuil de plasticité du matériau ou encore sa limite d'élasticité. Il dépend des propriétés du matériau et de l'état actuel du matériau. Tout ceci permet de dire que l'équation de la surface de charge s'écrit :

$$f = f(\sigma, q) = \bar{f}(\sigma) - \bar{\sigma}(q) \leq 0$$

où q désigne le vecteur des variables d'état. (variable interne ici)

Il est vraiment important que cette équation soit vérifiée en tout point du matériau, on a donc trois cas de figures :

- si $f < 0$ on reste dans le domaine élastique
- si $f = 0$ alors il y a écoulement plastique
- $f > 0$ est impossible

2.2.2 Contrainte effective

Il existe plusieurs critères pour quantifier la contrainte effective, dont voici quelques uns :

- Le critère de von Mises :

$$\bar{f}(\sigma, q) = \sqrt{\frac{1}{2}((\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2)} = \sqrt{\frac{3}{2}s : s},$$

avec $(\sigma_i)_{i=1,2,3}$ les valeurs propres de σ , ordonnées de la plus grande à la plus petite et $s = \sigma - \frac{1}{3}tr(\sigma)I$ le tenseur déviateur des contraintes de Cauchy.

- Le critère de Tresca définit

$$\bar{f}(\sigma, q) = \max_{i,j=1,\dots,3} |\sigma_i - \sigma_j|.$$

- Le critère de Hill définit

$$\bar{f}(\sigma, q) = \sqrt{F(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + G(\sigma_{11} - \sigma_{33})^2 + H(\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + 2L\sigma_{12}^2 + 2M\sigma_{13}^2 + 2N\sigma_{23}^2}$$

En fonction du choix des paramètres matériau F, G, H, L, M et N, ce critère permet de modéliser une surface de charge anisotropique, où l'écoulement plastique se produit sous des charges plus faibles dans certaines directions de sollicitations par rapport à d'autres.

Le choix de la définition de la contrainte effective dépend du matériau que l'on étudie et des conditions de chargement. Pour ce stage on choisit le critère de von Mises à titre d'exemple pour le calcul de la contrainte effective.

2.2.3 Seuil de Plasticité

Le seuil de plasticité $\bar{\sigma}(q)$ indique la valeur que la contrainte doit atteindre pour qu'il y ait écoulement plastique. Quand ce seuil est constant on parle d'écoulement plastique parfait :

$$\bar{\sigma}(q) = \sigma_Y$$

où σ_Y est appelé seuil de plasticité du matériau.

Il peut arriver que le seuil de plasticité $\bar{\sigma}(q)$ évolue en raison d'un phénomène mécanique qu'on appelle **écrouissage**.

2.2.4 Écrouissage

On distingue plusieurs types d'écrouissage en fonction de l'évolution de la surface de charge. Ainsi on parlera *d'écrouissage isotrope* lorsque la surface de charge ne fait que s'étirer et *d'écrouissage cinématique* lorsque la surface de charge se déplace.

Les lois d'écrouissage isotrope dépendent en générale de la déformation plastique équivalente $\bar{\varepsilon}^{pl}$ qui est une variable d'état et se calcule à partir du taux de déformation plastique équivalente $\dot{\varepsilon}^{pl}$ par :

$$\bar{\varepsilon}^{pl}(t) = \int_0^t \dot{\varepsilon}^{pl}(\tau) d\tau, \quad \dot{\varepsilon}^{pl} = \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\varepsilon}^{pl} : \dot{\varepsilon}^{pl}}$$

On donne à titre d'exemple quelques lois d'écrouissage isotrope :

- La loi linéaire définit

$$\bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}^{pl}) = \sigma_Y + K\bar{\varepsilon}^{pl}, \quad K \text{ est appelé module d'écrouissage}$$

- La loi puissance ou loi de Ludwik

$$\bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}^{pl}) = \sigma_Y + K(\bar{\varepsilon}^{pl})^n, \quad n \text{ est appelé exposant d'écrouissage}$$

- La loi de Hollomon (aussi appelé loi de Norton)

$$\bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}^{pl}) = K(\bar{\varepsilon}^{pl})^n$$

- La loi de Swift

$$\bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}^{pl}) = K(\varepsilon_0 + \bar{\varepsilon}^{pl})^n, \quad \varepsilon_0 \text{ est un décalage en déformation.}$$

- La loi de Voce

$$\bar{\sigma}(q) = B - (B - A)\exp(-n\bar{\varepsilon}^{pl})$$

Dans ce stage on choisit la loi d'écrouissage linéaire et on négligera l'écrouissage cinématique

2.2.5 Écoulement Plastique

Comme on a pu le faire remarquer lors de la définition de la surface de charge. La variation de la fonction de charge permet de connaître l'état de notre matériau. L'autre information qu'il y a lieu de rechercher, c'est la direction de cet écoulement plastique, et cette information nous est donnée par la relation :

$$\dot{\varepsilon}^{pl} = \lambda^{pl} \frac{\partial g}{\partial \sigma}$$

g est une fonction scalaire à définir et λ^{pl} est le multiplicateur plastique.

Sous l'hypothèse de la plasticité associative , on montre que :

$$\dot{\varepsilon}^{pl} = \lambda^{pl} \frac{\partial g}{\partial \sigma} = \lambda^{pl} \frac{\partial f}{\partial \sigma}$$

ce qui permet de dire que l'écoulement plastique se fait dans la direction normale à la surface de charge, puisque f est l'équation de surface de charge.

2.2.6 Résolution numérique pour la plasticité de von Mises

On montre dans le cas de la plasticité de von Mises que

$$\dot{\bar{\varepsilon}}^{pl} = \dot{\lambda}^{pl}$$

Ce qui permet de dire que dans le cas de la plasticité de von Mises , le multiplicateur plastique est la déformation plastique équivalente, qui est la seule variable d'état ($q = \bar{\varepsilon}^{pl}$).

Notre objectif dans la suite sera de résoudre par une méthode à base de transformée de Fourier rapide l'équation de la surface de charge présentée plus haut. Ainsi on va supposer qu'à l'instant t^n que l'on a déjà calculé q^n, σ^n . Pour trouver leurs valeurs à l'étape suivante on va utiliser le schéma de Euler implicite. On a donc :

$$\dot{\sigma}^{n+1} = \frac{\sigma^{n+1} - \sigma^n}{\Delta t} \implies \sigma^{n+1} = \sigma^n + \Delta t \dot{\sigma}^{n+1}$$

$$\bar{\varepsilon}^{pl,n+1} = \bar{\varepsilon}^{pl,n} + \Delta t \dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1}$$

Le schéma classique pour résoudre ce genre de problème est le schéma **prédicteur-correcteur**. Nous l'appliquons à notre problème dans les lignes qui suivent :

— On commence par définir des variables de test

$$\bar{\varepsilon}^{pl,test} = \bar{\varepsilon}^{pl,n}, \quad \sigma^{test} = \sigma^n + \Delta t C^{el} : \dot{\varepsilon}^{n+1}$$

— On calcule ensuite la contrainte effective et le seuil de plasticité à travers ces équations :

$$s^{test} = \sigma^{test} - \frac{1}{3} \operatorname{tr}(\sigma^{test}) I, \quad \bar{f}^{test} = \sqrt{\frac{3}{2} (s^{test} : s^{test})}$$

$$\bar{\sigma}^{test} = \bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}^{pl,test}) = \sigma_Y + K \bar{\varepsilon}^{pl,test}$$

— À ce niveau, on fait le test sur la surface de charge :

Si $\bar{f}^{test} \leq \bar{\sigma}^{test}$ alors on est dans le cas où l'incrément est purement élastique. C'est un cas d'élasticité simple et on peut établir :

$$\bar{\varepsilon}^{pl,n+1} = \bar{\varepsilon}^{pl,test} \quad \text{et} \quad \sigma^{n+1} = \sigma^{test}$$

et on s'arrête là.

Par contre si $\bar{f}^{test} > \bar{\sigma}^{test}$, ce n'est plus évident car il faut trouver une correction plastique $\dot{\varepsilon}^{pl,n+1}$ telle que l'équation de la surface de charge soit vérifiée, soit au moins :

$$\bar{f}(\sigma^{n+1}) = \bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}^{pl,n+1}) \iff \bar{f}(\sigma^{n+1})^2 = \bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}^{pl,n+1})^2$$

2 ÉTUDE DES COMPORTEMENTS ÉLASTIQUE ET ÉLASTOPLASTIQUE

On a le droit d'élever les deux termes au carré car ils sont positifs. On peut ainsi enlever la racine dans l'expression de la contrainte effective. L'équation est non linéaire et l'inconnue est le tenseur $\dot{\varepsilon}^{pl,n+1}$. On adoptera la simplification suivante :

$$\dot{\varepsilon}^{pl,n+1} = \dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1} r^{test}, \quad \text{où } r^{test} = \frac{3}{2} \frac{s^{test}}{\bar{f}^{test}}.$$

En manipulant les équations qu'on a pu présenter jusqu'à maintenant on arrive à montrer que :

$$\bar{f}(\sigma^{n+1})^2 = (\bar{f}^{test})^2 - 3\Delta\dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1} s^{test} : \check{r}^{test} + \frac{3}{2}(\Delta t)^2 (\dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1})^2 (\check{r}^{test} : \check{r}^{test})$$

où $\check{r}^{trial} = \mathbb{C}^{el} : r^{test}$.

On a aussi que :

$$\bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}^{pl,n+1})^2 = \bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}^{pl,n} + \Delta t \dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1})^2 = (\sigma_Y + K(\bar{\varepsilon}^{pl,n} + \Delta t \dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1}))^2$$

— On termine la partie de la correction plastique en posant :

$$G(\dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1}) = \bar{f}(\sigma^{n+1})^2 - \bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}^{pl,n+1})^2 = 0$$

$$G(\dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1}) = (\bar{f}^{test})^2 - 3\Delta\dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1} s^{test} : \check{r}^{test} + \frac{3}{2}(\Delta t)^2 (\dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1})^2 (\check{r}^{test} : \check{r}^{test}) - (\sigma_Y + K(\bar{\varepsilon}^{pl,n} + \Delta t \dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1}))^2 = 0$$

On peut résoudre l'équation $G(\dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1}) = 0$ en utilisant l'algorithme de Newton. On partira de $\dot{\bar{\varepsilon}}_0^{pl,n+1} = 0$, puis on itère de i à $i+1$ par la formule :

$$\dot{\bar{\varepsilon}}_{i+1}^{pl,n+1} = \dot{\bar{\varepsilon}}_i^{pl,n+1} - \frac{G(\dot{\bar{\varepsilon}}_i^{pl,n+1})}{G'(\dot{\bar{\varepsilon}}_i^{pl,n+1})}$$

On pourra s'arrêter lorsque $G(\dot{\bar{\varepsilon}}_i^{pl,n+1}) \approx 0$, et la solution $\dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1}$ obtenue permettra d'établir les formules suivantes :

$$\bar{\varepsilon}^{pl,n+1} = \bar{\varepsilon}^{pl,n} + \Delta t \dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1}, \quad \text{et} \quad \sigma^{n+1} = \sigma^{test} - \Delta t \dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1} \check{r}^{test}$$

On fait un incrément de temps, où chaque incrément on applique une déformation macroscopique plus importante. À chaque incrément de temps le schéma basique est utilisé pour calculer la contrainte σ dans chaque voxel où le schéma prédicteur-correcteur est utilisé au cas où la contrainte est violée.

On peut résumer les étapes de la résolution d'un problème d'élastoplasticité à travers cet algorithme :

Algorithm 2 Résolution problème élastoplastique

Pour chaque pas de temps t^{n+1} , connaissant σ^n et $\bar{\varepsilon}^{pl,n}$, calculer :

1. $\dot{\varepsilon}^{n+1}$, $\bar{\varepsilon}^{pl,n+1}$, σ^{n+1}
2. $\bar{\varepsilon}^{pl,test}$, σ^{test} , s^{test} , \bar{f}^{test} et $\bar{\sigma}$.
3. faire le test d'écoulement plastique :

Si $\bar{f}^{test} \leq \bar{\sigma}^{test}$

actualiser les variables :

$$\bar{\varepsilon}^{pl,n+1} = \bar{\varepsilon}^{pl,test}$$

$$\sigma^{n+1} = \sigma^{test}$$

Et on passe à l'incrément d'espace suivant.

Sinon :

Faire la correction plastique qu'on a présenté tantôt

Faire l'actualisation des variables :

$$\bar{\varepsilon}^{pl,n+1} = \bar{\varepsilon}^{pl,n} + \Delta t \dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1}$$

$$\sigma^{n+1} = \sigma^{test} - \Delta t \dot{\bar{\varepsilon}}^{pl,n+1} \check{r}^{test}$$

Là on fait le test de convergence.

5. En cas de convergence on passe à l'incrément de temps suivant.

3 Modèles d'ordre réduit (Méthodes de réduction de modèle)

3.1 Généralités

Les méthodes de réduction de modèle sont utilisées en mécanique dans le cadre de la résolution de problème par une méthode numérique. Elles permettent d'optimiser (réduire) le choix des degrés de liberté tout en gardant l'erreur d'approximation assez petite. Elles sont basées sur les données et sont donc liées à la science des données, à l'intelligence artificielle, aux méthodes de compression, aux méthodes d'apprentissage, et aux approches pilotées par les données (data-driven) qui sont très utilisées en ce moment. Elles permettent par ailleurs de réduire considérablement le temps de calcul et l'espace de stockage des variables pour les problèmes qui nécessitent un maillage fin. De nombreuses méthodes de ce type ont été développées au fil des années. On peut citer entre autre, la Décomposition Orthogonale aux valeurs propres ou POD en anglais (Proper Orthogonal Decomposition), la PGD (Proper Generalized Decomposition), l'hyper-réduction, la NTFA (Non Uniform Transformation Field Analysis) etc...

3.2 La POD

La POD a été introduite par Lumley [26] en 1967 pour traiter des problèmes de mécanique des fluides. Elle est beaucoup utilisée et intervient dans des domaines comme la turbulence, la thermique, le traitement d'image etc... La POD permet de fournir de manière optimale et ordonnée des fonctions de bases nécessaires pour obtenir une approximation satisfaisante pour un ensemble de données théoriques, expérimentales ou pour les calculs avec une dimension réduite à travers un sous-espace de faible dimension. Le modèle d'ordre réduit est alors obtenu en tronquant une base optimale au sens énergétique. Cette dernière est calculée à partir d'une sélection de valeurs propres d'une matrice de corrélation qui définit le nombre de réalisation des paramètres d'entrées. Elle est également connue sous le nom de décomposition de Karhunen-Loève , analyse en composantes principales, méthode de décomposition empirique. Elle intervient également dans l'élaboration d'autres méthodes de réduction de modèle. Ainsi, Bergmann et al. l'emploient dans [27] pour mettre en oeuvre des modèles d'ordre réduits avec leur application en turbulence. Michel et Suquet [19] l'ont utilisée pour construire et sélectionner les modes plastiques dans le cadre de la NTFA comme nous le verrons dans la suite. On pourra retrouver plus de détails sur la mise en oeuvre de la POD et d'autres applications dans [10, 34, 1, 27]

3.3 La PGD

La Décomposition Généralisée en Modes Propres (PGD) est une méthode de réduction de modèle non incrémentale où la base de la solution est construite à l'aide d'un schéma itératif. L'idée de la PGD a été initialement introduite dans les années 80 par Ladevèze pour les modèles élastoplastiques. Le principe général de la méthode consiste à chercher la solution du système linéaire définie sur l'ensemble du domaine espace-temps sous la forme de produit de fonctions de chaque variable. Chinesta et al. [8] propose cette décomposition

$$u(x_1, \dots, x_d) = \sum_{i=1}^N X_i^N(x_1 \dots X_i^N(x_d)) = \sum_{i=1}^N \prod_{j=1}^d X_i^j(x_j)$$

pour la solution approchée. Les travaux de Nasri [30] nous permettent de comprendre que cette décomposition offre la possibilité de découpler les variables spatiales et temporelles et les champs de déplacements ne sont calculés que pour un certains nombre de modes. La résolution est réalisée successivement jusqu'à la convergence du champ de déformation plastique du second membre, qui n'est a priori pas connu. On retrouve plus de détails sur la méthode dans [16, 23, 22].

3.4 Hyper-réduction

Un modèle hyper-réduit est un modèle éléments finis pour lequel on constraint les champs inconnus à évoluer dans un espace réduit dont les équations de bilan sont restreintes à un sous-domaine appelé domaine réduit d'intégration (RID). Cette méthode a été proposée en thermique non-linéaire par David Ryckelynck dans [32] puis étendue à la mécanique des matériaux dans [3] et aux études paramétriques en grande dimension dans [4]. Une première étude de l'hyper-réduction de problèmes thermoplastiques a été proposée dans [38] par Yancheng et al., sans tenir compte des sources de chaleur mobiles. L'espace réduit des champs recherché est défini par les bases réduites construites par la méthode de décomposition orthogonale aux valeurs propres (POD) dans [31, 18]. Le RID est construit en tenant compte de la forme des modes empiriques de la base réduite, mais aussi de la forme de l'équation aux dérivées partielles à résoudre. Le domaine réduit est constitué d'éléments attachés à des points d'interpolation de différentes bases réduites. Comme proposé dans [4] ces points sont obtenus par la méthode d'interpolation empirique discrète (DEIM).

3.5 La NTFA

La TFA (Transformation Field Analysis) est une méthode de résolution incrémentale des problèmes de chargement thermomécanique dans les milieux hétérogènes inélastiques et les matériaux composites. Initialement développée pour l'étude des matériaux composites en élastoplasticité dans les travaux de Dvorak [13, 11], elle a été formalisé dans [7, 12] ce qui a fourni le fondement théorique pour l'étude de comportements plus complexes tels que la thermoviscoplasticité et l'endommagement. Dans cette approche, le V.E.R. est décomposé en sous volumes dans lesquels les champs locaux en déformation sont uniformes. Suquet (1997) a montré que les estimations étaient trop rigides, ce qui amena Michel et Suquet [19] à proposer la Non-uniform Transformation Field Analysis (NTFA), avec des déformations locales non-uniformes.

La NTFA a été introduite par Michel et Suquet pour prédire le comportement mécanique des matériaux composites composés de constituants individuels qui pour les plus courants sont les élastoviscoplastiques ou les élastoplastiques. Roussette et al. (2009) ont étudié des comportements élasto-viscoplastiques avec la NTFA. Largenton et al. [24] ont étendu la NTFA aux composites viscoélastiques linéaires dans le cas d'une application aux combustibles MOX. Ba Anh LE a développé la NTFA d'une façon plutôt original dans un cadre élastoplastique parfait [25]. Fritzen et al. proposent une version de la NTFA dans la méthode des éléments finis pour étudier des matériaux à microtopologie tridimensionnelle [9].

La mise en oeuvre de la plupart de ces méthodes de réduction de modèle se fait en deux étapes. Une étape dite préliminaire durant laquelle on va générer des données qui seront utilisées dans la seconde étape. La génération des données est coûteuse en mémoire et pouvoir la faire avant ou séparément contribue grandement à accélérer les calculs. Ainsi dans le cadre de la NTFA comme nous allons le voir dans la suite, nous utiliserons la POD pour construire les modes plastiques nécessaire à reconstruire la déformation plastique ε^{pl}

4 Mise en oeuvre de la NTFA

4.1 Présentation du problème

La NTFA s'intéresse à la résolution de problème de type suivant, pour un champ de déformation inélastique fixé ε^{in} :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\sigma(x)) = 0 \\ \sigma(x) = \mathbb{C}(x) : (\varepsilon(x) - \varepsilon^{in}(x)) \\ <\varepsilon> = \varepsilon^M \end{cases} \quad (10)$$

où ε^M est supposé connu.

La solution ε de ce problème peut être obtenue par application du principe de superposition comme l'ont présenté Moulinec et Suquet dans [19].

- **Cas 1** : On suppose ε^{in} identiquement nul, ainsi le problème (10) se résume donc à un problème d'élasticité linéaire. Dans ce cas la solution s'exprime au moyen du tenseur élastique de localisation de déformation :

$$\varepsilon(x) = \mathbb{A}(x) : \varepsilon^M$$

- **Cas 2** : $\varepsilon^M = 0$, et ε^{in} est arbitraire. Dans ce cas le problème peut se réécrire comme un problème d'élasticité avec contrainte propre :

$$\begin{cases} \sigma(x) = \mathbb{C}(x) : \varepsilon(x) + \tau(x) \\ \operatorname{div}(\sigma(x)) = 0 \\ <\varepsilon> = 0 \end{cases} \quad (11)$$

$$\text{où } \tau(x) = -\mathbb{C}(x) : \varepsilon^{in}$$

On peut voir ici que la contrainte ne respecte pas la forme incrémentale précédente, ce choix est fait dans un souci d'amélioration des méthodes.

Les travaux de Moulinec et Suquet permettent de voir que la solution de (11) s'écrit

$$\varepsilon(x) = -\Gamma * \tau(x)$$

où $*$ désigne le produit de convolution et :

$$\begin{aligned} \Gamma * \tau(x) &:= \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \Gamma(x, y) : \tau(y) dy \\ -\Gamma * \tau(x) &:= \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \Gamma(x, y) : (\mathbb{C} : \varepsilon^{in})(y) dy \end{aligned}$$

Pour finir on obtient par superposition des solutions dans les deux cas :

$$\varepsilon(x) = \mathbb{A}(x) : \varepsilon^M + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} D(x, y) : \varepsilon^{in}(y) dy$$

où l'opérateur non local $D(x, y) = \Gamma(x, y) : \mathbb{C}(y)$ donne la déformation au point x créée par une déformation de transformation $\varepsilon^{in}(y)$ au point y .

Le comportement qu'on souhaite étudier ici est l'elastoplasticité, donc la déformation inélastique est en réalité la déformation plastique $\varepsilon^{in} = \varepsilon^{pl}$.

4.2 Champ de transformation non uniforme

Comme on a pu le dire plus haut, la mise en oeuvre de la NTFA et l'idée de la réduction de variables partent du fait qu'on suppose que la déformation plastique ε^{pl} peut être décomposée en une combinaison de modes non uniformes tels que :

$$\varepsilon^{pl}(x, t) = \sum_{k=1}^K \varepsilon_k^{pl}(x) \alpha_k(t)$$

où les α_k sont appelés **modes plastiques**. Cette décomposition est complétée par plusieurs hypothèses sur le champ de déformation plastique. On a l'incompressibilité $\text{tr}(\varepsilon_k^{pl}(x)) = 0$, $\langle \varepsilon_l^{pl}(x) : \varepsilon_k^{pl}(x) \rangle \geq 0, l \neq k$ et la normalité : $\langle \varepsilon_k^{pl}(x) \rangle_{eq} = (\frac{2}{3}(\varepsilon_k^{pl}(x) : \varepsilon_k^{pl}(x)))^{1/2}$.

En remplaçant cette expression de la déformation plastique dans l'expression de la déformation totale on obtient :

$$\begin{aligned}\varepsilon(x) &= \mathbb{A}(x) : \varepsilon^M + \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} D(x, y) : \left(\sum_{k=1}^K \varepsilon_k^{pl}(y) \alpha_k \right) dy \\ \varepsilon(x) &= \mathbb{A}(x) : \varepsilon^M + \sum_{k=1}^K \left(\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} D(x, y) : \varepsilon_k^{pl}(y) dy \right) \alpha_k \\ \varepsilon(x) &= \mathbb{A}(x) : \varepsilon^M + \sum_{k=1}^K D_k(x) \alpha_k(t) \quad \text{où : } D_k(x) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} D(x, y) : \varepsilon_k^{pl}(y) dy\end{aligned}$$

4.3 Variables macroscopiques

Pour avoir les lois de comportements macroscopiques comme on a pu le dire plus haut, on prend la moyenne $\langle \bullet \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} (\bullet) dx$ de la contrainte sur Ω :

Ainsi, on reprenant l'expression de la déformation totale :

$$\varepsilon(x) = \mathbb{A}(x) : \varepsilon^M + \sum_{k=1}^K D_k(x) \alpha_k(t)$$

La contrainte s'écrit :

$$\begin{aligned}\sigma(x) &= \mathbb{C} : [\mathbb{A}(x) : \varepsilon^M + \sum_{k=1}^M D_k(x) \alpha_k(t) - \sum_{k=1}^M \varepsilon_k^{pl}(x) \alpha_k(t)] \\ \sigma(x) &= \mathbb{C} : \mathbb{A}(x) : \varepsilon^M + \sum_{k=1}^K \mathbb{C} : [D_k(x) - \varepsilon_k^{pl}(x)] \alpha_k(t)\end{aligned}$$

La contrainte macroscopique s'écrit donc :

$$\sigma^M = \langle \sigma \rangle = \langle \mathbb{C} : \mathbb{A}(x) : \varepsilon^M \rangle + \sum_{k=1}^K \langle \mathbb{C} : [D_k(x) - \varepsilon_k^{pl}(x)] \rangle \alpha_k(t)$$

Le choix des modes plastiques est un point clé de la précision de la méthode. Ainsi Michel et Suquet dans [19] ont proposé d'utiliser un procédé de type POD pour sélectionner ces modes plastiques. Cette méthodologie permet de construire des modes orthogonaux et aussi d'en sélectionner le nombre optimal.

4.4 POD pour la sélection des modes plastiques

La POD consiste à construire une matrice de corrélation à partir de données numériques (ou expérimentales) et à en extraire les vecteurs propres et les valeurs propres afin d'obtenir une nouvelle base de vecteurs propres appelés modes.

4.4.1 Bref résumé de la POD

L'idée principale de la POD est de détecter la corrélation entre des ensembles de données, en permettant d'extraire l'information pertinente. L'un des traits remarquables de cette méthode est son optimalité. Elle fournit le moyen de capturer les phénomènes dominants dans un ensemble de variables de grande dimension avec un nombre faible de modes.

On considère un solide défini dans domaine $\Omega \in \mathbb{R}^d$ dont l'évolution est gouvernée par un ensemble de r paramètres $\Gamma = \{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_r\}$ pouvant être associés aux conditions aux limites, aux

propriétés matérielles, etc. Soit q un vecteur à valeurs réelles décrivant la réponse du système et contenant dans notre cas les déformations plastiques ε^{pl} de N points (voxels) du solide discrétilisé. Dans ce cas $q \in \mathbb{R}^{d \times d \times N}$. L'idée principale est de projeter les équations du problème non linéaire sur une base de taille réduite $\phi = \{\phi_1, \dots, \phi_K\}$, $\phi \in \mathbb{R}^K$, avec $K << d \times d \times N$, K étant le nombre de modes qu'on veut. La solution approximée est alors exprimée par $\tilde{q}(\Gamma) = \sum_{k=1}^K \phi_k \xi_k(\Gamma)$ où $\xi_k(\Gamma)$ sont des paramètres arbitraires.

Les ϕ_k et les ξ_k sont supposées minimiser la fonctionnelle :

$$J = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^S \|q(\Gamma_i) - \tilde{q}(\Gamma_i)\|^2$$

sous la contrainte :

$$\langle \phi_i, \phi_j \rangle = \delta_{ij}$$

S est le nombre de champs de déformations plastique ε^{pl} contenus dans la base de données, obtenues pour des chemins de déformations différents, ou des propriétés matériaux différents. Pour construire S , il faut générer des chemins de déformations macroscopiques différents et résoudre le problème mécanique avec la méthode à base de FFT, et à chaque incrément de temps on sort le vecteur q . On obtient à la fin une grande base de données $\{q_1, q_2, \dots, q_S\}$ où S = nombre de chemins de déformations \times nombre de pas de temps. $\|\cdot\|$ est une norme sur un espace de Hilbert.

La résolution du problème d'optimisation sous contrainte précédent conduit au problème aux valeurs propres :

$$Q\phi_i = \lambda_i \phi_i$$

dans cette équation Q est la matrice de covariance définie par :

$$Q = \frac{1}{S} (U - \bar{U})(U - \bar{U})^T, \quad \bar{U} = \frac{1}{S} \sum_i U_i$$

où la matrice U est une matrice $(Ndd \times S)$ dont les colonnes sont constituées des valeurs définis par :

$$U = \{q_1, q_2, \dots, q_S\}, \quad q_i = q(\Gamma_i)$$

On note que Q est définie semi-positive, et ses valeurs propres λ_i sont rangées par ordre décroissant :

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{dN} \geq 0.$$

En pratique, les valeurs propres décroissent rapidement comme nous l'illustrerons par la suite. On définit l'erreur introduite par cette approximation par :

$$e(K) = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^S \|q(\Gamma_i) - \tilde{q}(\Gamma_i)\| = \left(\sum_{i=K+1}^{dN} \lambda_i \right)^{1/2}$$

où K est le nombre de fonctions de bases.

Une base réduite $\phi = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_K\}$ peut être construite en ne retenant qu'un nombre restreint de fonctions de base par le critère

$$\frac{\left(\sum_{i=K+1}^{dN} \lambda_i \right)^{1/2}}{\left(\sum_{i=1}^{dN} \lambda_i \right)^{1/2}} < \delta$$

où δ est un paramètre de tolérance inférieur à 1.

Cette partie de sélection de est reprise dans notre code *generator.py*. Pour cette sélection, on utilise une procédure aléatoire (distribution uniforme, normale, Poisson ou autre). Pour notre cas nous avons choisi une combinaison de déterministe et aléatoire uniforme. La figure ci-dessous, obtenue par le code *generator* permet de voir ce qui est fait dans le cas déterministe où S est maximal.

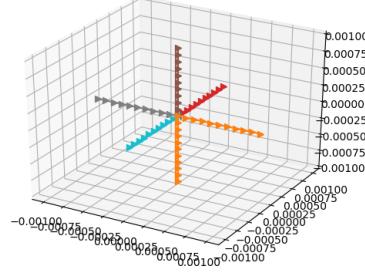


FIGURE 1 – Champs de déformations plastiques dans les directions xx, xy et yz obtenus par une distribution uniforme

4.4.2 Résumé de la POD pour notre problème

Nous présentons ici un algorithme de la POD pour la détermination des modes plastiques α_k :

- 1 . Pour chaque trajet de chargement i
- 2 . Pour chaque pas de temps t^n
Générer un trajet de chargement Γ_i
Résoudre le problème élastoplastique sur le VER pour trouver les déformations plastiques $q (= \varepsilon^{pl}(x))$
Fin pour
Fin pour
3. Construire le vecteur $q^n = \{q_1, q_2, \dots, q_S\}^T$
- 4 . Résoudre le problème : $(U - \bar{U})(U - \bar{U})^T \phi_k = S \lambda_k \phi_k$.
Sélectionner les modes associés aux valeurs propres les plus grandes suivant le critère vu dans 4.4.1

4.5 Équations et opérateurs de la NTFA

À ce stade on suppose les ε_k^{pl} connus. Ainsi avec ces données sur la déformation plastique, notre problème est paramétré par les coefficients α_k qui sont identifiés comme les variables internes.

La dissipation plastique macroscopique est donnée par :

$$\Psi^M(\alpha) = <\sigma(x) : \dot{\varepsilon}^{pl}(x, t)> = <\sigma(x) : \sum_{k=1}^K \varepsilon_k^{pl}(x) \dot{\alpha}_k(t)>$$

Le matériau homogénéisé doit satisfaire le principe de dissipation maximum avec la condition de consistance $f^M \leq 0$. Ainsi pour une déformation macroscopique ε^M donnée, $\alpha = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_K\}$ est solution du problème d'optimisation suivant :

$$\sup_{\alpha, f^M(\alpha) \leq 0} \Psi^M(\alpha)$$

On fera appel à une méthode du type **prédicteur-correcteur** pour la résolution de ce problème.

L'incrément en temps de α s'écrira à l'aide d'une formule de Euler :

$$\dot{\alpha} = \frac{\alpha^{n+1} - \alpha^n}{\Delta t} \implies \alpha^{n+1} = \alpha^n + \Delta t \dot{\alpha}^{n+1}$$

Ceci dit, on suppose qu'à l'instant t^n on connaît les valeurs de α^n et de σ^M .

À l'instant t^{n+1} , on commence avec le calcul de la contrainte macroscopique de test :

$$\sigma^{M,test} = \langle \sigma^n \rangle = \langle \mathbb{C} : \mathbb{A}(x) : \varepsilon^M + \sum_{k=1}^K \mathbb{C} : [D_k(x) - \varepsilon_k^{pl}(x)] \alpha_k^n \rangle$$

$$\sigma^{M,test} = \langle \mathbb{C} : \mathbb{A}(x) : \varepsilon^M \rangle + \sum_{k=1}^K \langle \mathbb{C} : [D_k(x) - \varepsilon_k^{pl}(x)] \rangle \alpha_k^n$$

Après ce calcul on fait le test de plasticité macroscopique :

$$f^M = f^M - \sigma^{M,test} \leq 0$$

On pourra prendre f^M comme le maximum après l'avoir calculé dans tous les voxels :

$$f^M = \text{Sup}_x (f(x, \varepsilon^M, \sigma^M))$$

où f est pris comme dans la partie **2.2.6**

Cependant, cette façon de faire est très lente comme le suggère Ba Anh LE dans sa thèse. Il présente aussi d'autres alternatives pour régler le problème. On pourra donc retrouver plus de détails sur les autres choix dans [25]. Pour notre part, on le calculera une fois à chaque itération et l'option de son optimisation pourra faire l'objet d'études futures.

Ainsi dans le cas où $f^{M,test} \leq 0$, le chargement est purement élastique et l'ensemble des variables internes reste inchangé :

$$\alpha^{n+1} = \alpha^n$$

ce qui nous permet d'actualiser les autres variables et de passer à l'incrément de temps suivant.

Dans le cas où $f^{M,test} > 0$, une correction doit être effectuée pour vérifier :

$$\text{sup}_{\alpha^{n+1}, f^M(\alpha^{n+1})=0} \Psi^M(\alpha^{n+1})$$

On pourra résoudre ce problème par une méthode de multiplicateur de Lagrange. Le problème se réécrit donc, comme un problème de minimisation sous contrainte comme :

$$\text{Min}_{\alpha^{n+1}} - \Psi^M(\alpha^{n+1}) + \lambda^{n+1} f^M(\alpha^{n+1})$$

La fonction à minimiser est une fonction scalaire non linéaire, on a donc opté pour une méthode numérique pour sa résolution. Vu que tout notre code est fait en python, on a fait appel à la fonction **minimize** du module *scipy* de python où on pourra utiliser des méthodes comme **BFGS**, **SLSQP**, **Nelder-Mead**.

En reprenant l'expression de la dissipation macroscopique, on a :

$$\Psi^M(\alpha) = \langle \sigma(x) : \sum_{k=1}^K \varepsilon_k^{pl}(x) \dot{\alpha}_k^{n+1} \rangle$$

$$\Psi^M(\alpha) = \langle (\mathbb{C} : \mathbb{A}(x) : \varepsilon^M + \sum_{k=1}^K \mathbb{C} : [D_k(x) - \varepsilon_k^{pl}(x)] \alpha_k^{n+1}) : \sum_{l=1}^K \varepsilon_l^{pl}(x) \dot{\alpha}_l^{n+1} \rangle$$

Ce qui permet d'écrire :

$$\Psi^M(\alpha) = \sum_{l=1}^K S_l(x) \dot{\alpha}_l^{n+1} + \sum_{l=1}^K \sum_{k=1}^K D_{lk}(x) \alpha_k^{n+1} \dot{\alpha}_l^{n+1}$$

où

$$S_l(x) = \langle \mathbb{C}(x) : \mathbb{A}(x) : \varepsilon^M : \varepsilon_l^{pl} \rangle, \quad l = 1, \dots, K$$

et

$$D_{lk}(x) = \langle \mathbb{C}(x) : [D_k(x) - \varepsilon_k^{pl}] : \varepsilon_l^{pl} \rangle, \quad l, k = 1, \dots, K.$$

La fonction à minimiser pourra donc s'écrire comme :

$$-(\sum_{l=1}^K S_l(x) \alpha_l^{n+1} + \sum_{l=1}^K \sum_{k=1}^K D_{lk}(x) \alpha_l^{n+1} \alpha_k^{n+1}) + \lambda^{n+1} f^M$$

Par ailleurs pour le calcul de \mathbb{A} , on a procédé comme dans [25] :

$$\mathbb{A}_{ijkl}(x) = \varepsilon_{ij}^{(kl)}(x)$$

où $\varepsilon_{ij}^{(kl)}$ est la solution du problème :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \text{div}(\sigma(x)) & = & 0 \\ \sigma(x) & = & \mathbb{C}(x) : (\varepsilon(x) - \varepsilon^{pl}(x)) \\ <\varepsilon(x)> & = & \varepsilon^M \\ \varepsilon^{pl} & = & 0 \\ \varepsilon_{kl}^M & = & \frac{1}{2}(e_k \otimes e_l + e_l \otimes e_k) \end{array} \right. \quad (12)$$

Ainsi en 2D on pourra avoir des déformations macroscopiques qui s'écrivent :

$$\varepsilon_{11}^M = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon_{22}^M = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon_{12}^M = \varepsilon_{21}^M = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}$$

On termine par un résumé de la méthode NTFA par l'algorithme qui suit :

- 1.** On fait l'échantillonnage des chemins de chargement.
- 2.** Résoudre le problème de l'élastoplasticité pour chaque échantillon (chemin de chargement) avec la méthode FFT.
- 3.** Collecter la base de données.
- 4.** Faire la POD sur la base de données.
- 5.** Précalculer les opérateurs indépendants du temps (\mathbb{A} et D_{lk}).
- 6.** Dans la boucle de temps, pour chaque incrément de temps, on calcule σ^M , S_l et f^M . On fait ensuite la correction plastique (s'il y a lieu) avec la minimisation, on actualise les variables et on passe à l'incrément de temps suivant.

Remarque :

Dans le cas du schéma basique avec FFT, la complexité d'une itération est liée au calcul de la FFT et FFT inverse qui est de l'ordre de $O(N \log N)$, et au calcul de la contrainte et de la surface de charge par voxel de l'ordre de $O(N)$.

Dans le cas de la NTFA par contre, la complexité d'une évaluation de la fonction objectif pour la minimisation est liée au calcul de la dissipation plastique qui est en $O(K^2)$, et au calcul de la surface de charge par voxel puis du $\text{Sup}_x f$ qui en $O(N)$ donc vu que $K \ll ddN$, on a $K^2 \ll N \log N$ donc on gagne théoriquement beaucoup en temps en terme de temps de calcul. Bien sûr, la phase de pré-calcul avec les étapes 1 à 5 est coûteuse mais bénéfique si on a beaucoup de calculs à faire par la suite

5 Applications et résultats

Nous testons dans cette partie les codes produits à la suite des différents développements que nous avons présentés. On fait les tests avec un matériau composite formé d'acier et les renforts sont fait de céramique. Ses propriétés sont E_1 pour l'acier et E_2 pour les renforts :

$$\begin{cases} E_1 = 400 \text{ GPa}, & \nu_1 = 0.33 \\ E_2 = 210 \text{ GPa}, & \nu_1 = 0.33 \\ \sigma_Y = 100 \end{cases}$$

On a $\sigma_y = 100$ est le seuil de plasticité initial de l'acier et celui du renfort $\sigma = \infty$ car il est purement élastique. Aussi on a la constante d'écrouissage de l'acier $K = 1000$.

5.1 Élasticité linéaire

La déformation macroscopique est prise comme $\varepsilon_{11}^M = \begin{pmatrix} 0.001 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, qui correspond à une traction dans la direction xx . Le VER est discrétisé en une grille rectangulaire régulière de $N_1 \times N_2$ voxels. La figure 1 montre la solution dans le cadre de l'élasticité linéaire pour 225, 2601 et 50625 voxels.

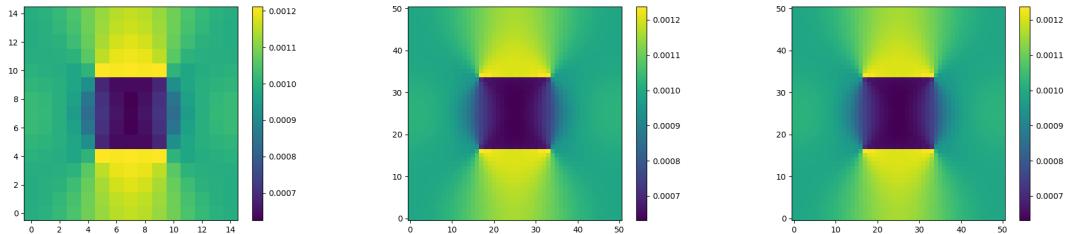


FIGURE 2 – Déformation obtenue par le schéma basique dans la direction xx pour respectivement 15, 51 et 225 points

| | 15×15 voxels | 51×51 voxels | 225×225 voxels |
|----------------------|-----------------------|-----------------------|-------------------------|
| Temps en secondes | 0.64 | 2,24 | 27,05 |
| Nombres d'itérations | 7 | 8 | 9 |

Table 1 - Temps et nombres d'itérations pour différents nombres de voxels

On remarque que l'on a plus de détails sur la solution lorsqu'on augmente le nombre de voxels. En revanche au niveau du temps de calcul on remarque que celui-ci augmente très vite lorsqu'on augmente le nombre de voxels, ce qui justifie le fait que les méthodes à base de FFT sont coûteuses en temps de calcul quand le nombre de variables est important. Aussi, on peut voir que le nombre d'itérations ne varie pas beaucoup lorsqu'on augmente le nombre de voxels. On a pu remarquer aussi que la convergence du schéma basique est fortement liée aux choix des paramètres matériaux de référence (λ_0 et μ_0), ainsi si ceux-ci sont mal choisis la convergence n'est pas assurée. Moulinec et Suquet l'exprime bien dans [15].

5.2 Elastoplasticité

On applique le même chargement que pour l'élasticité linéaire en petite déformation, mais ici on le fait en dix (10) incrément de temps. En prenant une limite d'élasticité très grande on reproduit un comportement élastique, notre code le confirme à travers la figure 2, pour les mêmes nombres de voxels.

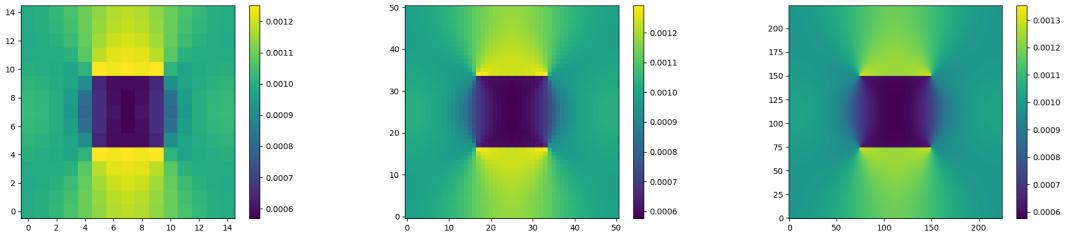


FIGURE 3 – Déformation obtenu dans le cadre de l'élastoplasticité (sans plasticité) dans la direction xx pour respectivement 15, 51 et 225 points

La figure 3 présente la déformation dans la direction xx pour 15, 51 et 225 points dans le cadre de l'élastoplasticité.

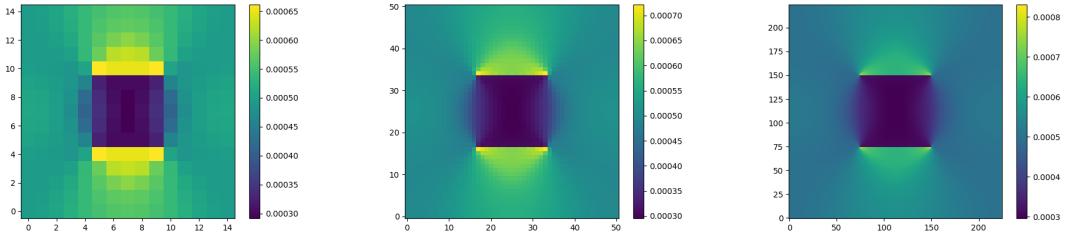


FIGURE 4 – Déformation obtenu dans le cadre de l'élastoplasticité (avec plasticité) dans la direction xx pour respectivement 15, 51 et 225 points

| | 15 × 15 voxels | 51 × 51 voxels | 225 × 225 voxels |
|----------------------|----------------|----------------|------------------|
| Temps en secondes | 1,47 | 14,40 | 290,74 |
| Nombres d'itérations | 7 | 8 | 9 |

| | 15 × 15 voxels | 51 × 51 voxels | 225 × 225 voxels |
|----------------------|----------------|----------------|------------------|
| Temps en secondes | 1,65 | 17,26 | 416,52 |
| Nombres d'itérations | 13 | 23 | 20 |

Table 2 - Temps et nombres d'itérations sans et avec plasticité

Dans ce cas on se rend compte que le nombre de voxels influe grandement sur la solution. Ainsi, avec la même déformation macroscopique de départ, on remarque que lorsque le nombre de voxels atteint 47×47 , notre algorithme devient divergent. Pour avoir convergence il a fallu prendre une déformation macroscopique de départ plus petite. Ceci montre à quel point le type de sollicitation influence la déformation et la déformation plastique.

La **table 2** présente les temps de calcul et le nombre d'itérations pour le schéma de l'élastoplasticité sans et avec la plasticité.

Le premier tableau correspond au cas sans plasticité. Bien que les solutions soient identiques à ceux dans le cas de l'élasticité linéaire, on remarque que les temps de calcul pour l'élastoplasticité sont beaucoup plus long pour 225×225 voxels par exemple. Ces résultats sont normaux car dans le cas de l'élastoplasticité le chargement se fait en plusieurs incrément de temps.

Le second tableau correspond au cas où il y a de la plasticité. Le nombre d'itérations et les temps de calcul sont évidemment plus importants car contrairement au cas de l'élasticité linéaire au on applique le chargement d'un coup, or ici on le fait en 10 incrément de temps.

5.3 NTFA pour l'élastoplasticité

Pour cette partie nous avons développé trois codes. Le premier nous permet à partir d'une déformation plastique donnée (ou même obtenue par le code de la méthode à base de FFT) de

générer les champs de déformation non uniforme en nombre finis. Le second code lui, nous permet de sélectionner par POD les modes les plus pertinents pour notre reconstruction NTFA. Le dernier code, est la programmation de la mise en oeuvre de la NTFA qu'on a présenté à la section 4.5.

La figure 4 nous présente la contrainte (respectivement dans les directions $xx, xy = yxetyy$) obtenue avec le code de la méthode à base de FFT pour la partie élastique et celle obtenue par NTFA toujours pour la partie élastique.

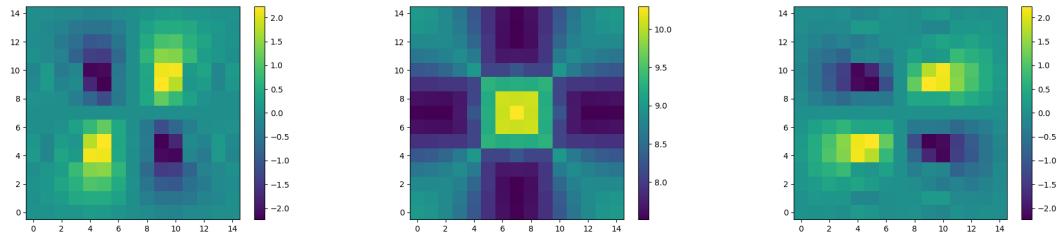


FIGURE 5 – Contrainte obtenue par la méthode à base de FFT

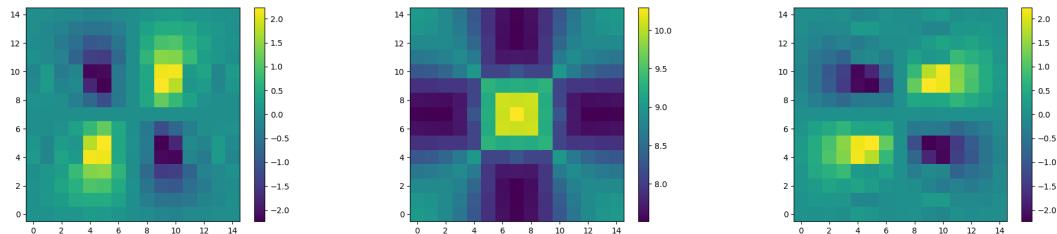


FIGURE 6 – Contrainte obtenue par NTFA

La remarque est que pour la partie élastique la NTFA est extrêmement précise car on obtient exactement la même solution que dans le cas du schéma à base de FFT et ceci permet de valider notre formule de A. Au niveau du temps de calcul on a pu remarquer que la NTFA était plus rapide déjà pour 15 points, on a pas pu faire le test pour plus de points car on a rencontré des difficultés, qu'on va présenter plus tard, dans la méthode NTFA.

La figure 6 présente les solutions obtenues respectivement avec 6 et 19 modes dans le cadre de la NTFA. On considère qu'il existe de plasticité et la solution que nous présentons est celle obtenue après les 10 incrément de temps.

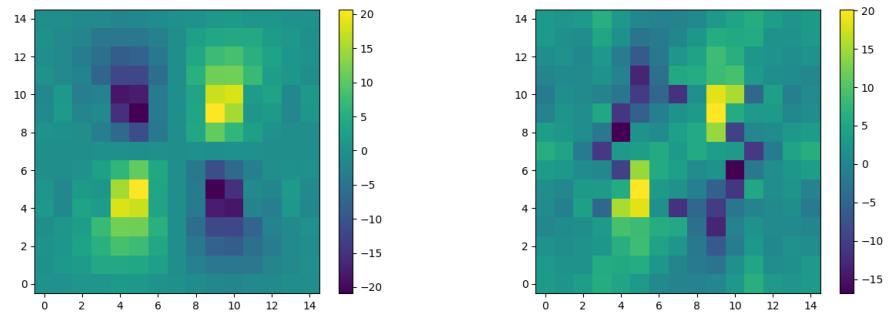


FIGURE 7 – Déformation dans la direction xx pour 6 et 19 modes

Cette comparaison permet de comprendre que le nombre de modes est très important car

lorsqu'on en a trop, on a une mauvaise solution. On a fait le test avec plusieurs modes et 6 semblait celui fourni des meilleurs résultats. Ceci nous permet de justifier le fait que le choix des modes plastiques est fondamental dans la construction de la méthode NTFA.

La Figure 7 présente l'évolution de la moyenne de la déformation plastique équivalente au cours du temps pour la méthode à base de FFT et pour la NTFA.

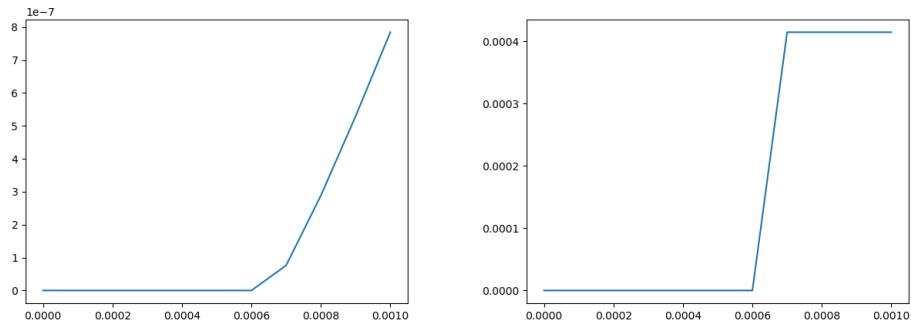


FIGURE 8 – Déformation plastique équivalente moyennée au cour du temps

On remarque que dans les deux cas la déformation plastique apparaît à 6.10^{-4} s, par contre ses valeurs sont différentes. À ce niveau on a rencontré beaucoup de difficultés. En effet, on se rend compte qu'à partir de cet instant les solutions (déformation ou contrainte) obtenues par les codes de la méthode à base de FFT et la NTFA nous fournissent différents résultats. On a mené plusieurs investigations pour essayer de trouver la ou les sources d'erreurs. On remarque par exemple qu'avec la méthode **BFGS**, quand la contrainte est violée on arrive pas à faire la minimisation pour faire la correction plastique. Par contre avec les méthodes **SLSQP** et **Nelder-Mead** la minimisation se passe très bien, on a une dissipation positive et une valeur de f^M qui est très proche de 0. Cette situation est correcte d'un point de vue physique, mais toujours est-il que les solutions obtenues, restent différentes dans les deux codes.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Dans ce mémoire nous avons présenté la méthode Non Uniform Transformation field Analysis (NTFA), qui est une méthode de réduction de modèle dans le cadre de l'homogénéisation des matériaux. Nos travaux sont basés sur la thèse de Ba Anh LE qui est une extension au cas élastoplastique de la NTFA original de Michel et Suquet [19]. On a commencé par présenter le schéma basique de Moulinec et Suquet pour résoudre les problèmes de loi de comportement, avant d'arriver à la NTFA qui était l'objet de ce stage. On a donc pu présenter un nouveau schéma qui utilise une méthode de type prédition-correction pour actualiser les variables internes. Ce schéma est basé sur le principe de dissipation maximale pour l'échelle macroscopique. Notre schéma utilise la POD, comme dans la méthode originale, pour la sélection des modes plastiques, et on a pu se rendre compte que cette étape était cruciale dans l'élaboration de la NTFA. Une différence entre notre schéma à nous et celui de Ba Anh LE est qu'au moment de faire la correction plastique nous avons utilisé la méthode de multiplicateurs de Lagrange qu'on résoud à l'aide du module **scipy** de python. Au niveau du choix de f^M , on utilisé le maximum dans chaque voxels. On s'est retrouvé au final avec un code qui ne marche pas très bien, car les solutions sont les mêmes pour seulement la partie élastique. La raison de cette erreur pourrait venir de notre choix pour l'optimisation ou du calcul de f^M , ou même d'ailleurs. Nous n'avons toujours pas trouvé la cause de cette situation.

Aussi comme le sujet de notre stage l'indique, l'objectif far de ce stage était de pourvoir construire une méthode d'homogénéisation pour un matériau élastoplastique afin de pouvoir prédire son endommagement en fonction de différentes sollicitations. Nos développements nous ont montré que cet objectif était un peu ambitieux, et pourrait constituer le sujet d'une thèse à l'avenir.

Références

- [1] Michel BERGMANN. *Contribution à la simulation numérique en mécanique des fluides et à la réduction de modèle*. PhD thesis, Université de Bordeaux, 2014.
- [2] Néron D., Boucard P.-A, and Relun N. Time-space pgd for the rapid solution of 3d nonlinear parametrized problems in the many-query context. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, pages 275–292, 2015.
- [3] Ryckelynck D., Vincent F., and Cantournet S. Multidimensional a priori hyper-reduction of mechanical models involving internal variables. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pages 28–43, 2012.
- [4] Ryckelynck D., Lampoh Komlanvi, and Quilicly S. Hyper-reduced predictions for life time assessment of elasto-plastic structures. *Meccanica*, pages 309–317, 2016.
- [5] Eyre D. J. and Milton G. W. A fast numerical scheme for computing the response of composite using grid refinement, 6. *European Physical Journal - Applied Physics*, pages 41–47, 1999.
- [6] Komlan Sénam DJAKA. *Développement et application d'une technique de modélisation micromécanique de type "FFT" couplée à la mécanique des champs de dislocations*. PhD thesis, Université de Lorraine, 2016.
- [7] G. J. Dvorak. Transformation field analysis of inelastic composite-materials. *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical Physical an Engineering Sciences*, 437(1900), pages 311–327, 1992.
- [8] Chinesta F., Leygue A., Bordeu F., Aguado J.V., Cueto E., Gonzalez D., Alfaro I., Ammar A., and Huerta A. Pgd-based computational vademecum for efficient design, optimization and control. *Arch Comp Methods Eng*, 2013.
- [9] Fritzen F. and Boehlke T. Three-dimensional finite element implementation of the nonuniform transformation field analysis, 84(7). *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, pages 803–829, 2010.
- [10] Berkooz G., Holmes P., and Lumley J.L. The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, pages 539–575, 1993.
- [11] Dvorak G. J. and Rao M. S. M. Axisymmetric plasticity theory of fibrous composites. *International Journal of Engeneering*, 49(11), pages 361–373, 1976.
- [12] Dvorak G. J. and Benveniste Y. On transformation strains and uniform-fields in multiphase elastic media. *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical Physical an Engineering Sciences*, 437(1900), pages 291–310, 1992.
- [13] Dvorak G. J. and Baheieldin Y. A. A bimodal plasticity theory of fibrous composite-materials. *Acta Mechanica*, 69(1-4), pages 219–241, 1987.
- [14] Moulinec H. and Silva F. Comparison of three accelerated fft-based schemes for computing the mechanical responses of composite materials. *Interational Journal of Numerical Methods Engeneering*, pages 960–985, 2014.
- [15] Moulinec H. and Suquet P. **A numerical method computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure**. *Comput Methods Appl Mech. Engrg.*, pages 69–94, 1998.
- [16] Christophe Heyberger. *PGD espace-temps adaptée pour le traitement de problèmes paramétrés*. PhD thesis, Ecole normale Normale Supérieure de Cachan, 2014.
- [17] R. Hill. Elastic properties of reinforced solids : Some theoretical principles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11, 5 (1963), pages 357–372, 1963.
- [18] Lumley J. and Podvin B. Dynamical systems theory and extra rates of strain in turbulent flows. *Experimental thermal and fluid science*, 13(3), pages 180–189, 1996.
- [19] Michel J. and Suquet P. **Non Uniform transformation field analysis**. *International Journal of Solids and Structures*, pages 6937–6955, 2003.
- [20] Michel J. C., Moulinec H., and Suquet P. **A computational scheme for linear and non linear composites with arbitrary phase contrast**. *Interational Journal of Numerical Methods Engeneering*, 76, pages 139–160, 2001.

- [21] Michel J.C., Moulinec H., and Suquet P. **Effective properties of composite matériaux with perioicidc microstructure : a computationnel approach.** *Comput Methods Appl Mech. Engrg.*, pages 109–143, 172(1999).
- [22] P. Ladevèze. Sur une famille d’algorithmes en mécanique des structures. In *Compte Rendus Acad. Sc. Paris, t.300 série II : p41-44*, 1985.
- [23] P. Ladevèze. Nonlinear computational structural mechanics - new approches and non-incremental methods of calculation. *Springer Verlag*, 1999.
- [24] R. Largenton, J.C Michel, and P. Suquet. Extension of the nonuniform transformation field analysis to linear viscoelastic composites in the presence of aging and swelling. *Mechanics of Materials*, pages 73,76–100, 2014.
- [25] Ba Anh LE. *Contributions en homogénéisation numérique pour les composites non linéaires élastiques et élastoplastiques.* PhD thesis, Université de Paris-Est-Marne-la-Vallée, 2014.
- [26] J. Lumley. The structure of inhomogenous turbulent flows. atmospheric turbulence and radio wave propagation. *vol. In A.M Yaglom V.I Tararsky*, pages 166–178, 1967.
- [27] Bergmann M., Bruneau C-H., and Iollo A. **Enablers for robust POD models.** *Computational Physics*, pages 516–538, 2009.
- [28] Kabel M., Böklke T., and Schneider M. Efficient fixed point and newton-krylov solvers for fft-based homogenization of elasticity at large deformations. *Comput Mech*, 54 :, pages 1497–1514, 2014.
- [29] W. Müller. Mathematical vs. experimental stress analysis of inhomogeneities in solids. *Journal of Physics IV*, 6(C1), pages 139–148, 1996.
- [30] Mohamed Aziz Nasri. *Réduction dimensionnelle pour la simulation de la fatigue des métaux.* PhD thesis, École Nationale Supérieure d’Arts et Métiers, 2017.
- [31] Everson R. and Sirovich L. Karhunen–loeve procedure for gappy data. *JOSA A*, 12(8), pages 1657–1664, 1995.
- [32] David Ryckelunck. A priori hyperreduction method : an adaptative approach. *Journal of computational Physics*, pages 346–366, 2005.
- [33] Roussette S., Michel J-C., and Suquet P. **Nonuniform transformation field analysis of elastic-viscoplastic composites.** *Composites Sciences and Technology*, 69(1), pages 22–27, 2009.
- [34] L. Sirovich. Turbulence and the dynamics of coherent structures. *Quaterly of Applied Mathematics*, pages 561–590, 1987.
- [35] S. Hendili T. Dinh-Trong, D. Ryckelynck and M. Abbas. Modèle hyper-réduit directionnel pour la prévision simplifiée des contraintes résiduelles de soudage. In *13e Colloque national en calcul des structures, Université Paris-Saclay*, May 2017.
- [36] Monchiet V. and Bonnet G. Numerical homogenization of non linear composites with a polarization based fft iterative scheme. *Comp. Mater. Sci.*, pages 276–283, 2013.
- [37] Vinogradov V. and Milton G. W. An accelerated fft algorithm for thermo-elastic and non linear composites. *Interational Journal of Numerical Engeneering*, 76, pages 1678–1695, 2008.
- [38] Zhang Y., Combescure A., and Gravouil A. Efficient hyper reduced-order model (hrom) for parametric studies of the 3d thermo-elasto-plastic calculation. *Finite Elements in Analysis and Design*, pages 37–51, 102–103, 2015.