

Hyperréduction de champs complets en plasticité cristalline

David Ryckelynck,
Harris Farooq [1], Daria Mesbah [2], Georges Cailletaud [1]
Samuel Forest [1,3], Henry Proudhon [2]

Mécamat Aussois 2025



Mécanismes microscopiques en plasticité cristalline

Partition des déformations et élasticité :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^p, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^e$$

Le domaine Ω est constitué de grains, équipés d'une structure cristallographique (CFC) et d'une orientation cristalline qui est observable par tomography RX et Contrast de Diffraction.

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \sum_{s=1}^{s=12} \dot{\gamma}^s \mathbf{m}^s, \quad \tau^s = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{m}^s, \quad \mathbf{m}^s = \frac{1}{2} (\mathbf{l}^s \otimes \mathbf{n}^s + \mathbf{n}^s \otimes \mathbf{l}^s)$$

Modèle indépendant du temps de Forest-Rubin [3] :

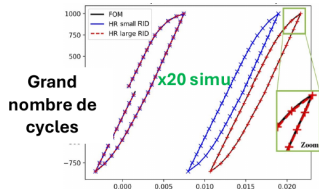
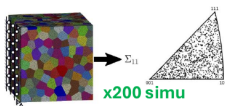
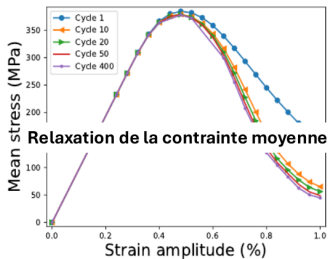
$$\dot{\gamma}^s = \sqrt{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}' : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}'} \left\langle \frac{|\tau^s - \chi^s| - R_0}{P} \right\rangle \text{sg}(\tau^s - \chi^s), \quad \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}' = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - (\mathbf{I} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) \mathbf{I}$$

Mais les mécanismes microscopiques ne correspondent pas à des degrés de liberté d'une microstructure.

Motivations

Faire plus de simulations en un temps donné.
Réaliser des études paramétriques.

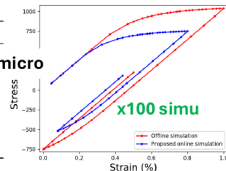
Calculs de VER



The peaks of the two curves differ by approximately 20 percent

Original parameters	Changed parameters
$C_{1111} = 259600$	
$C_{1122} = 179000$	
$C_{1212} = 109600.0 \text{ GPa}$	$C_{1212} = 109600.0 \text{ GPa}$
$R_0 = 320.0 \text{ MPa}$	$R_0 = 220.0 \text{ MPa}$
$C = 100000.0 \text{ MPa}$	$C = 80000.0 \text{ MPa}$
$D = 1000.0$	$D = 1000.0$
$K = 9.0 \text{ MPa}$	$K = 9.0 \text{ MPa}$

Calibration macro et micro



Les observations micro améliorent la calibration [2].

Extraire de prévisions mécaniques un modèle généralisable ayant peu d'inconnues.

Transformer des données en modèles, par des algorithmes d'apprentissage.

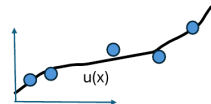
Exploiter les signaux faibles cachés dans les données.

Exploiter la notion d'espace latent (ou de variété) dans lequel se trouve les données. Les données n'occupent pas tout l'espace ambiant dans lequel elles sont plongées.

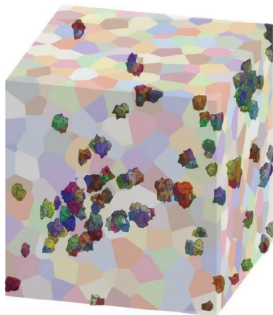
Espace latent = espace de mécanismes (modes) de déformation d'un VER.

Maillages de modèles hyperréduits

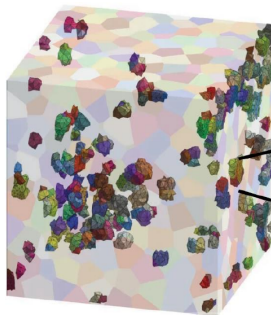
si on a un espace latent de petite dimension



Interpolation = sur-apprentissage



RID1 restricted to 9300 finite elements



RID2 restricted to 17400 finite elements

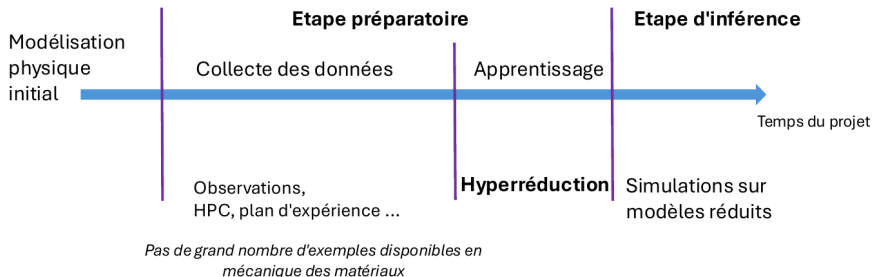


Zone of interest

Avec une sélection de champs de vitesses virtuelles

Réduction de modèle dans le cadre de l'apprentissage de variété [4] (Manifold learning)

Apprentissage à base physique en exploitant des données issues d'un modèle mécanique et d'une phase préparatoire (offline).

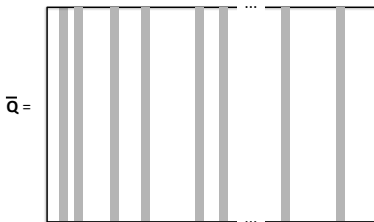


Données pour la réduction de modèles éléments finis

Déplacement éléments finis, paramétré par μ :

$$u(x, (t_j, \mu_j)) = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \varphi_i(x) \bar{Q}_{ij}, \quad \forall x \in \Omega$$

Pour un maillage donné et pour un **plan d'expérience complet** sur les paramètres $\mu_j \in \mathcal{P}$, il y a formellement une matrice de données $\bar{Q} \in \mathbb{R}^{\mathcal{N} \times (n_t n_\mu)}$:

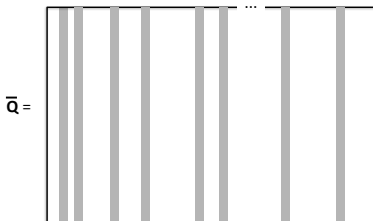


On échantillonne $\bar{Q}$ par un plan d'expérience et on souhaite obtenir le reste de $\bar{Q}$ par un modèle hyperréduit.

Hypothèse d'un espace latent de type sous-espace vectoriel de $\mathbb{R}^{\mathcal{N}}$

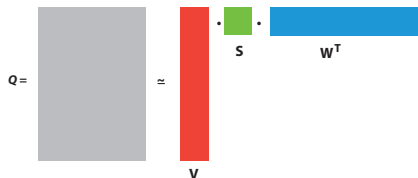
Le problème mécanique admet une équation aux dérivées partielles de faible épaisseur de Kolmogorov.

Ou, pour un maillage fixe, $\bar{Q}$ est de rang faible et le plan d'expérience permet de capter l'espace vectoriel des colonnes de $\bar{Q}$.



Apprentissage d'un espace vectoriel par décomposition en valeurs singulières

Soit Q la matrice des prévisions réalisées par le modèle EF et un plan d'expérience. La matrice des vecteurs singuliers $V \in \mathcal{R}^{\mathcal{N} \times N}$ est une base réduite.


$$Q \approx V \cdot S \cdot W^T$$

Minimisation de la norme 2 : $\sum_j \|u(\cdot, j) - V V^T u(\cdot, j)\|^2$
(apprentissage auto-supervisé et auto-encodeur linéaire)

Proper Orthogonal Decomposition¹ pour une norme $L^2(\Omega)$.

1. John Leask Lumley. The structure of inhomogeneous turbulent flows. Atmospheric Turbulence and Radio Wave Propagation (A. M. Yaglom and V.I. Tatarski, eds.), 1967

Déformation macroscopique E et fluctuations éléments finis périodiques δu_i :

$$u(x, (t_j, \mu_j)) = E(t_j, \mu_j) x + \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \varphi_i(x) \delta u_i(t_j, \mu_j), \quad \forall x \in \Omega$$

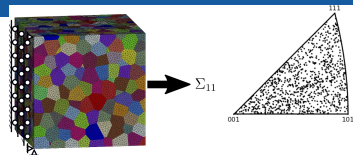
Bien que le calcul soit fait avec des éléments en formulation périodique, les données sont collectées pour le déplacement complet.

Les modes POD obtenus sont périodiques, car la décomposition en valeurs singulières conserve les relations linéaires en les degrés de liberté.

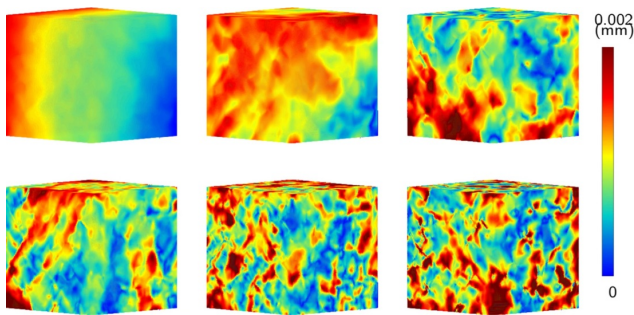
Ces modes permettent de projeter des formulations non périodiques pour les rendre périodiques.

Exemple de base réduite de déplacements en plasticité cristalline

Base de données d'entraînement : simulation sur 10 cycles de chargement en contrainte. VER non périodique pour un alliage à base Nickel. 200 pas de temps. $\mathcal{N} = 3.10^6$



1000 grains.

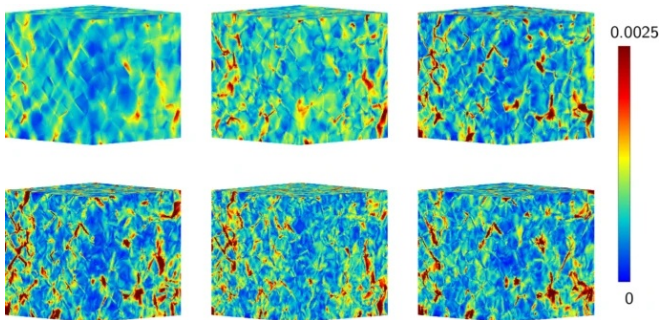
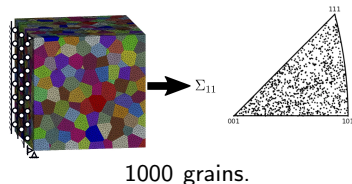


6 premiers modes de déplacements (amplitude).

Erreur de représentation inférieure à 1% pour 9 modes.

Base réduite de modes de tenseur de déformation

Base de données d'entraînement : simulation sur 10 cycles de chargement en contrainte. VER non périodique pour un alliage à base Nickel. 200 pas de temps. $\mathcal{N} = 3.10^6$



6 premiers modes de déformation (amplitude aux pt de Gauss).

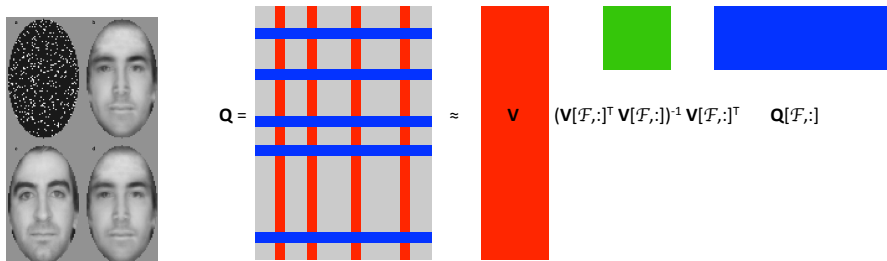
Erreur de représentation inférieure à 1% pour 20 modes.

La norme utilisée compte : L2 ou H1.

Le tenseur de déformation d'un mode de déplacement n'est pas un mode SVD issu des déformations.

Exploitation spatiale de l'hypothèse de rang faible

Gappy POD [Everson 1995], Empirical interpolation [Barrault 2004], RID [Ryckelynck 2005], DEIM [Chaturantabut 2009]



Sélection de lignes $\mathcal{F}$ pour conserver le rang de $V[\mathcal{F}, :]$ (de rang N). Interpolation empirique, si $(V[\mathcal{F}, :])^{-1}$ existe (DEIM).

Decomposition exacte si $\exists \gamma \mid Q = V \gamma$.

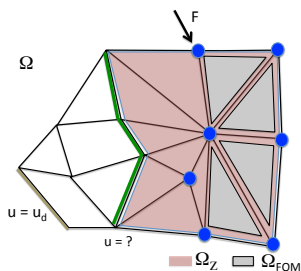
Un domaine réduit d'intégration est un sous-domaine construit par l'assemblage des éléments qui contiennent des **points d'interpolation pour les déplacements et les contraintes**, et éventuellement les points d'interpolation d'autres variables.

Cette construction est empirique. On constate de bonnes propriétés de robustesse des calculs hyper-réduits.

2. D. Ryckelynck, David, K.Lampoh, S. Quilici, Hyper-reduced predictions for lifetime assessment of elasto-plastic structures, *Meccanica*, doi 10.1007/s11012-015-0244-7, 2015

Hyperréduction par domaine réduit d'intégration³

Construction d'un domaine Ω_Z par assemblage des éléments qui permettent l'interpolation des déplacements et des déformations. Puis restriction des vitesses virtuelles par la liste $\mathcal{F}$.



Dirichlet like boundary
conditions on
 $\mathcal{I} = (\Omega \setminus \Omega_Z) \cap \Omega_Z$.

$$\mathcal{F} = \left\{ i, \int_{\Omega \setminus \Omega_Z} \varphi_i^2 dx = 0 \right\}$$

Base de vitesses virtuelles : $(\psi_k^Z)_{k=1}^N$

$$\psi_k^Z = \sum_{i \in \mathcal{F}} \varphi_i V_{ik}$$

Réduction de modèle par projection :

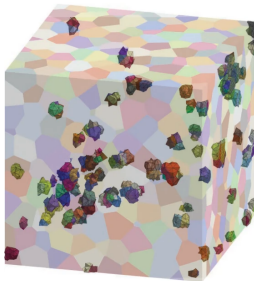
$$V[\mathcal{F}, :]^T r(V\gamma)[\mathcal{F}] = 0$$

Approche hybride : correction EF après HROM.

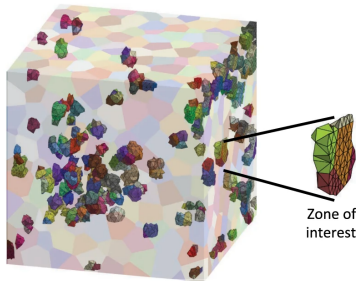
3. D. Ryckelynck, David, K.Lampoh, S. Quilici, Hyper-reduced predictions for lifetime assessment of elasto-plastic structures, Meccanica, doi 10.1007/s11012-015-0244-7, 2015

Possibilité de faire grossir le domaine réduit

Extension du domaine réduit par l'ajout d'éléments voisins.



RID1 restricted to 9300 finite elements

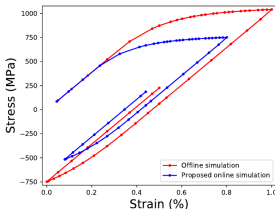


RID2 restricted to 17400 finite elements

Cas d'une modification de coefficients d'érouissage

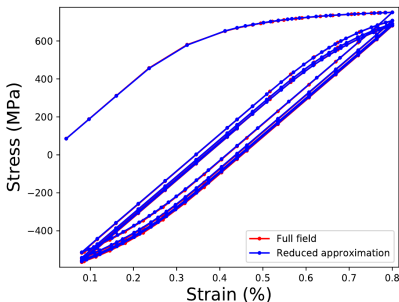
The peaks of the two curves differ by approximately 20 percent

Original parameters	Changed parameters
$C_{1111} = 259600.0$ GPa	$C_{1111} = 259600.0$ GPa
$C_{1122} = 179000.0$ GPa	$C_{1122} = 179000.0$ GPa
$C_{1212} = 109600.0$ GPa	$C_{1212} = 109600.0$ GPa
$R_0 = 320.0$ MPa	$R_0 = 220.0$ MPa
$C = 100000.0$ MPa	$C = 80000.0$ MPa
$D = 1000.0$	$D = 1000.0$
$K = 9.0$ MPa	$K = 9.0$ MPa



Données d'entraînement

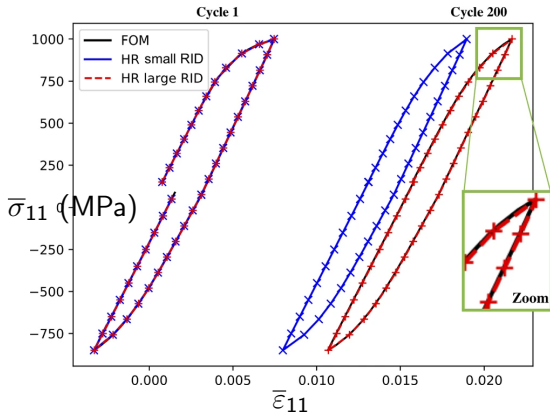
$$\dot{\chi}^s = C \dot{\gamma}^s - D |\dot{\gamma}^s| \chi^s$$



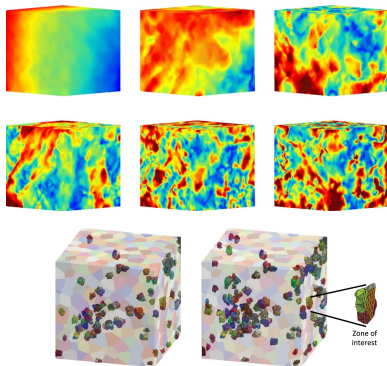
Test : Adaptation plastique

Cas grand nombre de cycles : 10 cycles EF, 200 cycles HROM (9 modes)

Courbe de traction macroscopique



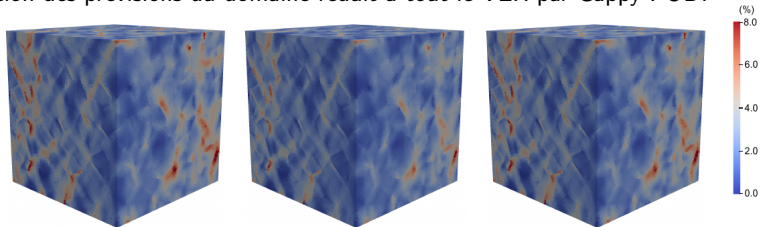
Phénomène de rochet



	Full field	HROM	Hybrid
Nodes	1174719	57874	57874
Elements	859848	36041	36041
Computation time	880 h	70 h	450 h
Parallel processors	24	1	1
RAM	221.2 Gbs	1.5 Gbs	1.5 Gbs

Erreur sur la prévision du champ complet ε_{11} (100ième cycle)

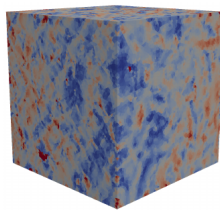
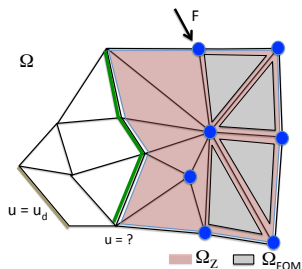
Extrapolation des prévisions du domaine réduit à tout le VER par Gappy POD.



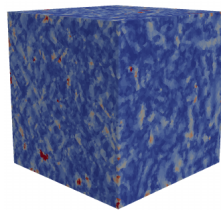
Full field

HROM

Hybrid

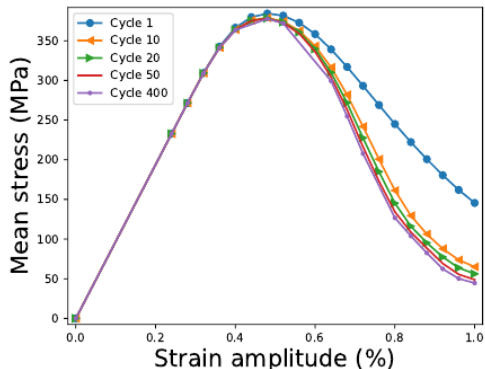


HROM error



Hybrid error

Relaxation de la contrainte macroscopique pilotée par la déformation macroscopique



Pas de comparaison possible avec la méthode des éléments finis.

Temps CPU estimé : 2 ans sur 24 processeurs.

HROM à 9 modes

Cas des EDP lin  aris  es elliptiques :

$$a(v, \delta u) = \int_{\Omega_Z} \varepsilon(v) : \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon} : \varepsilon(\delta u) d\Omega$$

$$\mathcal{U}_{HROM} = \{\delta u \in \mathcal{U}, \delta u = \mathbf{V} \gamma\}, \quad \delta u_{ex} \in \mathcal{U}$$

Il existe c tel que :

$$\|\delta u - \delta u_{ex}\| \leq c \min_{w \in \mathcal{U}_{HROM}} \|w - \delta u_{ex}\|$$

Hypoth  se : $\delta u = \delta u_{ex}$ sur l'interface $\mathcal{I}$ entre le domaine r  duit Ω_Z et le reste du domaine.

Discussion : intrusivité de l'hyperréduction

Modification de la résolution du système linéaire de l'algorithme de Newton Raphson.

$$\mathbf{J} \delta u_{\text{ex}} = -r$$

en

$$\mathbf{V}[\mathcal{F},:]^T \mathbf{J}[\mathcal{F},:] \mathbf{V} \delta \gamma = -\mathbf{V}[\mathcal{F},:]^T r[\mathcal{F}], \quad \delta u = \mathbf{V} \delta \gamma$$

assemblé sur le maillage réduit de Ω_Z .

Propriété : si les erreurs sur les variables internes sont négligeables, c'est une projection oblique de δu_{ex} sur $\mathbf{V}$.

Propriété : pour $\mathbf{J} = \mathbf{I}$ on retrouve la Gappy POD classique.

Discussion : points forts/points faibles

Points forts :

- Algorithme indépendant de la loi de comportement et des paramètres du modèle EF.
- Intrusivité classique : modifier le solveur linéaire et ajouter la notion d'interface dans le maillage réduit.
- Estimation d'erreur de type erreur en relation de comportement.
- Plasticité, grandes déformations, contact (Cast3M), viscoplasticité, modèles micromorphes, couplages...

Points faibles :

- Moins rapide que les métamodèles
- N'est pas intéressant en cas de maillage adaptatif en cours de calcul (utiliser un HROM local)
- N'est pas adapté à des maillages paramétriques, ou à des microstructures variables.
- Simulation de l'endommagement

Discussion : point faible commun aux métamodèles et aux modèles hyperréduits

Difficile de décrire un ensemble de trajets de chargement de petite dimension.

Excepté dans un cadre de simulation des procédés de fabrication et de simulation FE^2 avec des chargements macroscopiques simples.

Méthode présentée disponible dans :

- Zset (prochainement dans Aset)
- CimLib (DR - L. Fourment)
- Code Aster
- Cast-3M

Bientôt dans Forge®.

Conclusion : quand choisir un modèle réduit par projection ou un métamodèle ?

Métamodèle de type POD, pour les modèles à peu de paramètres :

$$u(x, t, \boldsymbol{\mu}) = \sum_{k=1}^N \psi_k(x) \gamma_k(\boldsymbol{\mu}), \quad \psi_k = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \varphi_i(x) V_{ik}$$

avec apprentissage supervisé pour $\gamma_k(\boldsymbol{\mu})$, mais extrapolations à éviter. C'est une boîte noire (pas d'explicabilité).

Hyperréduction pour une cinématique de type POD dans un modèle mécanique. La cinématique se généralise bien pour les chargements cycliques, les modifications de coefficients matériaux, certaines modifications d'amplitude de chargement. Possibilité de plans d'expériences frugaux.

Perspective : Prise en compte de textures différentes et de microstructures de VER différentes [2]

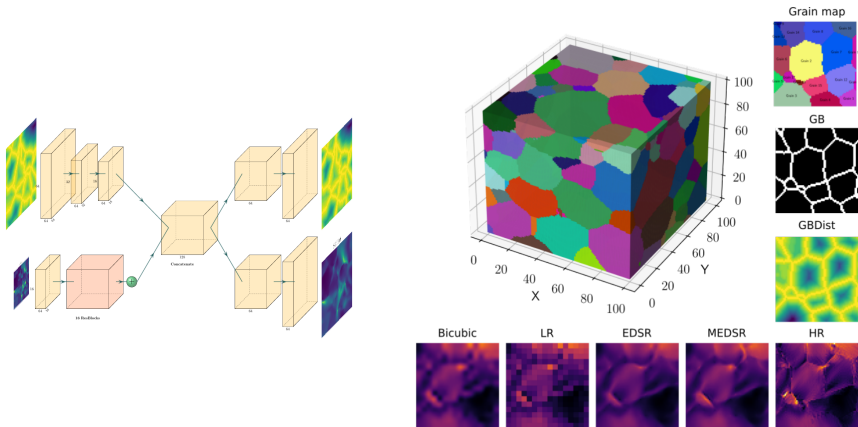


Figure 1: An overview of super-resolution analysis for crystal plasticity simulations

Upsampling method	Metrics for prediction quality assessment			
	SSIM ↑ (%)	PSNR ↑ (dB)	L^2 ↓ (%)	L^2_2 ↓ (%)
LR (Input)	60.69 ± 7.52	23.25 ± 2.01	33.30 ± 0.32	85.00 ± 8.07
Bicubic	75.05 ± 5.72	24.71 ± 1.94	28.35 ± 8.43	64.37 ± 6.21
EDSR	79.45 ± 5.92	25.39 ± 2.07	25.92 ± 6.55	60.05 ± 6.65
MEDSR (Ours)	81.64 ± 5.01	26.70 ± 2.10	22.44 ± 6.42	53.93 ± 8.28

- Explicabilité : quelles données contribuent le plus à l'entraînement du modèle réduit ? Idem pour les prévisions hyper-réduites.
- Besoin d'accélération des simulations du fait de meilleures résolutions des images (scanning 3DXRD)
- L'hyperréduction des modèles FFT ? Données FFT pour HROM EF [H. Launay 2021].

Annonce : 13 mars après-midi

GT Apprentissage profond en mécanique des matériaux

Demie journée de lancement sur le thème de des **algorithmes de segmentation d'image** appliqué à des données en mécanique des matériaux et en biomécanique. Des méthodes récentes d'apprentissage profond seront présentées dans ce cadre, ainsi que des liens vers des librairies Python ou des bases de données.

Pour faciliter les échanges, les discussions informelles tout en limitant les déplacements, le séminaire sera organisé sur trois sites avec une visio-conférence interne et une co-présidence de séance locale par site.

- ENS Paris Saclay (Clément Jailin)
- Université de Montpellier (Yann Monerie)
- CEMEF – Sophia Antipolis (David Ryckelynck)

Voir le site mecamat.org.

- [1] Farooq, H., Ryckelynck, D., Forest, S., Cailletaud G., A pruning algorithm preserving modeling capabilities for polycrystalline data . Comput Mech 68, 1407–1419 (2021).
<https://doi.org/10.1007/s00466-021-02075-5>
- [2] Daria Mesbah, Henry Proudhon, Lionel Gélébart, David Ryckelynck, Multimodal Super-Resolution for Fast Image-Based Simulation of Crystal Plasticity (2025) under review
- [3] Forest S, Rubin M (2016) A rate-independent crystal plasticity model with a smooth elastic–plastic transition and no slip indeterminacy. Eur J Mech A Solids 55 :278–288
- [4] David Ryckelynck , Fabien Casenave , Nissrine Akkari, Manifold Learning, Model Reduction in Engineering, Springer Nature Switzerland, 2024, SpringerBriefs in Computer Science, [⟨10.1007/978-3-031-52764-7⟩](https://doi.org/10.1007/978-3-031-52764-7)