

Homogénéisation numérique à l'aide de modèles *prior* de la raideur mésoscopique : identification et validation

V-P. TRAN^{a, b, (*)}, J. GUILLEMINOT^b, S. BRISARD^a, K. SAB^a

a. Université Paris-Est, Laboratoire NAVIER (UMR 8205 CNRS, ENPC, IFSTTAR),
77455 Marne-la-Vallée, France

b. Université Paris-Est, Laboratoire MSME (UMR 8208 CNRS),
77455 Marne-la-Vallée, France

(*) Auteur correspondant, email: vinh-phuc.tran@enpc.fr

Résumé :

L'homogénéisation numérique des microstructures aléatoires requiert la résolution du problème du correcteur sur un grand nombre de réalisations. L'effort de calcul numérique est plus marqué lorsque la géométrie des microstructures est complexe et le contraste mécanique entre phases est considérable (typiquement > 100). Dans les deux cas, la finesse de la grille de discrétisation implique un coût de calcul très important.

Récemment, Bignonnet et coll. [1] ont proposé une technique de filtrage permettant d'introduire des microstructures équivalentes (appelées mésostructures). Une des caractéristiques essentielles de cette approche est que les propriétés macroscopiques de la mésostructure coïncident avec celles de la microstructure sous-jacente; le filtrage réduit par ailleurs les fluctuations locales de raideur (voir Fig. 1). Par conséquent, une grille plus grossière peut être utilisée dans la résolution du problème du correcteur. En faisant varier la taille caractéristique H du filtre, on obtient un continuum de représentations pour le tenseur d'élasticité, de l'échelle microscopique jusqu'à l'échelle macroscopique.

On s'intéresse dans ce travail à la calibration et la validation d'un modèle *prior* [5] pour représenter la raideur mésoscopique obtenue par la technique de filtrage de Bignonnet et coll. [1]. Dans la première partie, nous décrivons la génération et l'analyse statistique des raideurs mésoscopiques d'un modèle de microstructure de type matrice-inclusions (sphériques). Ensuite, dans la deuxième partie nous introduisons un modèle *prior* basé sur le principe du maximum d'entropie. Nous montrons que le modèle peut être calibré soit par les estimateurs statistiques, soit par la méthode du maximum de vraisemblance dans la troisième partie. En fin, nous décrivons la validation du modèle *prior* et des méthodes d'identification mise en œuvre en comparant certains grandeurs d'intérêt mésoscopiques et macroscopiques.

Dans la première partie de cette communication, nous décrivons la génération des microstructures aléatoires $\{\mathbf{C}(\mathbf{x}, \theta), \mathbf{x} \in \Omega\}$ et des mésostructures associées $\{\tilde{\mathbf{C}}(\mathbf{x}, \theta), \mathbf{x} \in \Omega\}$ par la méthode de Monte-Carlo. Nous considérons une cellule de base Ω d'un assemblage des inclusions rigides sphériques de deux diamètres immergées dans une matrice élastique homogène. Le diamètre des petites inclusions est $D/3$, D étant le diamètre des grandes inclusions. La taille du domaine périodique est $L = 6D$. La fraction volumique occupée par les grandes (resp. petites) inclusions est 20% (resp. 10%). Un ensemble de $N_{\text{exp}} = 700$ réalisations indépendantes (indexées par $\{\theta_i\}_{i=1}^{N_{\text{exp}}}$) a été généré afin d'assurer la convergence des estimateurs statistiques. La formulation variationnelle proposée par Brisard et Dormieux [2, 3] de la méthode d'homogénéisation numérique par transformée de Fourier rapide de Moulinec et Suquet [8, 9] est utilisée pour résoudre le problème du correcteur. La microstructure est discrétisée sur une grille cartésienne de $128 \times 128 \times 128$ voxels. Les deux phases sont linéaires élastiques isotropes. La matrice et l'inclusion ont le même coefficient de Poisson $\nu = 0.2$ et le module de cisaillement de l'inclusion est $\mu_i = 1000\mu_m$ où μ_m dénote le module de cisaillement de la matrice. Un contraste élevé (1000) est donc obtenu.

Ensuite, l'analyse statistique est effectuée sur la base des mésostructures (appelée base de données expérimentale). Nous constatons que les raideurs mésoscopiques sont presque symétriques et isotropes. Par conséquent, elles sont caractérisées par deux champs aléatoires $\{\tilde{\kappa}(\mathbf{x}, \theta), \mathbf{x} \in \Omega\}$ (module de compression mésoscopique) et $\{\tilde{\mu}(\mathbf{x}, \theta), \mathbf{x} \in \Omega\}$ (module de cisaillement mésoscopique). On trouve les estimations

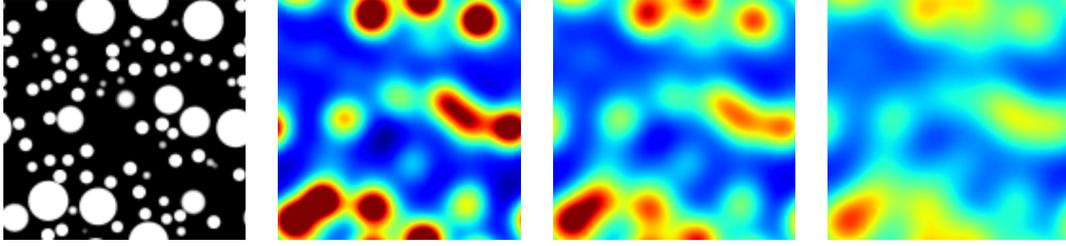


Fig. 1. Une réalisation (coupe 2D) du champ aléatoire de la raideur microscopique $\{C_{1111}(\mathbf{x}, \theta), \mathbf{x} \in \Omega\}$ et des champs aléatoires des raideurs mésoscopiques associés $\{\tilde{C}_{1111}(\mathbf{x}, \theta), \mathbf{x} \in \Omega\}$ obtenus pour $H = 2D$, $H = 2.5D$ et $H = 3D$. On observe alors la variation de contraste en fonction de la taille du filtre H .

suivantes des modules de compression et de cisaillement mésoscopique moyens :

$$\langle \tilde{\kappa} \rangle = 2.35\mu_m, \quad \langle \tilde{\mu} \rangle = 1.78\mu_m \quad (1)$$

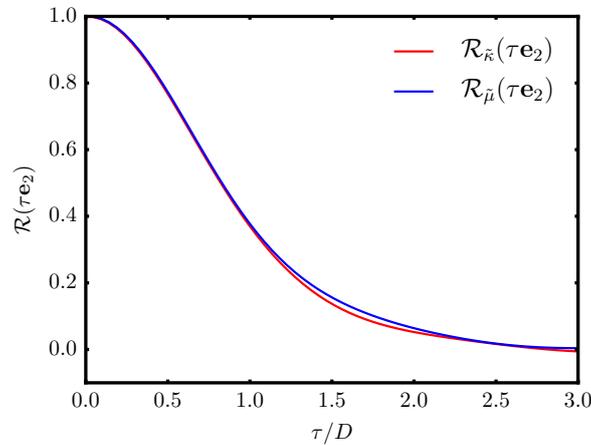


Fig. 2. La fonction de corrélation $\tau/D \mapsto \mathcal{R}(\tau \mathbf{e}_2)$ pour le module de compression et module de cisaillement dans la direction x_2 .

Du fait de l'homogénéité statistique (vérifiée aux fluctuations statistiques près dans nos simulations) et l'isotropie, la fonction de corrélation est identique dans toutes les directions pour chaque module. On observe également que cette fonction de corrélation est identique pour le module de cisaillement et le module de compression mésoscopique (voir Fig. 2). Ce résultat remarquable fera l'objet d'études ultérieures.

La deuxième partie de notre exposé concerne la construction du modèle *prior*. À cette étape, nous introduisons la *champ aléatoire du module de compression* $\{\kappa'(\mathbf{x}, \theta), \mathbf{x} \in \Omega\}$ et la *champ aléatoire du module de cisaillement* $\{\mu'(\mathbf{x}, \theta), \mathbf{x} \in \Omega\}$ tels que pour tout point \mathbf{x} dans Ω :

$$\kappa'(\mathbf{x}, \theta) = \tilde{\kappa}(\mathbf{x}, \theta) - \kappa_m, \quad \mu'(\mathbf{x}, \theta) = \tilde{\mu}(\mathbf{x}, \theta) - \mu_m \quad (2)$$

Nous supposons que les champs $\{\kappa'(\mathbf{x}, \theta), \mathbf{x} \in \Omega\}$ et $\{\mu'(\mathbf{x}, \theta), \mathbf{x} \in \Omega\}$ sont statistiquement indépendants (voir [4, 12]). Par conséquent, la construction du modèle probabiliste du champ aléatoire des raideurs mésoscopiques $\{\tilde{C}(\mathbf{x}, \theta), \mathbf{x} \in \Omega\}$ est strictement équivalente avec la construction du modèle de $\{\kappa'(\mathbf{x}, \theta), \mathbf{x} \in \Omega\}$ et $\{\mu'(\mathbf{x}, \theta), \mathbf{x} \in \Omega\}$. Pour un point \mathbf{x} fixé dans Ω , le modèle probabiliste pour $\kappa'(\mathbf{x}, \theta)$ peut être construit par le principe de maximum d'entropie énoncé par Jaynes (voir [6, 7]) et basé sur la notion d'entropie de Shannon [10]. Plus spécifiquement, le principe de maximum d'entropie nous permet de construire le modèle probabiliste le plus *objectif* possible par rapport à *l'information disponible*. D'après l'analyse statistique présentée dans la première partie, il convient de considérer les informations suivantes :

$$\mathbb{E} \{\kappa'(\mathbf{x}, \theta)\} = \langle \kappa' \rangle, \quad (3)$$

$$\mathbb{E} \{ \ln (\kappa'(\mathbf{x}, \theta)) \} = \vartheta, \quad |\vartheta| < +\infty, \quad (4)$$

où $\langle \kappa'(\mathbf{x}, \theta) \rangle = \langle \tilde{\kappa}(\mathbf{x}, \theta) \rangle - \kappa_m$. La contrainte définie par Eq. (3) indique que la valeur moyenne en \mathbf{x} est supposée connue, alors que Eq. (4) permet d'assurer que $\kappa'(\mathbf{x}, \theta)$ et $\kappa'(\mathbf{x}, \theta)^{-1}$ sont des variables aléatoires du second-ordre (voir [11]). On montre alors que la loi marginale d'ordre 1 de $\kappa'(\mathbf{x}, \theta)$ (resp. $\mu'(\mathbf{x}, \theta)$) est une loi Gamma, complètement définie par la donnée de l'espérance et du coefficient de variation (supposés connus).

En pratique, le champ aléatoire de $\kappa'(\mathbf{x}, \theta)$ est défini à partir d'une transformation non linéaire mesurable d'un champ aléatoire Gaussien centré, homogène, à valeurs réelles ([11]) noté $\{\Xi_{\kappa'}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d\}$:

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad \kappa'(\mathbf{x}, \theta) = F_{\mathcal{G}_{\kappa'}}^{-1} (\Phi(\Xi_{\kappa'}(\mathbf{x}, \theta))) \quad (5)$$

où $F_{\mathcal{G}_{\kappa'}}^{-1}$ est la fonction de répartition inverse de la loi Gamma correspondant à la marginale d'ordre 1 de $\kappa'(\mathbf{x}, \theta)$ et Φ est la fonction de répartition de la loi normale.

Le champ Gaussien $\{\Xi_{\kappa'}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d\}$ est complètement défini par sa fonction de corrélation. Nous supposons celle-ci séparable, de la forme :

$$\prod_{k=1}^d r(|x_k - y_k|) \quad (6)$$

pour tous (\mathbf{x}, \mathbf{y}) dans $\Omega \times \Omega$, où la fonction de corrélation unidimensionnelle r prend la forme suivante [13] :

$$\forall \tau \in [0, L], \quad r(\tau) = \exp \left(-\frac{2}{\alpha^2} \sin^2 \left(\frac{\pi \tau}{L} \right) \right) \quad (7)$$

où le paramètre α qui permet de contrôler la longueur de corrélation du champ Gaussien. L'analyse statistique des raideurs mésoscopiques dans la première partie montre que la fonction de corrélation du module de compression et du module de cisaillement sont identiques. On peut donc utiliser une unique valeur de α pour les deux modules. Du fait de la transformation non linéaire (voir Eq. (5)), la fonction de corrélation du champ aléatoire du module de compression et module de cisaillement ne coïncide pas avec celle du champ aléatoire Gaussien. Par conséquent, un problème d'optimisation doit être résolu afin de calibrer, par une méthode inverse, la valeur de α .

Dans la troisième partie, nous décrivons la calibration du modèle *prior*. L'identification des paramètres de la marginale d'ordre 1 (une valeur moyenne et un coefficient de variation) et de la valeur de α (voir Eq. (7)) est effectuée par deux méthodes. Dans un premier temps, nous utilisons des estimateurs statistiques déterminés sur la base de données expérimentale complète. Cette approche est coûteuse, c'est pourquoi dans un second temps, nous procédons à une calibration par maximisation de la vraisemblance sur un nombre limité de réalisations (voir Fig. 3). Nous montrons que dans les deux cas, les valeurs obtenues sont très similaires.

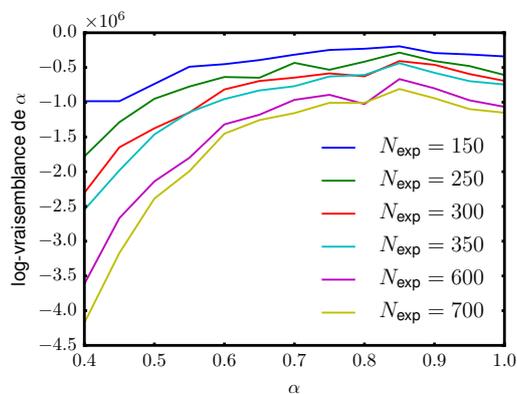
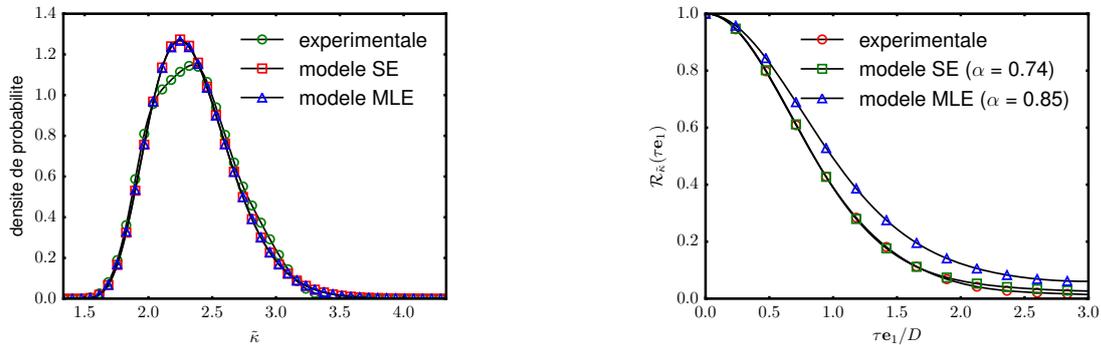


Fig. 3. Logarithme de la fonction de vraisemblance estimée pour N_{exp} réalisations.

Dans la dernière partie, nous discutons de la validation du modèle probabiliste calibré en troisième partie en comparant certaines grandeurs d'intérêt mésoscopiques et les modules effectifs entre le modèle

et la base de données expérimentale. D'abord, nous comparons la densité de probabilité pour un point donné du champ aléatoire du module de compression (voir Fig. 4a). Un très bon accord est observé entre le modèle et la base de données expérimentale. Ensuite, nous comparons la fonction de corrélation



(a) la densité de probabilité du module de compression

(b) la fonction de corrélation du module de compression dans l'axe x_1 .

Fig. 4. Comparaison entre les mesures expérimentales et le modèle probabiliste

expérimentale et celle issue du modèle (voir Fig. 4b) ; l'écart observé est faible. Finalement, nous comparons les valeurs moyennes statistiques (sur 100 réalisations) des modules effectifs calculés par le modèle probabiliste avec les résultats expérimentaux. Nous obtenons alors un très bon accord. Les résultats sont présentés dans le tableau ci-dessous :

	Expérimental	Modèle SE	Modèle MLE
$\kappa^{\text{eff}}/\mu_m$	2.326 ± 0.001	2.331 ± 0.015	2.314 ± 0.087
μ^{eff}/μ_m	1.767 ± 0.001	1.762 ± 0.012	1.748 ± 0.068

Tab. 1. Comparaison des moyennes statistiques des modules effectifs obtenus par exploitation de la base de données expérimentale et par le modèle probabiliste (calibré de deux façons différentes). L'erreur correspond à l'intervalle de confiance à 99%.

Dans ce travail, nous avons présenté la calibration et validation d'un modèle probabiliste *prior* pour la modélisation des raideurs mésoscopiques obtenues par un processus de filtrage. Pour ce faire, l'analyse statistique a été effectuée sur un modèle de microstructure de type matrice-inclusions (sphériques). À partir de cette analyse, le modèle *prior* a été construit par le principe du maximum d'entropie. La calibration du modèle est ensuite réalisée soit par des estimateurs statistiques soit par la méthode du maximum de vraisemblance. En fin, certaines grandeurs d'intérêt mésoscopiques et macroscopiques sont comparées, et on montre qu'un bon accord est obtenu entre le modèle et la base de données expérimentale. De plus, ce modèle peut être calibré à partir d'un nombre limité de réalisations et il permet donc de réduire énormément le coût de calcul dans la résolution numérique du problème du correcteur.

Mots clés : Homogénéisation numérique, Modèle probabiliste prior, Maximum d'entropie

Références

- [1] Bignonnet, F., Sab, K., Dormieux, L., Brisard, S., Bisson, A, 2014. *Macroscopically consistent non-local modeling of heterogeneous media*. Comput. Method. Appl. M. 278, 218–238
- [2] Brisard, S., Dormieux, L., 2010. *FFT-based methods for the mechanics of composites: A general variational framework*. Comp. Mater. Sci. 49, 663–671

- [3] Brisard, S., Dormieux, L., 2012. *Combining Galerkin approximation techniques with the principle of Hashin and Shtrikman to derive a new FFT-based numerical method for the homogenization of composites*. Comput. Method. Appl. M. 217-220, 197–212
- [4] Guilleminot, J., Soize, C., 2013a. *On the statistical dependence for the components of random elasticity tensors exhibiting material symmetry properties*. J. Elasticity. 111, 109–130
- [5] Guilleminot, J., Soize, C., 2013b. *Stochastic model and generator for random fields with symmetry properties: Application to the mesoscopic modeling of elastic random media*. SIAM Multiscale Model. Simul. 11, 840–870
- [6] Jaynes, E.T., 1957a. *Information theory and statistical mechanics*. Phys. Rev. 106, 620 – 63
- [7] Jaynes, E.T., 1957b. *Information theory and statistical mechanics. ii*. Phys. Rev. 108, 171 – 190
- [8] Moulinec, H., Suquet, P., 1994. *A fast numerical method for computing the linear and nonlinear properties of composites*. C. R. Acad. Sci. Iib. Mec. 318, 1417–1423
- [9] Moulinec, H., Suquet, P., 1998. *A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure*. Comput. Method. Appl. M. 157, 69–94
- [10] Shannon, C.E., 1948. *A mathematical theory of communication*. Bell Sys. Tech. J. 27, 379–423, 623–656
- [11] Soize, C., 2000. *A nonparametric model of random uncertainties for reduced matrix models in structural dynamics*. Probabilist. Eng. Mech. 15, 277 – 294
- [12] Ta, Q.A., Clouteau, D., Cottureau, R., 2010. *Modeling of random anisotropic elastic media and impact on wave propagation*. Eur. J. Comp. Mech. 19, 241–253.
- [13] Rasmussen, C.E., Williams, C.K.I., 2005. *Gaussian Processes for Machine Learning (Adaptive Computation and Machine Learning)*. The MIT Press.