

# Stratégie adaptative de calcul multiéchelle piloté par les données

A. Platzer<sup>1,2</sup>, A. Leygue<sup>2</sup>, L. Stainier<sup>2</sup>

<sup>1</sup> LaMCoS, INSA de Lyon, [auriane.platzer@insa-lyon.fr](mailto:auriane.platzer@insa-lyon.fr)

<sup>2</sup> GeM, Centrale Nantes, [{adrien.leygue,laurent.stainier}@ec-nantes.fr](mailto:{adrien.leygue,laurent.stainier}@ec-nantes.fr)

**Résumé** — L'approche *data-driven* permet de réaliser des calculs de structures sans modèle de comportement, directement à partir de base de données matériau, constituées de couple déformation-contrainte [3]. Nous proposons ici de l'appliquer à la simulation multiéchelle de type FE<sup>2</sup> [2] pour les structures à matériaux hétérogènes. La base de données est générée et enrichie à la volée, par des calculs microstructuraux bien choisis. Au travers d'un exemple en 2D, nous démontrons que le nombre d'évaluations du comportement de la microstructure est ainsi fortement réduit par rapport à la méthode FE<sup>2</sup> standard.

**Mots clés** — *data-driven*, calcul multiéchelle FE<sup>2</sup>, homogénéisation numérique.

## 1 Introduction

Kirchdoerfer et Ortiz [3] ont récemment proposé un « nouveau paradigme », appelé *data-driven computational mechanics* (DDCM), qui permet de se passer de la « modélisation empirique du comportement du matériau ». À la place d'une relation mathématique, la réponse mécanique du matériau est représentée par une base de données de couples tensoriels déformation-contrainte. L'approche repose sur une séparation des équations de la mécanique en deux groupes : la caractérisation de la réponse matériau d'une part, et la satisfaction de principes physiques fondamentaux d'autre part. Tandis que le modèle de comportement ne fait qu'*approcher* la réponse du matériau dans certaines conditions, les équations fondamentales de la mécanique (équilibre et compatibilité) doivent toujours être satisfaites. Le problème mécanique est reformulé en ce sens comme un problème de minimisation de la distance entre deux types de champs d'état déformation-contrainte : l'*état matériau* représente la réponse matériau du corps déformable et prend ses valeurs dans la base de données, l'*état mécanique* vérifie les équations d'équilibre et de compatibilité. Le solveur *data-driven* consiste alors à assigner à chaque point matériel du corps un état déformation-contrainte qui (i) vérifie les contraintes de compatibilité et d'équilibre du problème dans l'espace physique, et (ii) est le plus proche possible, dans l'espace déformation-contrainte, d'une base de données matériau préétablie.

Cette approche est particulièrement adaptée aux problèmes multiéchelles pour lesquels il n'existe pas, en général, de relation de comportement explicite permettant de représenter le comportement effectif d'un matériau hétérogène. De plus, la base de données peut dans ce cas être facilement générée par un certain nombre de calculs éléments finis (EF) à l'échelle microstructurale. En effet, considérons un matériau multiphasé, c.-à-d. qui contient des hétérogénéités de petites tailles, incorporées dans une matrice. La taille de ces hétérogénéités est supposées beaucoup plus petite que la taille de la structure composée du matériau hétérogène considéré (séparation des échelles). Le comportement effectif de ce type de matériau peut être obtenu en résolvant un problème aux limites sur un Volume Élémentaire Représentatif (VER) de la microstructure en chaque point de la macrostructure. Les conditions aux limites sur le VER sont prescrites, par exemple, par le tenseur de déformation macroscopique  $\underline{\underline{\epsilon}}$  et le tenseur de contrainte macroscopique  $\underline{\underline{\sigma}}$  correspondant à ce chargement est obtenu par une moyenne volumique du champ de contrainte sur le VER. La loi de comportement effective du matériau n'est alors plus une relation mathématique explicite mais est obtenue par l'homogénéisation de la réponse microstructurale qui se fait en trois étapes : (i) localisation (application des conditions aux limites), (ii) résolution du problème mécanique microstructural, (iii) homogénéisation (moyenne volumique des champs). Ce processus est illustré sur la Fig. 1.

Différentes approches (de modélisation ou purement numériques) ont été proposées dans la littérature pour résoudre ce problème multiéchelle (théorie des champs moyens, théorie des modules effectifs

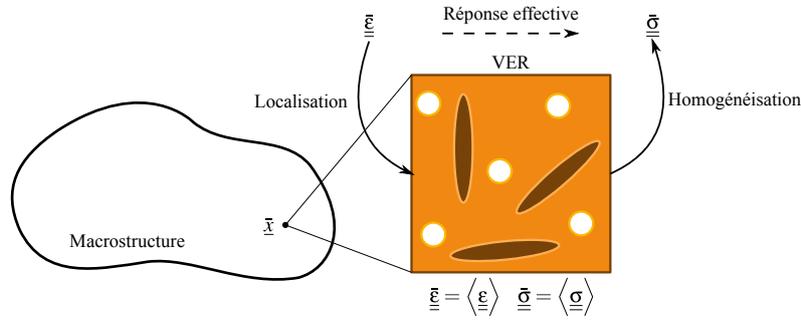


FIGURE 1 – Réponse effective d’un composite, obtenue par la résolution d’un problème aux limites sur le VER de la microstructure. Inspiré de [1].

en élasticité linéaire, méthode champs complets par homogénéisation numérique); on s’intéresse ici à la méthode de calcul multiéchelle popularisée sous le nom de  $FE^2$  (pour « éléments finis au carré ») par Feyel [2]. Cette approche consiste à réaliser deux calculs éléments finis emboîtés : le premier est conduit sur la structure (macroéchelle), le deuxième est conduit en chaque point d’intégration macroscopique sur le VER d’une microstructure (microéchelle). Les conditions aux limites du calcul microéchelle sont déterminées par l’état mécanique du point d’intégration correspondant à la macroéchelle. Cette approche permet d’obtenir, sans hypothèse forte sur le comportement effectif du matériau, la réponse macroscopique d’une structure à moindre coût, comparé à un calcul éléments finis unique dont la résolution serait suffisamment fine pour mailler toutes les hétérogénéités. Elle reste néanmoins assez coûteuse car (i) il faut conduire de façon systématique un calcul microstructural à chaque point d’intégration du maillage macroscopique, (ii) pour les comportements non linéaires, il est nécessaire de connaître également le module tangent effectif de la microstructure, qui est typiquement obtenu par perturbation numérique, ce qui entraîne des évaluations microscopiques supplémentaires. Le maillage du VER de la microstructure étant souvent très raffiné, la facteur limitant en terme de coût calcul est le nombre d’évaluations microscopiques :

$$N_{\text{éval. micro.}} = N_{\text{it.}} \times M \times (1 + n(n - 1)), \quad (1)$$

avec  $N_{\text{it}}$  le nombre d’itérations nécessaires pour atteindre l’équilibre de la macrostructure (typiquement dans un schéma de Newton-Raphson),  $M$  le nombre de points d’intégrations du maillage macroscopique,  $n = 2, 3$  la dimension du problème. Cependant, il est probable que certaines de ces évaluations soient redondantes et donc inutiles : au cours de la simulation, deux points macroscopiques peuvent très certainement partager le même état déformation-contrainte mécanique et donc conduire à deux évaluations microscopiques similaires.

Des stratégies d’accélération des schémas  $FE^2$  ont donc été mises en place pour réduire le temps de calcul en évitant ces redondances. Par exemple, Klusemann et Ortiz [4] stockent les états de déformation-contrainte macroscopiques dans un espace des phases tensoriel déformation-contrainte et interpolent, au moyen d’une subdivision simpliciale de l’espace, la réponse microscopique entre deux points voisins déjà calculés. Le nombre d’évaluations est ainsi fortement réduit. Une autre approche pour réduire les coûts des calculs multiéchelles consiste à générer une base de données représentative du comportement effectif, à partir de nombreux calculs microstructuraux, dans un processus « hors-ligne ». Cette base de données peut typiquement être utilisée pour alimenter un métamodèle de la réponse macroscopique, allant de la réduction de modèle au réseau de neurones (voir la revue Matouš et al. [5] pour une liste exhaustive de ces approches). Cependant, ces méthodes reposent toujours sur l’existence d’un modèle de comportement : il est soit interpolé, réduit ou identifié à partir des données. En rupture avec cette vision, Xu et al. [7] ont proposé une première utilisation de la DDCM pour les matériaux hétérogènes : la base de données des couples déformation-contrainte macroscopiques est générée en amont puis utilisée dans un calcul DDCM sur la structure. Cette méthode requiert de définir *a priori* les conditions aux limites appropriées qu’il faut appliquer aux calculs microstructuraux, c.-à-d. déterminer à l’avance la région de l’espace déformation-contrainte susceptible d’être pertinente pour le calcul macroéchelle.

Nous proposons ici une première stratégie pour réaliser des calculs  $FE^2$  utilisant la DDCM : la résolution du problème macroéchelle est faite par DDCM et la résolution du problème microéchelle est faite par un calcul éléments finis classique. Entre les deux échelles, la base de données est enrichie de façon

adaptative en fonction de la réponse mécanique de la macrostructure, dans un processus « en-ligne ». De cette façon, il n'est pas nécessaire de connaître *a priori* la réponse de la macrostructure. L'autre avantage de cette approche (déjà acquis dans [7]) est que la DDCM ne nécessite pas de module tangent effectif. Notre méthodologie a donc pour objectif de réduire le nombre d'évaluations microscopiques : grâce à la formulation du problème *data-driven*, seuls les points pertinents pour la simulation macroéchelle sont calculés.

## 2 Un solveur *data-driven* FE<sup>2</sup>

Nous développons une méthode itérative qui consiste à conduire successivement des calculs DDCM macroéchelles avec une base de données enrichie entre chaque itération des points jugés nécessaires par des calculs microéchelles.

Dans cette partie, nous rappelons dans un premier temps la structure et les ingrédients du solveur DDCM [3] en petites déformations élastiques, appliqué au calcul macrostructural. Nous exposons ensuite notre méthodologie pour un calcul à deux échelles avec mise à jour adaptative de la base de données.

### 2.1 Solveur *data-driven* macroscopique

Considérons un maillage EF macroscopique de  $N$  nœuds, indexés  $a \in [1 \dots N]$ , et  $M$  points d'intégration ou points matériels, indexés  $e \in [1 \dots M]$ , en dimension  $n = 2, 3$ . Soit  $\alpha \in [1 \dots N \times n]$  l'index des degrés de liberté ; alors  $\alpha = \alpha(a, i) = (a - 1)n + i$ , avec  $i \in [1 \dots n]$  la direction de l'espace cartésien. Les conditions aux limites de Dirichlet sont stockées dans un tableau de  $n_D$  déplacements imposés  $\{\bar{u}_\alpha^D\}_{\alpha \in D}$  avec  $D = \{\alpha_1, \dots, \alpha_{n_D}\}$ , tel que  $\alpha_k \in [1 \dots Nn], \forall k \in [1 \dots n_D]$ . Les efforts sont représentés par des vecteurs nodaux notés  $\{\bar{f}_a \in \mathbb{R}^n\}_{a=1}^N$ . L'état de déformation-contrainte  $(\bar{\underline{\underline{\epsilon}}}_e, \bar{\underline{\underline{\sigma}}}_e)$  du point d'intégration  $e$ , vit dans un espace multidimensionnel appelé *espace des phases local*, noté  $Z_{loc}^{(e)} = \mathbb{R}_{sym}^{n \times n} \times \mathbb{R}_{sym}^{n \times n}$ . L'*espace des phases global* est alors l'ensemble produit  $Z = Z_{loc}^{(1)} \times \dots \times Z_{loc}^{(M)}$ .

Les contraintes cinématiques et l'équilibre des efforts pour le problème macroscopique considéré s'écrivent :

$$\bar{\underline{\underline{\epsilon}}}_e = \sum_{a=1}^N B_{ea} \bar{u}_a, \quad \forall e \in [1 \dots M], \quad (2a)$$

$$\bar{u}_a \cdot \underline{e}_i = \bar{u}_\alpha^D, \quad \forall (a, i), \alpha(a, i) \in D, \quad (2b)$$

$$\left( \sum_{e=1}^M w_e B_{ea}^T \bar{\underline{\underline{\sigma}}}_e - \bar{f}_a \right) \cdot \underline{e}_i = 0, \quad \forall (a, i), \alpha(a, i) \notin D, \quad (2c)$$

où  $\{\bar{u}_a\}_{a=1}^N$  sont les vecteurs déplacements nodaux macroscopiques, la matrice  $B_{ea}$  encode la connectivité et la géométrie du maillage EF, et  $w_e$  est le poids d'intégration du point matériel  $e$ . L'ensemble des états mécaniquement admissibles est appelé *ensemble contraintes* et s'écrit

$$\mathcal{E} = \left\{ \left( \bar{\underline{\underline{\epsilon}}}, \bar{\underline{\underline{\sigma}}} \right) \in Z \text{ vérifiant (2)} \right\}. \quad (3)$$

L'*ensemble données matériau*  $\mathcal{D}$  est défini comme le produit de base de données matériau locales, notées  $\mathcal{D}_{loc}^{(e)}$  :  $\mathcal{D} = \mathcal{D}_{loc}^{(1)} \times \dots \times \mathcal{D}_{loc}^{(M)}$ . Dans ce qui suit, on considère une microstructure identique pour tous les points d'intégration de la macrostructure ; dans ce cas, il existe une unique *base de données matériau*, notée  $\mathcal{D}_{loc}$ , partagée par tous les points d'intégrations du maillage macroscopique. Pour les mêmes raisons, tous les états mécaniques vivent dans le même espace des phases local, noté  $Z_{loc}$ . La base de données est alors constituée d'états déformation-contrainte macroscopiques, obtenu à partir de  $m$  calculs microscopiques :

$$\mathcal{D}_{loc} = \left\{ \left( \bar{\underline{\underline{\epsilon}}}_i, \bar{\underline{\underline{\sigma}}}_i \right) \mid i \in [1 \dots m] \right\}. \quad (4)$$

La solution du problème *data-driven*, notée  $\mathcal{S}$ , est alors définie comme l'ensemble des états mécaniques  $\left( \bar{\underline{\underline{\epsilon}}}, \bar{\underline{\underline{\sigma}}} \right) \in \mathcal{E}$  les plus proches de l'ensemble données matériau  $\mathcal{D}$  :

$$\mathcal{S} = \arg \min_{\left( \bar{\underline{\underline{\epsilon}}}, \bar{\underline{\underline{\sigma}}} \right) \in \mathcal{E}} \min_{\left( \bar{\underline{\underline{\epsilon}}}_i^*, \bar{\underline{\underline{\sigma}}}_i^* \right) \in \mathcal{D}} \sum_{e=1}^M w_e d_e \left( \left( \bar{\underline{\underline{\epsilon}}}_e, \bar{\underline{\underline{\sigma}}}_e \right), \left( \bar{\underline{\underline{\epsilon}}}_e^*, \bar{\underline{\underline{\sigma}}}_e^* \right) \right), \quad (5)$$

où  $d_e$  désigne la distance locale définie dans  $\mathcal{Z}_{\text{loc}} \times \mathcal{D}_{\text{loc}}$  par

$$d_e \left( \left( \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_e, \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_e \right), \left( \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_i, \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_i \right) \right) = W(\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_e - \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_i) + W^*(\underline{\underline{\bar{\sigma}}}_e - \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_i), \quad (6)$$

avec  $W$  et  $W^*$  des fonctions d'écart en déformation et en contrainte dépendantes d'un opérateur  $\mathbb{C}$ , défini positif :

$$W(\underline{\underline{\varepsilon}}) = \frac{1}{2} \left( \mathbb{C} \underline{\underline{\varepsilon}} \right) \underline{\underline{\varepsilon}}, \quad W^*(\underline{\underline{\sigma}}) = \frac{1}{2} \left( \mathbb{C}^{-1} \underline{\underline{\sigma}} \right) \underline{\underline{\sigma}}. \quad (7)$$

Le problème (5) couple une minimisation sous contraintes et une optimisation combinatoire ; pour plus de détails sur sa formulation et sa résolution, nous renvoyons le lecteur à [3]. Ici, nous utiliserons la méthode DDCM comme une boîte noire pour le problème macroscopique (5), désignée sous le nom de DDSOLVER. On rappelle seulement la définition de l'état matériau du point matériel  $e$ , noté  $\left( \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_{ie}^*, \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_{ie}^* \right)$ , comme le couple déformation-contrainte dans  $\mathcal{D}_{\text{loc}}$  le plus proche de l'état mécanique  $\left( \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_e, \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_e \right)$  du point matériel  $e$  considéré :

$$\left( \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_{ie}^*, \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_{ie}^* \right) = \arg \min_{\left( \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_i, \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_i \right) \in \mathcal{D}_{\text{loc}}} d_e \left( \left( \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_e, \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_e \right), \left( \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_i, \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_i \right) \right) \quad (8)$$

## 2.2 Solveur *data-driven* à deux échelles

Comme mentionné plus haut, l'approche de Xu et al. [7] nécessite de déterminer *a priori* une base de données pour le calcul. Dans leurs travaux, les auteurs utilisent une grille régulière pour échantillonner l'espace des déformations macroscopiques qui prescrivent les conditions de chargement de la microstructure. À notre connaissance, il n'existe pourtant pas de moyens pour déterminer efficacement les bornes et la densité nécessaire de cette grille. Par ailleurs, une bonne partie des points risquent d'avoir été pré-calculés en vain car la réponse mécanique de la microstructure ne couvre qu'une région réduite de l'espace des phases.

La méthode proposée est un processus itératif où, entre chaque itération, la base de données  $\mathcal{D}_{\text{loc}}$  (4) est enrichie de façon adaptative. Pour choisir les points pertinents à lui ajouter, on utilise une des informations très importante donnée par la DDCM : la distance finale entre les états mécaniques et matériau. Si la distance  $d_e \left( \left( \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_e, \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_e \right), \left( \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_{ie}^*, \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_{ie}^* \right) \right)$  est grande (supérieure à une distance critique  $d_c$  fixée par l'utilisateur), cela signifie qu'il manque des points dans la base de données dans la région de l'espace des phases local entourant l'état mécanique  $\left( \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_e, \underline{\underline{\bar{\sigma}}}_e \right)$  considéré. Ce type d'états mécaniques est appelé *état mécanique isolé*. On ajoute alors à la base de données l'état déformation-contrainte obtenu par un calcul microstructural dont les conditions aux limites sont déterminées par l'état mécanique en déformation  $\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}_e$ , comme illustré sur la Figure 2.

L'algorithme de la méthode de résolution multiéchelle pilotée par les données est fourni Algorithme 1. Dans cet algorithme, trois points sont à discuter : (i) la base de données matériau initiale, (ii) la valeur du paramètre  $\mathbb{C}$ , (iii) le nombre de points matériau effectivement ajoutés entre deux itérations.

Nous proposons d'initialiser la base de données  $\mathcal{D}_{\text{loc}}^{(0)}$  le plus simplement possible et en ne faisant aucune hypothèse : la base de données initiale ne contient que le point de déformation-contrainte nulles :  $\mathcal{D}_{\text{loc}}^{(0)} = \{(\underline{0}, \underline{0})\}$ . On peut alors montrer que la première itération du processus itératif Algorithme 1 revient à fournir un estimateur élastique linéaire de raideur  $\mathbb{C}$  de la solution du problème mécanique macroscopique. La base de données  $\mathcal{D}_{\text{loc}}^{(1)}$  résulte donc de l'homogénéisation de la réponse mécanique de la microstructure, soumise aux points de déformation de la solution élastique linéaire pour la microstructure.

Concernant le paramètre  $\mathbb{C}$ , on peut également montrer qu'il est préférable d'avoir un grand (resp. petit) module de  $\mathbb{C}$  pour une simulation pilotée en déplacements (resp. efforts), où la base de données est enrichie à partir des déformations (resp. contraintes) macroscopiques.

Enfin, le nombre de points déformation-contrainte ajoutés à la base de données est limité pour des raisons de coût calcul, notamment dans les premières itérations où la base de données est très vide. Au lieu d'ajouter *tous* les états mécaniques isolés, on n'en sélectionne qu'une partie, de telle sorte que le

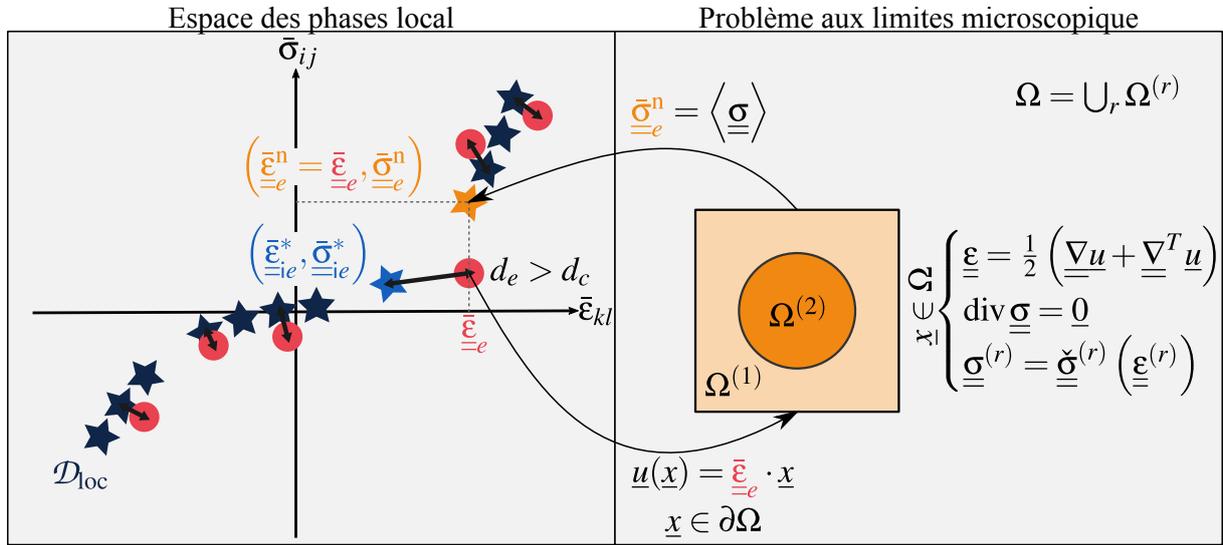


FIGURE 2 – Stratégie de mise à jour de la base de données à partir des déformations. Le nouveau point matériau est obtenu à partir de la résolution d’un problème mécanique sur le VER de la microstructure, dont les conditions aux limites sont déterminées par la déformation mécanique  $\bar{\varepsilon}_e$ , sélectionnée parmi les états mécaniques isolés (trop loin de leur état matériau associé).

---

**Algorithme 1** Solveur *data-driven* à deux échelles.

---

**ENTRÉES :**

- Macroéchelle : modèle éléments finis de  $N$  nœuds et  $M$  points d’intégration, conditions aux limites et chargement  $\{\bar{u}_\alpha^D\}_{\alpha \in D}$  et  $\{\bar{f}_{-a}\}_{a=1}^N$ .
- Microéchelle : modèle éléments finis du VER de la microstructure, modèle de comportement des constituants.

**SORTIES :**

- Macroéchelle : états mécaniques  $\left\{ \left( \bar{\varepsilon}_e, \bar{\sigma}_e \right) \right\}_{e=1}^M$ , base de données matériau  $\mathcal{D}_{loc}$ .
- Microéchelle : réponse mécanique locale et homogénéisée pour chaque point de chargement macroscopique dans  $\mathcal{D}_{loc}$ .

**Étape 1.** Fixer  $j = 0$ . Initialiser la base de données  $\mathcal{D}_{loc}^{(0)}$ .

**Étape 2.** Calculer les états mécaniques macroscopiques avec le solveur DDSOLVER :

$$\left( \bar{\varepsilon}^{(j)}, \bar{\sigma}^{(j)} \right) = \text{DDSOLVER} \left( \mathcal{D}_{loc}^{(j)} \right).$$

**Étape 3.** Enrichir la base de données matériau d’après l’homogénéisation des états mécaniques isolés :

$$\mathcal{D}_{loc}^{(j+1)} = \mathcal{D}_{loc}^{(j)} \cup \left\{ \left( \bar{\varepsilon}_e, \bar{\sigma}_e \right) \right\}_{e \in I},$$

avec  $I = \{e \in [1 .. M] \mid d_e > d_c\}$  et  $\bar{\sigma}_e^n$  obtenu d’après la stratégie présentée sur la Fig. 2.

**Étape 4.** Tester la convergence :

- si  $d_e \leq d_c, \forall e \in [1 .. M]$ , alors fin.
  - sinon, incrémenter  $j \leftarrow j + 1$  et retourner à l’Étape 2.
- 

nombre de points ajoutés à la base de données ne dépassent pas une certaine limite  $M_{lim}$ . Typiquement on choisit  $M_{lim} = M/2$  avec  $M$  le nombre de points d’intégration dans le maillage macroéchelle.

Le nombre d’évaluations microscopiques effectuées dans notre méthode de calcul multiéchelle est donc borné par

$$N_{\text{éval. micro}} \leq N_{\text{multi. iter.}} \times M_{lim}. \quad (9)$$

avec  $N_{\text{multi. iter.}}$  le nombre d'itérations du processus multiéchelle de l'Algorithme 1. Si ce nombre reste raisonnable, on peut donc espérer gagner beaucoup par rapport à l'évaluation systématique de la méthode FE<sup>2</sup> standard (1).

### 3 Résultats numériques

#### 3.1 Problème considéré

Nous considérons un plaque rectangulaire épaisse de dimensions  $l \times h = 20 \text{ mm} \times 50 \text{ mm}$ , percée d'un trou circulaire. sous l'hypothèse des déformations planes. Cette structure est composée d'un matériau bi-phasé, dont la microstructure 2D est représentée par une cellule unitaire composée d'une inclusion circulaire rigide dans une matrice rectangulaire plus souple. Les géométries et les maillages des deux échelles sont représentés Figure 3. Pour la macroéchelle, nous utilisons deux maillages différents composés d'éléments quadrangulaires bi-linéaires à 4 points d'intégration :

- le maillage « grossier » comprend  $N = 1092$  nœuds, 1015 éléments, et donc  $M = 4060$  points d'intégration ;
- le maillage « fin » comprend  $N = 2495$  nœuds, 2375 éléments, et donc  $M = 9500$  points d'intégration.

Les conditions aux limites de Dirichlet imposées à la macroéchelle sont représentées Figure 3 et s'écrivent

$$\bar{u}_a = 0 \quad \forall a \in [1 \dots N] \text{ such that } \underline{x}_a = (x_a, 0) \quad (10a)$$

$$\bar{u}_a = \bar{u}_1^D e_1 + \bar{u}_2^D e_2, \quad \forall a \in [1 \dots N] \text{ such that } \underline{x}_a = (x_a, h) \quad (10b)$$

avec  $\bar{u}_1^D = 0.3 \text{ mm}$  et  $\bar{u}_2^D = 0.05 \text{ mm}$ .

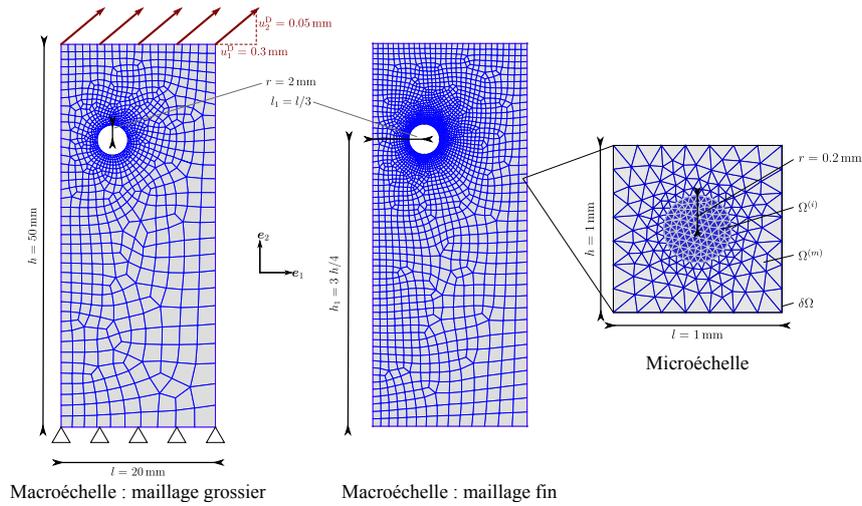


FIGURE 3 – Géométrie, maillage et conditions aux limites des deux échelles.

Le matériau bi-phasé est composé d'inclusions linéaires élastiques au module de Young  $E^{(i)} = 24 \text{ GPa}$  et au coefficient de Poisson  $\nu^{(i)} = 0.3$ . La matrice est représentée par un modèle de comportement élastique non-linéaire :

$$\underline{\underline{\sigma}}^{(m)} = \kappa^{(m)} \text{tr} \underline{\underline{\epsilon}}^{(m)} \left( 1 + \beta^{(m)} (\text{tr} \underline{\underline{\epsilon}}^{(m)})^2 \right) \underline{\underline{I}} + 2\mu^{(m)} \left( 1 + \beta^{(m)} \text{dev} \underline{\underline{\epsilon}}^{(m)} : \text{dev} \underline{\underline{\epsilon}}^{(m)} \right) \text{dev} \underline{\underline{\epsilon}}^{(m)} \quad (11)$$

avec  $\kappa^{(m)}$  et  $\mu^{(m)}$  les coefficients de compressibilité et cisaillement tels que  $E^{(m)} = 24 \text{ MPa}$  et  $\nu^{(m)} = 0.3$ , et  $\beta^{(m)} = 1 \times 10^4$ . Le maillage de la microéchelle, représenté Figure 3 comprend 235 nœuds et 466 éléments triangulaires linéaires à 1 point d'intégration. La réponse effective de la microstructure est obtenue par la résolution du problème aux limites local sur le VER  $\Omega = \Omega^{(m)} \cup \Omega^{(i)}$  (voir Figure 2), en utilisant des conditions aux limites en déplacements linéaires sur  $\partial\Omega$  :

$$\underline{u}(x) = \underline{\bar{\epsilon}} \cdot \underline{x}, \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega. \quad (12)$$

Les paramètres du solveur *data-driven* sont pris comme suit :

- l'opérateur  $\mathbb{C}$  est pris comme égal au tenseur de raideur isotrope élastique linéaire  $\mathbb{H}(E^{(i)}, \mathbf{v}^{(i)})$  de l'inclusion ;
- la distance critique  $d_c$  définissant les états mécaniques isolés est ajustée en fonction de  $\mathbb{C}$  et de l'écart maximum désiré entre les déformations mécanique et matériau  $\Delta \underline{\underline{\epsilon}} = 1 \times 10^{-6}$  :  $d_c = W(\Delta \underline{\underline{\epsilon}})$  ;
- le nombre maximum de points pouvant être ajoutés à la base de données entre deux itérations du solveur multiéchelle est donné par  $M_{\text{lim}} = M/2$ .

Avec ces paramètres, deux simulations multiéchelles successives sont réalisées :

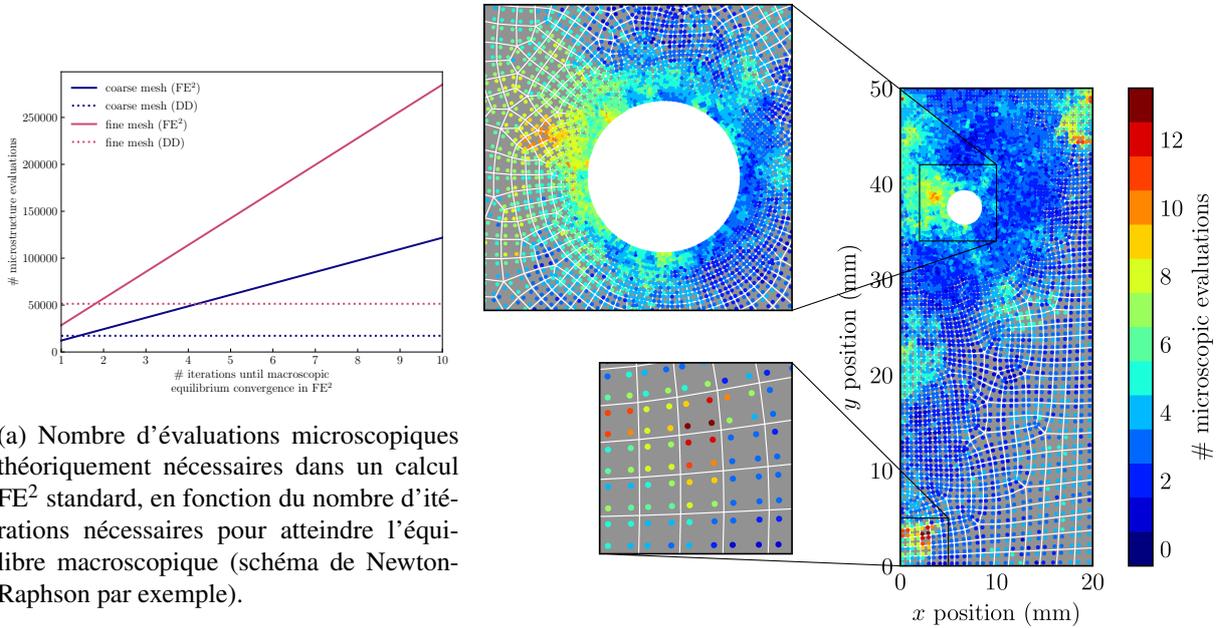
- une première est effectuée pour le maillage grossier ( $M = 4060$  points d'intégration), en partant de la base de données  $\mathcal{D}_{\text{loc}}^{(0)} = \{(\underline{0}, \underline{0})\}$  ;
- une deuxième est effectuée pour le maillage fin ( $M = 9500$  points d'intégration), en partant de la base de données finale du précédent calcul :  $\mathcal{D}_{\text{maillage fin}}^{(0)} = \mathcal{D}_{\text{maillage grossier}}^{(j_{\text{max}})}$ .

On mesure ainsi la pertinence de stocker les bases de données enrichie pour de futurs calculs similaires.

### 3.2 Résultats

Dans la première simulation, 17271 évaluations microscopiques ont été effectuées. Partant de ces calculs déjà effectués, 34094 évaluations supplémentaires ont été nécessaires pour le calcul sur le maillage raffiné. En tout, ces 51365 évaluations sont en nombre très nettement inférieur au besoin théorique d'une méthode  $\text{FE}^2$  standard, comme le montre la Figure 4(a).

On remarque que le nombre d'évaluations nécessaires au calcul sur le maillage raffiné est plus grand que pour le maillage grossier. Cela démontre que plus le maillage est fin, plus la base de données doit être raffinée. On peut expliquer ce phénomène ainsi : avec le raffinement du maillage, les zones de concentration des déformations et des contraintes dans la macrostructure agrandissent la région parcourue par la solution mécanique dans l'espace des phases local, nécessitant donc davantage de points matériau dans cette région. On le démontre sur la Figure 4(b) où l'on reporte le nombre d'évaluations microscopiques effectuées en chaque point d'intégration du maillage fin (maximum de 13). Les zones au bord des trous nécessitent en effet plus d'évaluations.



(a) Nombre d'évaluations microscopiques théoriquement nécessaires dans un calcul  $\text{FE}^2$  standard, en fonction du nombre d'itérations nécessaires pour atteindre l'équilibre macroscopique (schéma de Newton-Raphson par exemple).

(b) Nombre d'évaluations microscopiques en chaque point d'intégration du maillage macroscopique.

FIGURE 4 – Nombre d'évaluations microscopiques nécessaires dans un calcul multiéchelle piloté par les données.

### 3.3 Conclusion

Nous avons proposé une première stratégie de calcul adaptative pour les simulations multiéchelles, basée sur la DDCM introduite par Kirchdoerfer et Ortiz [3]. La base de données est alors constituée de couples déformation-contrainte macroscopiques. Typiquement, comme dans le schéma  $FE^2$  classique, la contrainte macroscopique  $\bar{\underline{\sigma}}$  est obtenue à partir de la moyenne volumique du champ microscopique  $\underline{\sigma}$ , solution d'un problème microstructural dont les conditions aux limites sont déterminées par la déformation macroscopique  $\bar{\underline{\epsilon}}$  [2]. En échantillonnant l'espace des déformations macroscopiques par une grille régulière, Xu et al. [7] ont proposé une première manière de réunir DDCM et homogénéisation numérique. Néanmoins, leur approche nécessite de déterminer la taille et la résolution de cette grille *a priori* et une bonne partie des points pré-calculés est susceptible d'être inutile pour la simulation macrostructurale considérée.

Notre méthodologie propose donc d'utiliser la DDCM comme un moyen de sélectionner les points à calculer. C'est un processus itératif dans lequel la base de données est successivement enrichie par les calculs microstructuraux correspondant seulement aux états mécaniques isolés : la distance entre les états mécaniques et matériau dans l'approche DDCM fournit en effet une information sur la qualité de la base de données actuelle. Tous les points dont la distance est jugée trop grande font l'objet d'un ajout à la base de données. Nous avons démontré que nous pouvons ainsi partir d'une base de données quasi-vide : l'unique point déformation-contrainte nulles.

Nous montrons que notre méthodologie réduit drastiquement le nombre d'évaluations microscopiques nécessaires, par rapport à une méthode  $FE^2$  standard. De plus, la base de données enrichie par un premier calcul peut être efficacement réutilisée comme point de départ d'un second calcul adaptatif. Les réponses microscopique et macroscopique se sont alors révélées qualitativement satisfaisantes (résultats non montrés ici, disponibles dans [6]).

Pour conclure, les résultats de cette première étude pour une approche de calcul adaptatif utilisant la DDCM et l'homogénéisation numérique sont très encourageants. De nombreuses questions restent ouvertes et les paramètres de la méthode peuvent certainement être améliorés (par exemple le paramètre  $C$  ou le nombre de point à ajouter). Néanmoins, nous pensons que ce type d'approches offre une application très intéressante du paradigme DDCM. Bien sûr, une comparaison complète avec un calcul  $FE^2$  reste à fournir pour déterminer la fiabilité de la méthode et comparer les coûts globaux de chacune des approches.

### Références

- [1] L. Brassart. *Homogenization of Elasto-(Visco)Plastic Composites : History-Dependent Incremental and Variational Approaches.*, Thèse de doctorat, Université Catholique de Louvain, 2011.
- [2] F. Feyel. *Multiscale  $FE^2$  elastoviscoplastic analysis of composite structures*, Computational Materials Science, 344-354, 1999.
- [3] T. Kirchdoerfer, M. Ortiz. *Data-driven computational mechanics*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 81-101, 2016.
- [4] B. Klusemann, M. Ortiz. *Acceleration of material-dominated calculations via phase-space simplicial subdivision and interpolation*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 256-274, 2015.
- [5] K. Matouš, M.G.D. Geers, V.G. Kouznetsova, A. Gilman. *A review of predictive nonlinear theories for multiscale modeling of heterogeneous materials*, Journal of Computational Physics, 192-220, 2017.
- [6] A. Platzer. *Mécanique Numérique En Grandes Transformations Pilotée Par Les Données : De La Génération De Données Sur Mesure À Une Stratégie Adaptative De Calcul Multiéchelle.*, Thèse de doctorat, École Centrale de Nantes, 2020.
- [7] R. Xiu, J. Yand, W. Yan, Q. Huang. *Data-driven multiscale finite element method : from concurrence to separation*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 112893, 2020.