

DISTANCE AUX STRATES D'ISOTROPIE PAR OPTIMISATION POLYNOMIALE

Perla Azzi

- CFM 2022 -

IMJ PRG - Sorbonne Université, LMPS - ENS Paris-Saclay, 80 prime CNRS

Avec R. Desmorat, B. Kolev, F. Priziac

MOTIVATION MÉCANIQUE

OPTIMISATION POLYNOMIALE

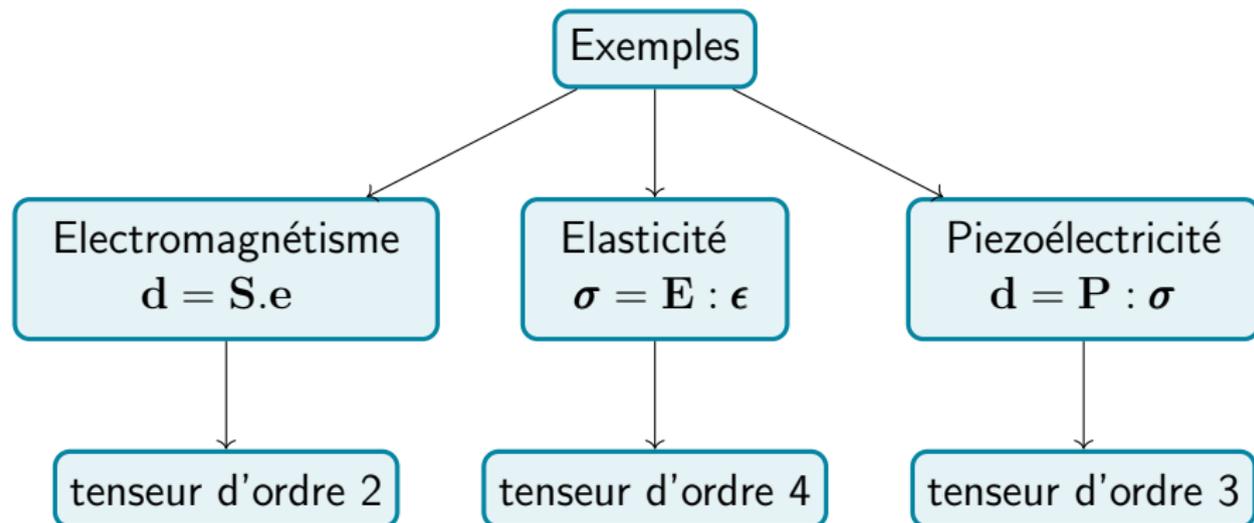
Méthode de Lasserre

APPLICATION NUMÉRIQUE EN MÉCANIQUE

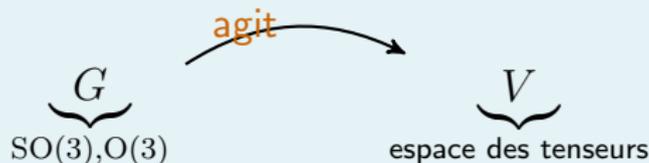
En élasticité

LOI DE COMPORTEMENT ET TENSEURS

L'état mécanique d'un matériau est décrit par des **lois de comportement**, modélisées par des **tenseurs**.



- Un tenseur constitutif mesuré n'a pas de symétrie matérielle mais a une **symétrie attendue**.
- Une question naturelle est de déterminer le tenseur constitutif, avec une symétrie matérielle donnée, le **plus proche** d'un tenseur mesuré.



- **Groupe de symétrie** de \mathbf{T} :

$$G_{\mathbf{T}} = \{g \in G; g \star \mathbf{T} = \mathbf{T}\}.$$

- \mathbf{T}_1 and \mathbf{T}_2 ont même **classe de symétrie** si

$$\exists g; G_{\mathbf{T}_1} = gG_{\mathbf{T}_2}g^{-1}.$$

- **Strate d'isotropie** : L'ensemble de tenseurs ayant même classe de symétrie $[H]$

$$\bar{\Sigma}_{[H]} = \{\mathbf{T} \in V; G_{\mathbf{T}} \supset gHg^{-1}, g \in G\}.$$

DISTANCE AUX STRATES D'ISOTROPIE

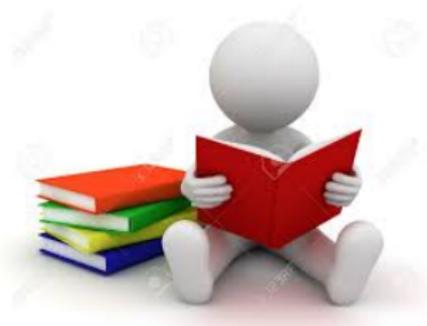
Étant donné un tenseur expérimental \mathbf{T}_0 ayant une symétrie attendue $[H]$, le problème est de déterminer le tenseur le plus proche de \mathbf{T}_0 appartenant à $\bar{\Sigma}_{[H]}$.

La **distance** de \mathbf{T}_0 à la strate d'isotropie $\bar{\Sigma}_{[H]}$ est donnée par :
(Gazis et al 1963, Francois et al 1998)

$$d(\mathbf{T}_0, \bar{\Sigma}_{[H]})^2 = \min_{\mathbf{T} \in \bar{\Sigma}_{[H]}} d(\mathbf{T}_0, \mathbf{T})^2 = \min_{\mathbf{T} \in \bar{\Sigma}_{[H]}} \|\mathbf{T}_0 - \mathbf{T}\|^2.$$

Il suffit de minimiser la fonction polynomiale $\|\mathbf{T}_0 - \mathbf{T}\|^2$ et en déduire le tenseur le plus proche $\mathbf{T}^* \in \bar{\Sigma}_{[H]}$ de \mathbf{T}_0 .

- **Gazis et al 1963** : Notion de distance aux strates d'isotropie.
- **Francois et al (1995,1998), Dellinger et al (1998,2005), Moakher-Norris 2006, Bucataru-Slawinski 2008, Kochetov-Slawinski 2009, Diner et al 2011** :
Paramétrisation des strates par leur formes normales et des rotations par les angles d'Euler (problème non polynomial, minima locaux).



UN PROBLÈME D'OPTIMISATION POLYNOMIALE

Dans les cas étudiés, les strates d'isotropie sont caractérisées par des **équations polynomiales** (Olive et al 2021 en élasticité par exemple).

Le problème est donc réduit à un problème de **minimisation d'une fonction polynomiale** sous des **contraintes polynomiales** :

$$\min_{\mathbf{T} \in \bar{\Sigma}_{[H]}} f(\mathbf{T}); \quad f(\mathbf{T}) = \|\mathbf{T}_0 - \mathbf{T}\|^2,$$

où $\bar{\Sigma}_{[H]} = \{\mathbf{T} \in V; g(\mathbf{T}) \geq 0\}$.

- On a

$$f^* = \inf \{f(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in K\}$$

où $K = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n; g_1(\mathbf{x}) \geq 0, \dots, g_m(\mathbf{x}) \geq 0\}$; f et g_i polynomiales.

- La **méthode de Lasserre** consiste à construire une suite de programmes **semi-définis positifs** (SDP) qui **converge** vers le minimum recherché.
- Un **programme semi-défini positif** est un problème d'optimisation où les contraintes sont données par des matrices semi-définies positives.

CONDITION À VÉRIFIER

Conditions à satisfaire par les contraintes g_1, \dots, g_m :

$$\exists N > 0 \text{ tq } N - \sum_{i=1}^n X_i^2 \in \mathbf{M}(g_1, \dots, g_m)$$

où

$$\mathbf{M}(g_1, \dots, g_m) := \left\{ \sigma_0 + \sum_{i=1}^m \sigma_i g_i; \sigma_0, \dots, \sigma_m \text{ sommes de carrés} \right\}$$

appelé **module quadratique** associé à g_1, \dots, g_m .

Cette condition est appelée **condition Archimédienne**.

FORMULATION EN SDP

$$f^* = \inf \{f(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in K\}$$

$$\rho_d = \inf \{ \langle f, y \rangle; M_{d-v_i}(g_i \cdot y) \succeq 0, i = 0, \dots, m \}$$

- $y = (y_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}^n} \in \mathbb{R}^{\mathbb{N}^n}$;
- $M_{d-v_i}(g_i \cdot y)$ est une matrice symétrique de taille finie dont les coefficients dépendent de g_i , appelée **matrice de moment** ;
- $\succeq 0$ signifie **semi-défini positif** ;
- $\langle f, y \rangle := \sum_{\alpha \in \mathbb{N}^n} f_\alpha y_\alpha$.

La suite $(\rho_d)_d$ est une suite croissante qui converge vers f^* .

APPLICATION : ELASTICITÉ

- Le comportement élastique d'un matériau est décrit par le **tenseur d'élasticité** (en base orthonormée) :

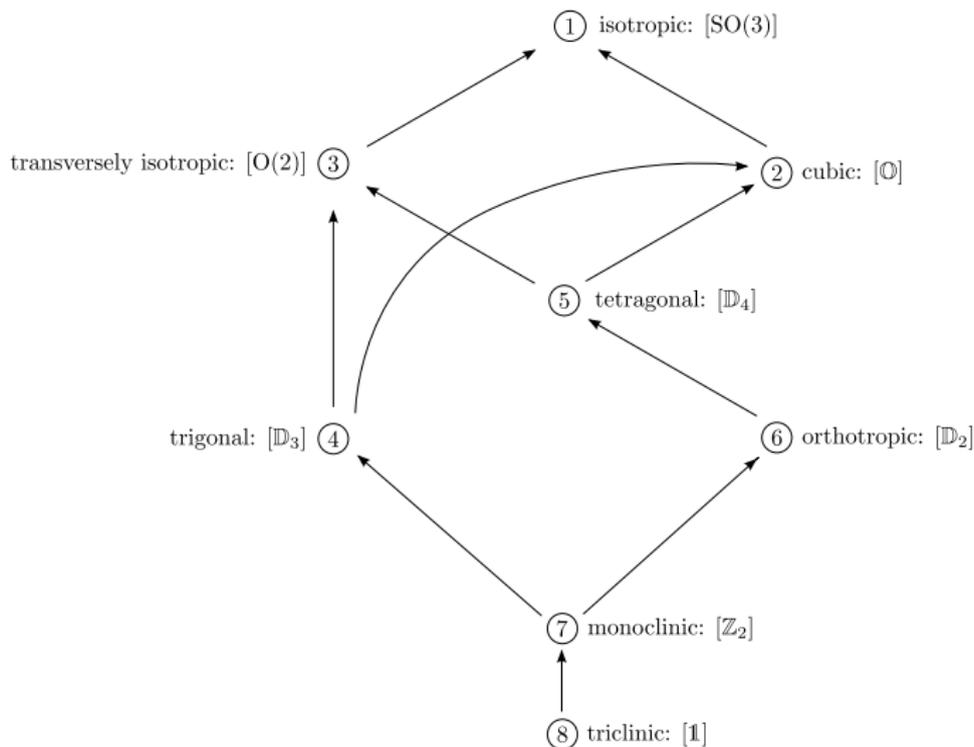
$$\underbrace{\sigma_{ij}}_{\text{tenseur de contraintes}} = E_{ijkl} \underbrace{\epsilon_{kl}}_{\text{tenseur de déformations}}$$

- On note par $\mathbb{E}la$ l'espace vectoriel des tenseurs d'élasticité ($\dim \mathbb{E}la = 21$).
- Un tenseur d'élasticité est représenté par une **matrice symétrique** (en notation de Kelvin)

$$[\mathbf{E}] = \begin{pmatrix} E_{1111} & E_{1122} & E_{1133} & \sqrt{2}E_{1123} & \sqrt{2}E_{1113} & \sqrt{2}E_{1112} \\ E_{1122} & E_{2222} & E_{2233} & \sqrt{2}E_{2223} & \sqrt{2}E_{1223} & \sqrt{2}E_{1222} \\ E_{1133} & E_{2233} & E_{3333} & \sqrt{2}E_{2333} & \sqrt{2}E_{1333} & \sqrt{2}E_{1233} \\ \sqrt{2}E_{1123} & \sqrt{2}E_{2223} & \sqrt{2}E_{2333} & 2E_{2323} & 2E_{2331} & 2E_{2312} \\ \sqrt{2}E_{1113} & \sqrt{2}E_{1223} & \sqrt{2}E_{1333} & 2E_{2331} & 2E_{1313} & 2E_{3112} \\ \sqrt{2}E_{1112} & \sqrt{2}E_{1222} & \sqrt{2}E_{1233} & 2E_{2312} & 2E_{3112} & 2E_{1212} \end{pmatrix}.$$

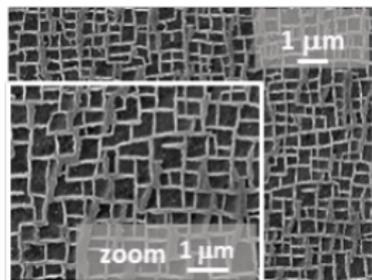
STRATES D'ISOTROPIE EN ÉLASTICITÉ

En élasticité, il y a **8 strates d'isotropie** (Forte-Vianello 1996).



TENSEUR D'ÉLASTICITÉ D'UN MONOCRISTAL À BASE NICKEL

On considère le **tenseur expérimental** \mathbf{E}_0 d'un monocristal à base Nickel (François 1996) :



$$[\mathbf{E}_0] = \begin{pmatrix} 243 & 136 & 135 & 22 & 52 & -17 \\ 136 & 239 & 137 & -28 & 11 & 16 \\ 135 & 137 & 233 & 29 & -49 & 3 \\ 22 & -28 & 29 & 133 & -10 & -4 \\ 52 & 11 & -49 & -10 & 119 & -2 \\ -17 & 16 & 3 & -4 & -2 & 130 \end{pmatrix} \text{ GPa}$$

Question :

Quel est le tenseur cubique le plus proche de \mathbf{E}_0 ?



DÉCOMPOSITION HARMONIQUE

- $\mathbb{E}la$ peut être décomposée en une **somme directe d'espaces irréductibles** (Backus 1970) :

$$\mathbb{E}la = \mathbb{H}^0(\mathbb{R}^3) \oplus \mathbb{H}^0(\mathbb{R}^3) \oplus \mathbb{H}^2(\mathbb{R}^3) \oplus \mathbb{H}^2(\mathbb{R}^3) \oplus \mathbb{H}^4(\mathbb{R}^3),$$

où $\mathbb{H}^n(\mathbb{R}^3)$: espace des tenseurs harmoniques (tenseurs totalement symétriques de trace nulle) d'ordre n .

- $\mathbf{E} \in \mathbb{E}la$ a pour décomposition harmonique :

$$\mathbf{E} = (\lambda, \mu, \mathbf{d}', \mathbf{v}', \mathbf{H})$$

où $\lambda, \mu \in \mathbb{H}^0(\mathbb{R}^3)$, $\mathbf{d}', \mathbf{v}' \in \mathbb{H}^2(\mathbb{R}^3)$ et $\mathbf{H} \in \mathbb{H}^4(\mathbb{R}^3)$.

Theorem (Olive et al 2021) : Soit $\mathbf{E} = (\lambda, \mu, \mathbf{d}', \mathbf{v}', \mathbf{H}) \in \mathbb{E}1a$,

\mathbf{E} est cubique $\iff \mathbf{d}' = \mathbf{v}' = 0$ et $\mathbf{d}'_2 = 0$

où $\mathbf{d}_2 = \mathbf{H}:\mathbf{H}$; $(d_2)_{ij} = \mathbf{H}_{ipqr}\mathbf{H}_{pqrj}$ et $\mathbf{d}'_2 = \mathbf{d}_2 - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{d}_2)\mathbf{1}$.

$$\min_{\mathbf{E}=(\lambda,\mu,\mathbf{d}',\mathbf{v}',\mathbf{H})} \|\mathbf{E}_0 - \mathbf{E}\|^2 \text{ tq } (\mathbf{d}', \mathbf{v}', \mathbf{d}'_2) = 0$$

→ 21 variables

$$\lambda = \lambda_0, \mu = \mu_0, \mathbf{d}' = \mathbf{v}' = 0$$

$$\min_{\mathbf{H}} \|\mathbf{H}_0 - \mathbf{H}\|^2 \text{ tq } \mathbf{d}'_2 = 0$$

→ 9 variables

VÉRIFICATION DE LA CONDITION ARCHIMÉDIENNE

(Jeyakumar–Lasserre–Li 2018) Pour assurer la condition archimédienne sur l'ensemble des contraintes

$$K = \{\mathbf{H}; \mathbf{d}'_2(\mathbf{H}) = 0\},$$

on utilise la **coercivité** de la distance (fonction à minimiser) en ajoutant, à l'ensemble des contraintes K , l'inégalité redondante

$$c - f \geq 0 \text{ avec } c > f(\mathbf{x}_0); \mathbf{x}_0 \in K$$

Une fonction f est coercive si $\lim_{\|\mathbf{x}\| \rightarrow \infty} f(\mathbf{x}) = +\infty$.

RÉSULTAT : GLOPTIPOLY

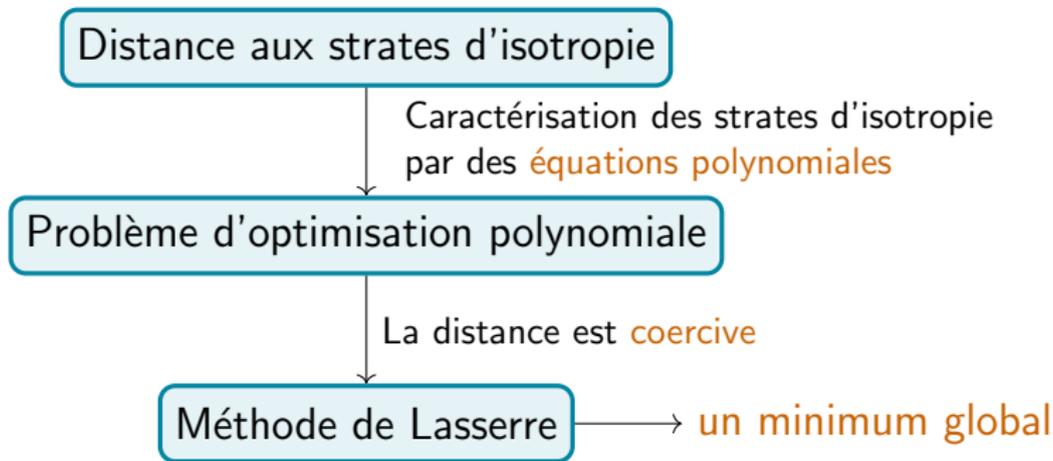
- **Entrée** : **GloptiPoly** prend en entrée la fonction $f(\mathbf{H}) = \|\mathbf{H}_0 - \mathbf{H}\|^2$ et les contraintes

$$c - f(\mathbf{H}) \geq 0, \quad \mathbf{d}'_2 = 0,$$

- **Sortie** : un minimum égal à 2530.474727.
- **Temps de calcul** : 0.1 seconde.
- Le tenseur **cubique le plus proche** de \mathbf{E}_0

$$[\mathbf{E}^*] = \begin{pmatrix} 240.130 & 144.442 & 125.760 & 6.396 & 41.973 & -21.161 \\ 144.442 & 223.956 & 141.934 & -27.780 & 2.277 & 16.604 \\ 125.760 & 141.934 & 242.638 & 21.384 & -44.251 & 4.557 \\ 6.396 & -27.780 & 21.384 & 133.268 & 4.557 & 2.277 \\ 41.973 & 2.277 & -44.251 & 4.557 & 117.093 & 6.396 \\ -21.161 & 16.60 & 4.557 & 2.277 & 6.396 & 135.775 \end{pmatrix} \text{ GPa}$$

- **Distance relative** : $\frac{\|\mathbf{E}_0 - \mathbf{E}^*\|}{\|\mathbf{E}_0\|} = 0.103910.$



Application :

- ① En **élasticité** : monocristal à base Nickel,
- ② En **piezoélectricité** : wurtzite aluminium nitride (preprint Arxiv).



Merci de
votre
attention