

Modèle de coalescence multi-fidélité par cokrigage entre simulations sur microstructures aléatoires et cellules unitaires

Clément Cadet^{1,2,*}, Jacques Besson², Sylvain Flouriot¹, Samuel Forest², Pierre Kerfriden², Laurent Lacourt², Victor de Rancourt¹

¹ CEA Valduc, 21120 Is-sur-Tille, France

² Mines Paris, PSL University, CNRS, Centre des matériaux BP 87, 91003 Evry, France

Résumé — La déformation de microstructures constituées d'une matrice élastoplastique contenant une population aléatoire de pores sont simulées jusqu'à rupture, identifiée par le critère de localisation de Rice. Une forte dépendance de la déformation à rupture en fonction de l'orientation du chargement est observée à cause de l'anisotropie des cellules cubiques de simulations. Afin de réduire le coût computationnel des simulations, un modèle de déformation à rupture est identifié en couplant par cokrigage des simulations sur microstructures aléatoires et sur cellules unitaires (pore unique).

Mots clés — rupture ductile, localisation, processus gaussiens.

1 Introduction

La prévision efficace de la résistance de pièces métalliques à un chargement monotone nécessite une bonne compréhension et une bonne modélisation des mécanismes de la rupture ductile. Dans la lignée des travaux de Gurson, des modèles analytiques ont été proposés par analyse limite, ce qui nécessite de supposer la forme des champs de déformations. Ces modèles analytiques sont généralement vérifiés par comparaison avec des simulations par éléments finis sur des cellules unitaires : des chargements variés sont appliqués sur un parallélépipède élastoplastique comportant un pore central jusqu'à rupture de ce volume élémentaire. Au delà de la vérification des modèles analytiques, ces analyses sur cellules élémentaires peuvent également servir pour proposer de nouveaux modèles, identifiés à partir de la réponse de ces cellules à une variété de chargements. Cependant, à porosité élevée, les cellules unitaires représentent incorrectement l'interaction entre pores. Des analyses sur microstructures comportant un réseau aléatoire de pores peuvent mieux représenter cette interaction [3, 1]. L'objectif du travail présenté est donc de continuer les travaux de [1] sur microstructures aléatoires afin d'obtenir un modèle de rupture ductile (en particulier de coalescence) identifié à partir de simulations sur cellules aléatoires.

Des microstructures aléatoires sont donc générées et simulées jusqu'à leur rupture. Cette rupture est déterminée par le critère de localisation de Rice, calculé à l'échelle du volume simulé. Afin de représenter le comportement du matériau, il est nécessaire de considérer une grande variété de chargements. De plus, les cellules de simulation sont anisotropes en raison des conditions aux limites périodiques sur le cube ; il faut donc également tenir compte de l'orientation du chargement, l'orientation la plus faible, conduisant à la rupture la plus précoce devant être privilégiée. La détermination du modèle nécessite donc de nombreuses simulations sur cellules aléatoires, pour un coût computationnel élevé. Au contraire, les simulations sur cellules unitaires sont considérablement plus rapides. Une méthodologie est développée pour coupler les résultats des cellules unitaires et des microstructures aléatoires afin d'obtenir le modèle de coalescence à un coût en simulation maîtrisé.

2 Méthodologie des simulations sur microstructures aléatoires

Suivant la méthode de [3] et [1] sont générées des microstructures aléatoires constituées d'une matrice cubique élastique parfaitement plastique contenant une population aléatoire de pores sphériques identiques pour une porosité totale fixée de 6%. Un exemple de microstructure ainsi que d'une cellule unitaire, utilisée pour comparaison, est proposé en figure 1 (cellules déjà utilisées par [1]).

Les simulations sont effectuées par le logiciel d'éléments finis Zset [10]. Des conditions aux limites périodiques sont appliquées et une formulation en grandes déformations est utilisée. L'intégration en chaque point de quadrature est réalisée par une méthode d'Euler implicite, puis l'équilibre statique global est résolu par un schéma de Newton-Raphson avec une matrice tangente cohérente.

Le chargement est appliqué par une extension de la méthode de [5], qui garantit que le tenseur moyen des contraintes de Cauchy évolue proportionnellement et garde la forme suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \sigma_{II} \begin{bmatrix} 1 & \eta_{12} & \eta_{13} \\ \eta_{12} & \eta_{22} & \eta_{23} \\ \eta_{13} & \eta_{23} & \eta_{33} \end{bmatrix} = Q \begin{bmatrix} \sigma_I & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{II} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{III} \end{bmatrix} Q^T \quad (1)$$

Les η_{ij} sont des constantes, Q est une matrice de rotation (constante) et les contraintes principales vérifient $\sigma_I \geq \sigma_{II} \geq \sigma_{III}$. La diagonalisation de ce tenseur montre que le chargement peut être caractérisé par son orientation (définie par Q) et par les rapports entre contraintes principales, exprimés notamment au moyen de la triaxialité des contraintes T et du paramètre de Lode L :

$$T = \frac{\text{tr}\underline{\underline{\sigma}}}{3\sigma_{vm}} \quad L = \frac{2\sigma_{II} - \sigma_I - \sigma_{III}}{\sigma_I - \sigma_{III}} \quad (2)$$

où σ_{vm} est la contrainte équivalente de von Mises.

Dans cette convention, L vaut -1 (resp. 0 ; 1) en traction simple (resp. en cisaillement ; en traction équibiaxiale). Le comportement en rupture de la microstructure ne dépend pas uniquement des paramètres invariants T , L , mais également de l'orientation Q du chargement. La cellule de simulation est en effet anisotrope, des conditions aux limites périodiques sur la cellule cubique, qui crée une situation équivalente à un réseau périodique cubique de pores.

Lors de la simulation, la détection de la ruine de la cellule est réalisée au moyen du critère de localisation de Rice [7], étudié au niveau de la cellule. Une localisation (correspondant à la formation d'une bande de localisation de la déformation) est détectée lorsqu'il existe une direction n telle que :

$$\det(n_k \mathcal{L}_{ikjl} n_l) = 0 \quad (3)$$

où \mathcal{L} est l'opérateur tangent macroscopique reliant la déformation moyenne et le tenseur moyen des contraintes de Boussinesq de la cellule. Suivant une méthode de condensation [8, 9], cet opérateur tangent est calculé à partir de la matrice de rigidité du problème d'éléments finis.

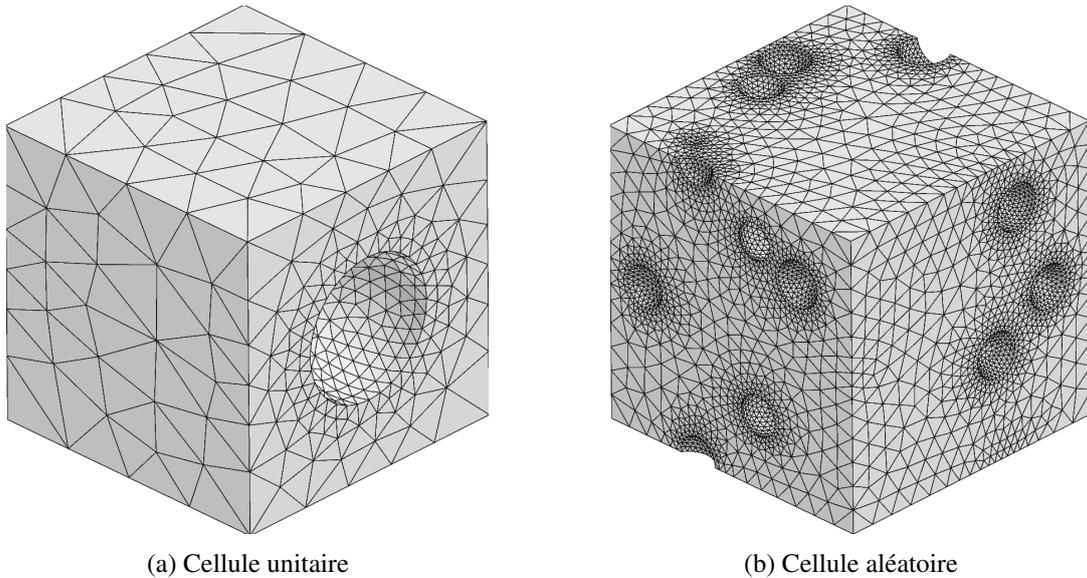


FIGURE 1 – Exemples de maillages de cellules avec une population de pores

3 Effets de l'orientation du chargement sur la rupture

Avec la méthodologie précédente, il est possible d'étudier la localisation des cellules unitaires pour des chargements et des orientations variés. Un exemple de bandes de localisation dans une microstructure aléatoire est présenté en figure 2. La figure 3 représente les déformations à localisation à $T = 1$ pour différentes valeurs de L et pour 10 différentes orientations. Une cellule unitaire et une cellule aléatoire sont considérées. Pour les deux cellules, la localisation est plus précoce pour $|L| \simeq 0$. Pour des paramètres identiques T, L , les différences d'orientation du chargement sont responsables d'une dispersion importante des déformations à localisation. Cette forte dispersion est rendue possible par l'activation de modes de rupture différents selon l'orientation.

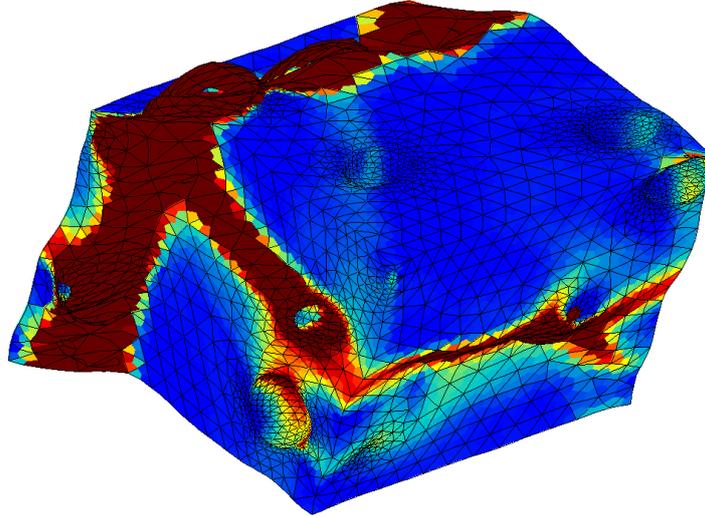


FIGURE 2 – Exemple de champ de puissance plastique lors de la localisation dans une cellule aléatoire (chargement $T = 1, L = -1$)

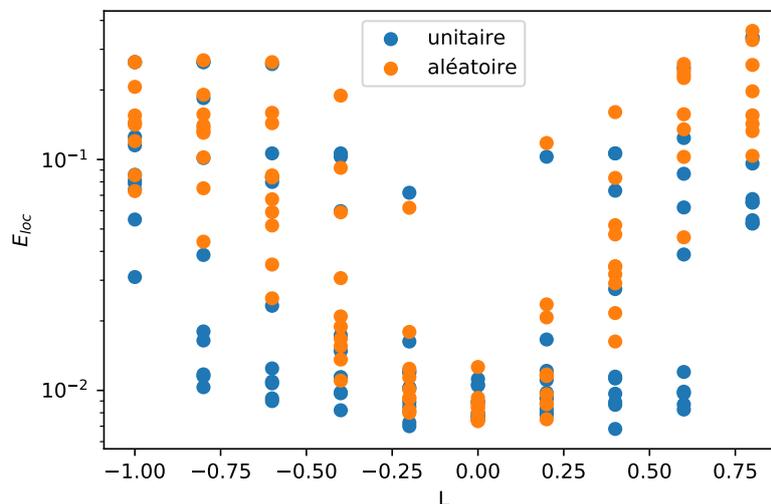


FIGURE 3 – Déformations à localisation en fonction de L ($T = 1$ fixé pour 10 orientations différentes, pour une cellule aléatoire et une cellule unitaire)

Pour la recherche d'un modèle de rupture ductile ou de coalescence, seule la direction permettant la rupture la plus précoce, correspondant à une direction faible de la cellule de simulation, doit être considérée. La restriction à une orientation de chargement particulière est susceptible de surestimer fortement la déformation à rupture.

4 Vers un modèle multi-fidélité de déformation à rupture

Pour construire un modèle de coalescence à partir des simulations sur cellules aléatoires, il est nécessaire de considérer suffisamment de conditions de chargement. Le matériau contenant un réseau aléatoire de pores est a priori isotrope, donc le comportement de rupture dépend principalement des paramètres invariants T, L . Néanmoins, en raison de l'anisotropie des cellules poreuses avec des conditions aux limites périodiques, l'effet de l'orientation Q doit être également considéré. Le modèle isotrope de déformation à localisation pour les cellules aléatoires s'obtient donc sous la forme :

$$E_a^m(T, L) = \min_{Q \in SO_3} E_a(T, L, Q) \quad (4)$$

La construction du modèle nécessite donc d'effectuer un grand nombre de simulations sur cellules aléatoires (donc coûteuses d'un point de vue numérique) afin de considérer suffisamment de jeux de paramètres (T, L, Q) (avec Q de dimension 3).

Cependant, comme l'indiquait la figure 3, les déformations minimales à L fixé pour la cellule unitaire et la cellule aléatoire sont corrélées (mais pas nécessairement les déformations à T, L, Q fixés). Il est donc possible d'utiliser les résultats sur cellules unitaires (moins coûteux en temps de calcul, en raison du plus faible nombre de degrés de liberté de la cellule) pour construire le modèle sur cellules aléatoires. La méthodologie de cokrigage (ou régression de processus gaussiens à plusieurs sorties [2]) permet de combiner les résultats sur les deux types de cellules. Un grand nombre de simulations sur cellule unitaire permet d'obtenir une prévision du modèle pour les cellules aléatoires, qui sera affinée avec un nombre plus réduit de cellules aléatoires.

La déformation minimale E_u^m pour les cellules unitaires est définie par analogie avec l'équation 4. Le modèle de dépendance linéaire entre résultats sur cellules unitaire et aléatoire est défini par (selon la méthode de [2]) :

$$\begin{bmatrix} E_u^m \\ E_a^m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ 0 & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_1 \\ G_2 \end{bmatrix} \quad (5)$$

G_1 et G_2 sont deux processus gaussiens indépendants de même fonction de covariance :

$$\text{Cov}((G_i(T, L), G_i(T', L'))) = \exp\left(-\frac{(T - T')^2 + (L - L')^2}{2l^2}\right) \quad \text{pour } i \in \{1, 2\} \quad (6)$$

avec l une distance de corrélation. Les processus gaussiens tiennent également compte d'un bruit blanc d'amplitude ζ . Les paramètres $l, \zeta, \alpha_{11}, \alpha_{12}, \alpha_{22}$ doivent être identifiés, par exemple par maximum de vraisemblance [6]).

En raison de la minimisation de l'équation 4, les simulations sur cellules ne permettent pas d'observer directement E_u^m ou E_a^m . Cependant à partir des résultats de simulations sur cellules aléatoires, il est possible de construire un modèle $E_a^*(T, L, Q)$ par krigeage simple en cinq dimensions, et d'obtenir une approximation E_a^{m*} de E_a^m par minimisation de E_a^* . La même procédure peut être effectuée indépendamment pour la cellule unitaire. En raison du faible nombre d'observations pour la cellule aléatoire, E_a^{m*} sera associé à une forte variance, contrairement à E_u^{m*} . Le couplage entre E_a^{m*} et E_u^{m*} décrit par l'équation 5 permet donc de diminuer la variance et donc d'augmenter la confiance en les prévisions pour les cellules aléatoires.

Cette méthodologie de cokrigage permet également de déterminer un plan de simulations pour enrichir efficacement le modèle déjà développé sur une première série d'expériences. Les nouvelles simulations peuvent être réalisées aux points T, L où l'incertitude du modèle (indiqué par l'écart-type du processus gaussien) est la plus grande. Puis, à T, L fixé, l'orientation peut être choisie de façon à maximiser l'espérance d'amélioration du minimum proposé par le krigeage simple à cinq dimensions. [4].

5 Conclusion

La réponse de volumes contenant une répartition aléatoire de défauts à des chargements de nature et d'orientation variées a été simulée jusqu'à la rupture des cellules. Cette rupture est identifiée par application du critère de Rice à l'échelle de la cellule, ce qui nécessite le calcul de l'opérateur tangent

macroscopique par condensation. Les résultats de ces simulations montrent une forte dépendance de la ductilité à l'orientation du chargement, particulièrement pour la cellule unitaire. Ces simulations aléatoires peuvent être utilisées pour identifier un modèle de rupture. Afin de limiter le coût des simulations, une méthodologie de cokrigeage a été développée afin de coupler les résultats sur cellules aléatoire et unitaire. Une particularité de cette méthodologie est de ne pas traiter directement les résultats de simulations mais de s'appuyer sur des krigeages intermédiaires permettant d'identifier les orientations dans lesquelles les cellules sont les moins ductiles. Cette méthodologie de cokrigeage permet également de définir des plans de simulations optimaux pour enrichir le modèle identifié.

Références

- [1] Cadet, C., Besson, J., Flouriou, S., Forest, S., Kerfriden, P., & de Rancourt, V. (2021). Ductile fracture of materials with randomly distributed voids. *International Journal of Fracture*, 230, 193-223. <https://doi.org/10.1007/s10704-021-00562-7>
- [2] Fricker, T. E., Oakley, J. E., & Urban, N. M. (2013). Multivariate Gaussian Process Emulators With Nonseparable Covariance Structures. *Technometrics*, 55(1), 47-56. <https://doi.org/10.1080/00401706.2012.715835>
- [3] Fritzen, F., Forest, S., Böhlke, T., Kondo, D., & Kanit, T. (2012). Computational homogenization of elasto-plastic porous metals. *International Journal of Plasticity*, 29, 102-119. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2011.08.005>
- [4] Jones, D. R. (2001). A Taxonomy of Global Optimization Methods Based on Response Surfaces. *Journal of Global Optimization*, 21(4), 345-383. <https://doi.org/10.1023/A:1012771025575>
- [5] Ling, C., Besson, J., Forest, S., Tanguy, B., Latourte, F., & Bosso, E. (2016). An elastoviscoplastic model for porous single crystals at finite strains and its assessment based on unit cell simulations. *International Journal of Plasticity*, 84, 58-87. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2016.05.001>
- [6] Rasmussen, C. E., & Williams, C. K. I. (2006). *Gaussian Processes for Machine Learning*. MIT Press.
- [7] Rice, J. R. (1976). The localization of deformation. In W. T. Koiter (Éd.), *Theoretical and Applied Mechanics, Proceedings of the 14th IUTAM congress, Delft* (p. 207-220). North-Holland Publishing Company.
- [8] Zhu, J. C., Ben Bettaieb, M., & Abed-Meraim, F. (2020). Investigation of the competition between void coalescence and macroscopic strain localization using the periodic homogenization multiscale scheme. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 143, 104042. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2020.104042>
- [9] Zhu, J. C., Bettaieb, M. B., & Abed-Meraim, F. (2020). Comparative study of three techniques for the computation of the macroscopic tangent moduli by periodic homogenization scheme. *Engineering with Computers*. <https://doi.org/10.1007/s00366-020-01091-y>
- [10] www.zset-software.com. (2020). Mines ParisTech, ONERA. www.zset-software.com