

# Construction de représentations stochastiques par la Théorie de l'Information: application à la modélisation du tenseur d'élasticité apparent pour les microstructures aléatoires

Johann Guilleminot<sup>a</sup>, Christian Soize<sup>a</sup>

a. Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME UMR8208 CNRS, Université Paris-Est, , 5 Bd Descartes, 77454 MARNE-LA-VALLEE

## Résumé :

*Nous étudions la construction d'une représentation stochastique du tenseur d'élasticité apparent pour des microstructures aléatoires pour lesquelles la séparation d'échelle, classiquement supposée en homogénéisation stochastique, n'est pas établie. La construction du modèle associé au champ aléatoire est effectuée en utilisant la Théorie de l'Information et le principe du Maximum d'Entropie. L'approche est illustrée au travers d'une application à une base de données expérimentale pour un matériau polycristallin.*

## Abstract :

*This work is devoted to the construction of a probabilistic model for the apparent elasticity tensor random field associated with random microstructures, for which the scale separation that is typically assumed in stochastic homogenization theories, cannot be stated. The construction relies on the use of information theory and is performed having recourse to the Maximum Entropy principle. The approach is exemplified considering an experimental database for a polycrystalline material.*

**Mots clefs :** Maximum d'Entropie ; Modèle probabiliste ; Milieux aléatoires

## 1 Introduction

La modélisation mécanique des milieux hétérogènes à microstructure aléatoire a reçue une large attention de la communauté, et ce principalement dans le cadre général de l'homogénéisation stochastique (linéaire et non-linéaire). Ce dernier repose classiquement sur le postulat qu'il existe un volume dit élémentaire représentatif (VER), de taille caractéristique  $\ell$ , contenant "suffisamment d'informations" (topologiques, statistiques, etc.) pour que ses propriétés homogénéisées soient "représentatives" de celles du matériau considéré. De telles propriétés *effectives* sont en outre déterministes et indépendantes des conditions aux limites considérées lors de la démarche d'homogénéisation. En pratique, une telle démarche n'est pertinente que lorsque la condition suivante, dite de séparation d'échelle, est satisfaite :

$$d \ll \ell \ll L, \quad (1)$$

où  $d$  et  $L$  sont les tailles caractéristiques des hétérogénéités (lorsque la morphologie du milieu est de type matrice-inclusions) et de l'échelle structurale, respectivement. Toutefois, il existe certaines classes de matériaux, comme certains bétons et composites renforcés, pour lesquelles la condition (1) n'est pas satisfaite (e.g.  $\ell \simeq L$ ). Dans ce cas, l'échelle de modélisation est de nature mésoscopique et les propriétés locales équivalentes du milieu sont qualifiées de propriétés *apparentes*. Ces dernières sont intrinsèquement aléatoires (et seraient dépendantes des conditions aux limites locales si elles résultaient d'un changement d'échelle) [3] et leur modélisation soulève deux problèmes majeurs, à savoir :

1. Comment modéliser, d'un point de vue mathématique, les propriétés mécaniques apparentes à l'échelle mésoscopique ?
2. Quelle est la propagation d'un tel aléa à l'échelle mésoscopique sur la réponse mécanique d'un(e) système (structure) d'intérêt à l'échelle macroscopique ?

Il est important de noter que le caractère prédictif associé à la caractérisation de la réponse mécanique macroscopique dépend de la qualité du modèle probabiliste (ainsi que de la qualité du solveur de propagation), qui se doit de garantir certaines propriétés fondamentales de la quantité modélisée (un tenseur d'élasticité devant être symétrique, défini-positif, etc.), tout autant que la cohérence physique du modèle sous-jacent.

Dans cette communication, nous nous intéressons plus spécifiquement à la construction de modèles probabilistes *a priori* pour le champ aléatoire du tenseur d'élasticité apparent, associé à un milieu aléatoire. Notons que la modélisation directe du champ d'élasticité apparent est particulièrement adaptée aux milieux complexes, tels que certains matériaux biologiques, pour lesquels la topologie de la microstructure ne peut pas être facilement décrite. Enfin, soulignons que la qualité du modèle probabiliste *a priori* s'avère particulièrement importante afin, soit de palier à un manque éventuel de données expérimentales, soit de permettre une actualisation efficace d'un modèle probabiliste *a posteriori*.

## 2 Méthodologie générale pour la modélisation probabiliste

Soit  $[C]$  la variable aléatoire à valeurs dans l'ensemble  $\mathbb{M}_n^+(\mathbb{R})$  des matrices  $(n \times n)$  réelles symétriques définies-positives, correspondant à la représentation matricielle du tenseur d'élasticité apparent associé à un domaine mésoscopique  $V$ . On note  $[C] \mapsto p_{[C]}([C])$  la fonction densité de probabilité (p.d.f.), définie de  $\mathbb{M}_n^+(\mathbb{R})$  dans  $\mathbb{R}^+$ , définissant la distribution  $P_{[C]} = p_{[C]}([C])d[C]$  de la matrice aléatoire  $[C]$  ( $d[K]$  désignant une mesure *ad-hoc* sur l'ensemble  $\mathbb{M}_n^+(\mathbb{R})$  des matrices  $(n \times n)$  réelles symétriques; voir [7]). Une étape clé de toute modélisation probabiliste consiste donc en la détermination de la fonction  $[C] \mapsto p_{[C]}([C])$ , qui est accomplie ici, dans le cadre de la théorie de l'information [4], par l'intermédiaire du principe du maximum d'entropie (MaxEnt) [6]. L'approche, introduite dans [7] [8] pour la modélisation des matrices réduites en élastodynamique et qualifiée de *non paramétrique*, permet la définition du modèle probabiliste le plus objectif possible par rapport à l'information disponible. Afin d'illustrer brièvement ce concept, notons par exemple le fait que la densité de probabilité  $p_{[C]}$  doit satisfaire la condition de normalisation usuelle :

$$\int_{\mathbb{M}_n^+(\mathbb{R})} p_{[C]}([C]) d[C] = 1. \quad (2)$$

D'un point de vue théorique, toute loi "candidate" doit donc satisfaire l'équation (2). Naturellement, des contraintes supplémentaires (liées à la modélisation physique, notamment) peuvent être prises en compte, pour peu qu'elles constituent des informations disponibles et objectives. La liberté relative d'un tel choix conduit à la définition d'ensembles de matrices aléatoires différents, plus ou moins riches et dépendant d'un nombre plus ou moins important de paramètres.

Considérons à présent l'ensemble  $\mathcal{C}_{ad}$  de toutes les fonctions densité de probabilité, de  $\mathbb{M}_n^+(\mathbb{R})$  dans  $\mathbb{R}^+$ , telles que toutes les contraintes liées à l'information disponible soient satisfaites. Le principe du maximum d'entropie s'écrit alors :

$$p_{[C]} = \arg \max_{p \in \mathcal{C}_{ad}} S(p), \quad (3)$$

où la mesure d'entropie (de Shannon)  $S(p)$  de  $p$  est définie par :

$$S(p) = - \int_{\mathbb{M}_n^+(\mathbb{R})} p([C]) \ln(p([C])) d[C]. \quad (4)$$

Le problème d'optimisation stochastique (3) peut être résolu en introduisant un ensemble de multiplieurs de Lagrange associés aux contraintes algébriques, puis en procédant au calcul des variations. Il

s'en suit que la densité de probabilité, estimée par le principe du maximum d'entropie, est la fonction maximisant la mesure d'entropie (c'est-à-dire les incertitudes) sur l'espace admissible  $\mathcal{C}_{ad}$ . Nous illustrons dans la prochaine section la mise en œuvre d'une telle approche pour la modélisation du champ aléatoire du tenseur d'élasticité apparent.

### 3 Application au champ aléatoire du tenseur d'élasticité apparent

#### 3.1 Construction du modèle

Avant de procéder à la construction explicite du modèle probabiliste, nous proposons de considérer deux informations supplémentaires. Supposons donc, dans un premier temps, que la modélisation probabiliste est effectuée sur une matrice d'élasticité dont la valeur nominale déterministe est notée  $[C]$ . Cette dernière peut correspondre, par exemple, à la valeur (effective) macroscopique. Par conséquent, il est raisonnable de supposer que la valeur moyenne de la variable aléatoire considérée soit égale à  $[C]$ , soit :

$$E \{[C]\} = \int_{\mathbb{M}_n^+(\mathbb{R})} [C] p_{[C]}([C]) d[C] = [C]. \quad (5)$$

Enfin, nous supposons qu'il existe deux matrices *déterministes*  $[C_\ell]$  et  $[C_u]$ , homogènes à des matrices d'élasticité, telles que :

$$[C_\ell] < [C] < [C_u] \text{ presque sûrement (p.s.)}. \quad (6)$$

Pour certains matériaux (e.g. un composite biphasique dont les phases sont ordonnées et de propriétés mécaniques déterministes),  $[C_\ell]$  et  $[C_u]$  peuvent être facilement explicitées en fonction des tenseurs d'élasticité et des fractions volumiques des phases. Dans le cas général, des bornes  $[C_\ell]$  et  $[C_u]$  peuvent être estimées numériquement à partir de réalisations de bornes aléatoires définies par rapport à des conditions aux limites homogènes de types Dirichlet et Neumann (et dont l'existence peut être prouvée par l'utilisation de théorèmes énergétiques ; voir [3]) [2]. L'inégalité presque sûre (6) peut être intégrée, dans la formulation MaxEnt, par l'intermédiaire des deux contraintes suivantes :

$$E \{\ln(\det([C] - [C_\ell]))\} = \beta_\ell, \quad |\beta_\ell| < +\infty, \quad (7)$$

$$E \{\ln(\det([C_u] - [C]))\} = \beta_u, \quad |\beta_u| < +\infty. \quad (8)$$

En notant  $\lambda_0 \in \mathbb{R}$ ,  $[\Lambda] \in \mathbb{M}_n^S(\mathbb{R})$ ,  $\lambda_\ell \in \mathbb{R}$  et  $\lambda_u \in \mathbb{R}$  les multiplicateurs de Lagrange respectivement associés aux contraintes (2), (5), (7) and (8), on montre aisément que  $p_{[C]}$  prend la forme suivante (voir [1] par exemple) :

$$p_{[C]}([C]) = \mathbb{1}_{\mathbb{M}_n^+(\mathbb{R})}([C]) c_0 \det([C] - [C_\ell])^{\lambda_\ell - 1} \det([C_u] - [C])^{\lambda_u - 1} \text{etr}\{-[\Lambda][C]\}, \quad (9)$$

où  $\text{etr}\{[X]\} = \exp\{\text{tr}([X])\}$ ,  $c_0 = \exp(-\lambda_0)$  est la constante de normalisation (dont le calcul peut être explicitement conduit) et  $[X] \mapsto \mathbb{1}_{\mathbb{M}_n^+(\mathbb{R})}([X])$  est la fonction indicatrice de  $\mathbb{M}_n^+(\mathbb{R})$ . En pratique, les multiplicateurs peuvent être, soit considérés comme des paramètres libres du modèle, soit calculés numériquement en imposant que les équations (2-5-7-8) soient satisfaites avec  $p_{[C]}$  donnée par l'équation (9). Cette stratégie d'identification nécessite donc de procéder au calcul des intégrales multidimensionnelles (par une méthode de Monte Carlo), ou de recourir à des estimateurs statistiques pour les grandeurs d'intérêt lorsque des réalisations indépendantes de  $[C]$  peuvent être générées à partir de (9). La forme non usuelle de la p.d.f. implique l'utilisation de techniques de simulation MCMC, dont la robustesse dépend en partie des valeurs des multiplicateurs. Afin de contourner cette difficulté, nous proposons de procéder à un changement de variable relaxant la contrainte presque sûre d'encadrement, en modélisant une variable aléatoire  $[D]$  à valeurs dans  $\mathbb{M}_n^+(\mathbb{R})$ , homogène à une matrice de souplesse, définie par [2] :

$$[D] = ([C] - [C_\ell])^{-1} - ([C_u] - [C_\ell])^{-1}. \quad (10)$$

Clairement, l'encadrement presque sûr de  $[C]$  implique la positivité presque sûre de  $[D]$ , soit :

$$[C_\ell] < [C] < [C_u] \text{ p.s.} \Leftrightarrow [D] > 0 \text{ p.s.} \quad (11)$$

En imposant la contrainte  $E\{[\mathbf{D}]\} = [\underline{D}]$  (où la donnée  $[\underline{D}] \in \mathbb{M}_n^+(\mathbb{R})$  est cohérente avec la valeur moyenne  $[\underline{C}]$  et  $E\{\ln(\det([\mathbf{D}]))\} = \beta$ ,  $|\beta| < +\infty$ , il s'en suit que  $[\mathbf{D}]$  appartient à l'ensemble  $SE^+$  de matrices aléatoires défini dans [7] [8]. Il est fondamental d'observer que la p.d.f.  $p_{[\underline{C}]}$  calculée à partir de ce changement de variable et pour  $[\mathbf{D}] \in SE^+$  est évidemment différente de (9). En pratique, des réalisations indépendantes de  $[\underline{C}]$  sont obtenus à partir des réalisations indépendantes de  $[\mathbf{D}]$ , ces dernières étant générées de manière robuste à partir de transformations non linéaires de variables aléatoires scalaires Gaussiennes et Gamma (voir [7]).

Considérons maintenant le cas du champ aléatoire du tenseur d'élasticité apparent. On note  $\mathbf{x} \mapsto [\mathbf{C}(\mathbf{x})]$  ce champ aléatoire à valeurs dans  $\mathbb{M}_n^+(\mathbb{R})$ , défini dans l'espace probabilisé  $(\Theta, \mathcal{T}, \mathcal{P})$  et indexé par un ouvert  $\mathcal{D}$  de  $\mathbb{R}^d$ ,  $1 \leq d \leq 3$ . Bien qu'un modèle probabiliste pourrait être construit suivant la méthodologie générale définie dans [9], cette stratégie se révèle extrêmement délicate à mettre en œuvre dans le cas où la loi marginale d'ordre un du champ est spécifié par l'équation (9). Suivant la discussion précédente, on propose donc de substituer à une telle construction la modélisation du champ aléatoire  $\mathbf{x} \mapsto [\mathbf{D}(\mathbf{x})]$ , trivialement défini à partir de (10). Pour  $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$  fixé,  $[\mathbf{D}] \in SE^+$  et par conséquent, le champ aléatoire  $\mathbf{x} \mapsto [\mathbf{D}(\mathbf{x})]$  appartient à l'ensemble  $SFE^+$  de champs aléatoires construits et étudiés dans [9]. Du point de vue de la résolution du problème aux limites stochastique associé, il est important que souligner que la prise en compte de la borne inférieure déterministe  $[C_\ell]$  implique la propriété d'ellipticité uniforme pour la forme bilinéaire stochastique résultant de la formulation faible et donc, l'existence d'une unique solution du second-ordre.

Dans la prochaine section, nous présentons l'identification du modèle probabiliste sur une base de données expérimentale.

### 3.2 Application à un matériau polycristallin

Nous considérons ici une microstructure polycristalline (en dimension 2), correspondant à un alliage d'aluminium. En raison d'une surface de caractérisation limitée, l'identification porte sur l'estimation des bornes  $[C_\ell]$  et  $[C_u]$ , ainsi que sur la matrice moyenne  $[\underline{D}]$  (le champ aléatoire étant supposé homogène) et sur le paramètre de fluctuation statistique  $\delta_{[\underline{D}]}$  (voir [9] pour les détails concernant la paramétrisation du champ dans  $SFE^+$ ) associés au domaine mésoscopique testé expérimentalement (les longueurs de corrélation du champ ne peuvent donc pas être identifiées). Dans un premier temps, nous exploitons les mesures EBSD, permettant une caractérisation microstructurale et cristallographique du matériau (voir la Fig. 3.2 pour une réalisation expérimentale de la microstructure), obtenues dans [5].

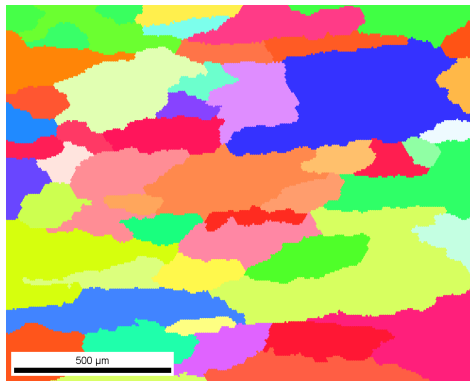


FIGURE 1 – Réalisation expérimentale de la microstructure.

A partir de ces données, une modélisation de la microstructure (à l'aide d'une tessellation de Voronoï adaptée) et des angles cristallographiques est accomplie et permet, au travers de simulations numériques de Monte-Carlo, d'obtenir une nouvelle base de donnée avec un nombre plus important de réalisations. Des réalisations des bornes inférieure et supérieure sont obtenues à l'aide du théorème de partitionnement de Huet [3] et de calculs par éléments finis (i.e. en réalisant une homogénéisation numérique sur des sous-domaines de microstructures simulées, avec l'application de conditions aux

limites homogènes de Dirichlet et de Neumann). Les approximations déterministes  $[C_\ell]$  et  $[C_u]$  sont ensuite calculées selon la procédure proposée par les auteurs dans [2], et sont égales à (en MPa) :

$$[C_\ell] = 10^5 \begin{bmatrix} 1.0869 & 0.6068 & 0.0007 \\ 0.6068 & 1.0884 & 0.0007 \\ 0.0007 & 0.0007 & 0.2347 \end{bmatrix}, [C_u] = 10^5 \begin{bmatrix} 1.1487 & 0.5787 & 0.0013 \\ 0.5787 & 1.1477 & -0.0003 \\ 0.0013 & -0.0003 & 0.2825 \end{bmatrix}. \quad (12)$$

Pour chaque réalisation  $\theta_i$  de la microstructure, des essais de traction virtuels sont conduits et la réalisation correspondante du tenseur d'élasticité apparent est identifiée en résolvant le problème d'optimisation suivant :

$$[C(\theta_i)] = \underset{[X] \in \mathbb{M}_3^+(\mathbb{R}), [C_\ell] < [X] < [C_u]}{\arg \min} \quad \| \langle \sigma(\theta_i) \rangle - [X] \langle \epsilon(\theta_i) \rangle \|, \quad (13)$$

où  $\langle \sigma(\theta_i) \rangle$  et  $\langle \epsilon(\theta_i) \rangle$  désignent les moyennes spatiales des champs de contraintes et de déformations locales pour la réalisation ( $\theta_i$ ). A partir de ces réalisations du tenseur apparent, les paramètres  $\delta_{[D]}$  et  $[D]$  sont calculés à partir des équations (10) et (12), à l'aide d'estimateurs statistiques usuels. On obtient :

$$\delta_{[D]} = 0.66, \quad (14)$$

et

$$[D] = 10^{-3} \begin{bmatrix} 0.2767 & 0.0879 & -0.0189 \\ 0.0879 & 0.2214 & 0.0277 \\ -0.0189 & 0.0277 & 0.2366 \end{bmatrix}. \quad (15)$$

Les paramètres de dispersion  $\delta_{[C]}$  et de moyenne  $[C]$  pour la matrice d'élasticité apparente  $[C]$  peuvent d'autre part être estimés à partir des réalisations de la matrice  $[D]$  et valent :

$$\delta_{[C]} = 0.0093, \quad (16)$$

et

$$[C] = 10^5 \begin{bmatrix} 1.1153 & 0.5944 & 0.0025 \\ 0.5944 & 1.1194 & -0.0016 \\ 0.0025 & -0.0016 & 0.2601 \end{bmatrix}. \quad (17)$$

On constate, entre autres, un faible niveau de fluctuations statistiques pour la matrice  $[C]$ , qui est dû à la symétrie matérielle forte du crystal d'aluminium (à symétrie cubique, mais dont l'indice de Zener est très proche de 1).

## 4 Conclusions

Nous avons présenter la construction d'une représentation stochastique du tenseur d'élasticité apparent pour des microstructures aléatoires pour lesquelles la séparation d'échelle n'est pas établie. Pour ce faire, nous avons dans un premier temps rappeler le cadre général et la méthodologie de construction, effectuée en utilisant la Théorie de l'Information et le principe du Maximum d'Entropie. Nous avons ensuite mis en œuvre l'approche dans le cas d'une base de données expérimentale pour un matériau polycristallin.

## Références

- [1] Das, S., Ghanem, R. G. 2009 A bounded random matrix approach for stochastic upscaling. *Multiscale Modeling & Simulation* **8** 296-325
- [2] Guillemot, J., Noshadravan, A., Soize, C., Ghanem, R. G. 2011 A probabilistic model for bounded elasticity tensor random fields with application to polycrystalline microstructures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **200** 1637-1648
- [3] Huet, C. 1990 Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **38** 813-841

- [4] Jaynes, E. T. 1957 Information theory and statistical mechanics. *Physical Review* **106-108** 620-630/171-190
- [5] Parra Garcia, M., Luo, C., Noshadravan, A., Keck, A., Teale, R., Chattopadhyay, A., Peralta, P. 2008 Microstructure representation and material characterization for multiscale finite element simulations of local mechanical behavior in damaged metallic structures. *In Proceedings of SPIE, the International Society for Optical Engineering*. March 10-12 2008, San Diego, California, USA.
- [6] Shannon, C. E. 1948 A mathematical theory of communication. *Bell System Technical Journal* **27** 379-423/623-659
- [7] Soize, C. 2000 A nonparametric model of random uncertainties on reduced matrix model in structural dynamics. *Probabilistic Engineering Mechanics* **15** 277-294
- [8] Soize, C. 2001 Maximum entropy approach for modeling random uncertainties in transient elastodynamics. *Journal of the Acoustical Society of America* **109** 1979-1996
- [9] Soize, C. 2006 Non-gaussian positive-definite matrix-valued random fields for elliptic stochastic partial differential operators. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **195** 26-64