# Distance aux classes de symétrie par optimisation polynomiale

*Perla Azzi* (80 prime CNRS)

R.Desmorat, B.Kolev, M.Olive : LMT - ENS Paris-Saclay
J.Grivaux : IMJ PRG - Sorbonne université, F.Priziac : IRMAR - Université Rennes 1

# Plan

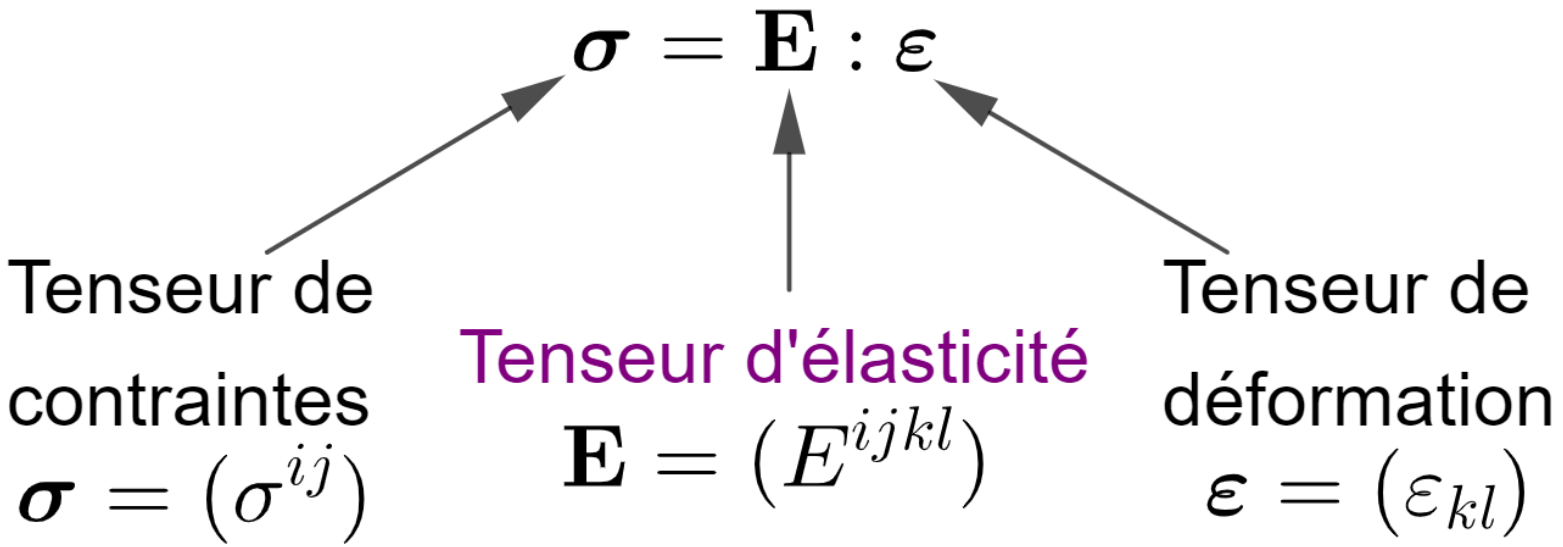

1. Motivation mécanique
2. Formulation mathématique
3. Résultat numérique
   - Par optimisation polynomiale
   - Méthode d'Euler-Lagrange
   - Forme normale
4. Perspectives

# Plan


1. Motivation mécanique
2. Formulation mathématique
3. Résultat numérique
   - Par optimisation polynomiale
   - Méthode d'Euler-Lagrange
   - Forme normale
4. Perspectives

# Élasticité

- Le comportement élastique d'un matériau est donné par le tenseur d'élasticité :



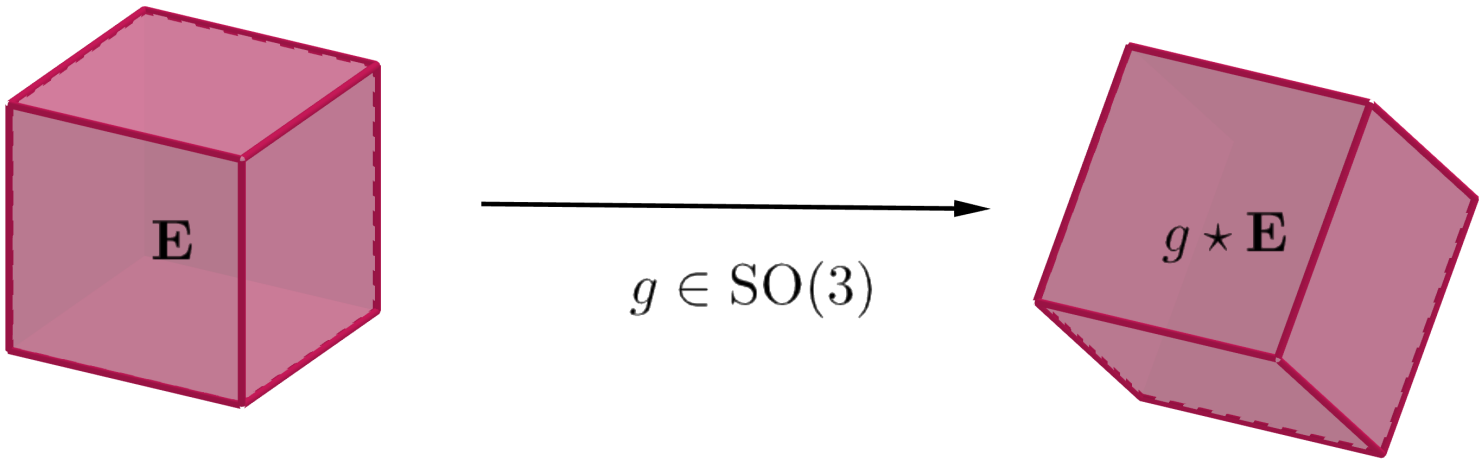

- $\mathbb{Ela} = \{\mathbf{E}$ ordre 4, $E_{ijkl} = E_{jikl} = E_{ijlk} = E_{klij}\}$ espace des tenseurs d'élasticité en 3D (Base orthonormée).

# Action de $\mathrm{SO}(3)$ sur $\mathbb{E}\mathrm{la}$

- $\mathrm{SO}(3)$ : Groupe des rotations en 3D.
- $\mathbb{E}\mathrm{la}$ : Espace vectoriel de dimension 21.

- $\mathrm{SO}(3)$ agit sur $\mathbb{E}\mathrm{la}$ ; $g \in \mathrm{SO}(3), \mathbf{E} \in \mathbb{E}\mathrm{la}$ :

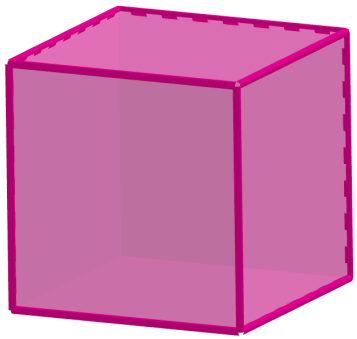
$$(g \star E)_{ijkl} = g_{ip} g_{jq} g_{kr} g_{ls} E_{pqrs}$$



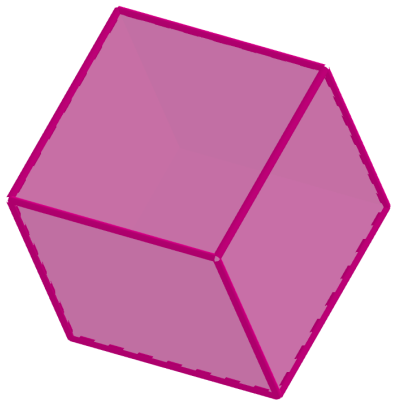
# Matériau = Orbite

- Un matériau n'est pas représenté par un tenseur unique $\mathbf{E}$ mais l'orbite de $\mathbf{E}$ qui est l'ensemble de tenseurs reliés à $\mathbf{E}$ par une rotation :

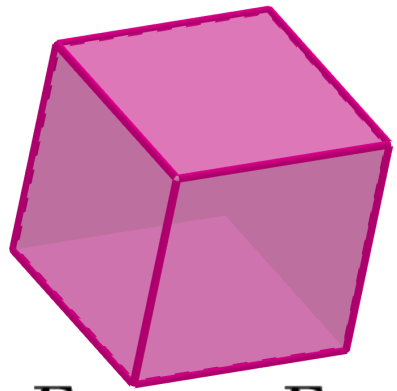
$$Orb(\mathbf{E}) = \{g \star \mathbf{E},\ g \in \mathrm{SO}(3)\}$$



$\mathbf{E}$



$\mathbf{E}_1 = g_1 \star \mathbf{E}$



$\mathbf{E}_2 = g_2 \star \mathbf{E}$

- $\mathbf{E}$, $\mathbf{E}_1$ et $\mathbf{E}_2$ représentent le même matériau et appartiennent tous à la même orbite.

# Classe de symétrie

- Groupe de symétrie de $\mathbf{E}$ :

$$G_{\mathbf{E}} = \{g \in \mathrm{SO}(3);\ g \star \mathbf{E} = \mathbf{E}\}$$

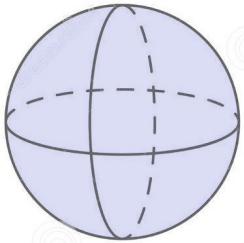
- $\mathbf{E}_1$ et $\mathbf{E}_2$ ont la même classe de symetrie si

$$\exists g;\ G_{\mathbf{E}_1} = g G_{\mathbf{E}_2} g^{-1}$$

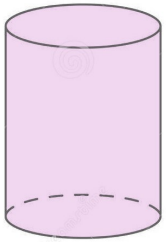
- Strate d'isotropie : L'ensemble des tenseurs ayant la même classe de symétries :

$$\Sigma_{[H]} = \left\{\mathbf{E} \in \mathbb{E}\mathrm{la};\ G_{\mathbf{E}} = gHg^{-1}, g \in \mathrm{SO}(3)\right\}$$

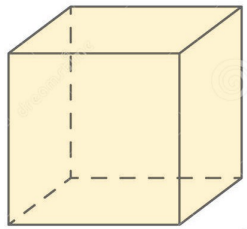
# 8 classes de symétrie (Forte Vianello 1996)



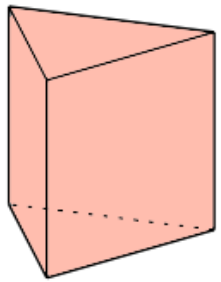
(a) Isotrope
$[\mathrm{SO}(3)]$



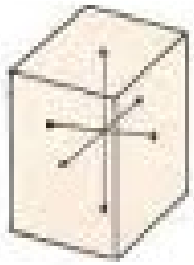
(b) Isotrope transverse
$[\mathrm{O}(2)]$



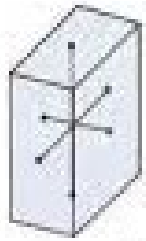
(c) Cubique
$[\mathbb{O}]$



(d) Trigonal
$[\mathbb{D}_3]$



(e) Tetragonal
$[\mathbb{D}_4]$



(f) Orthotrope
$[\mathbb{D}_2]$



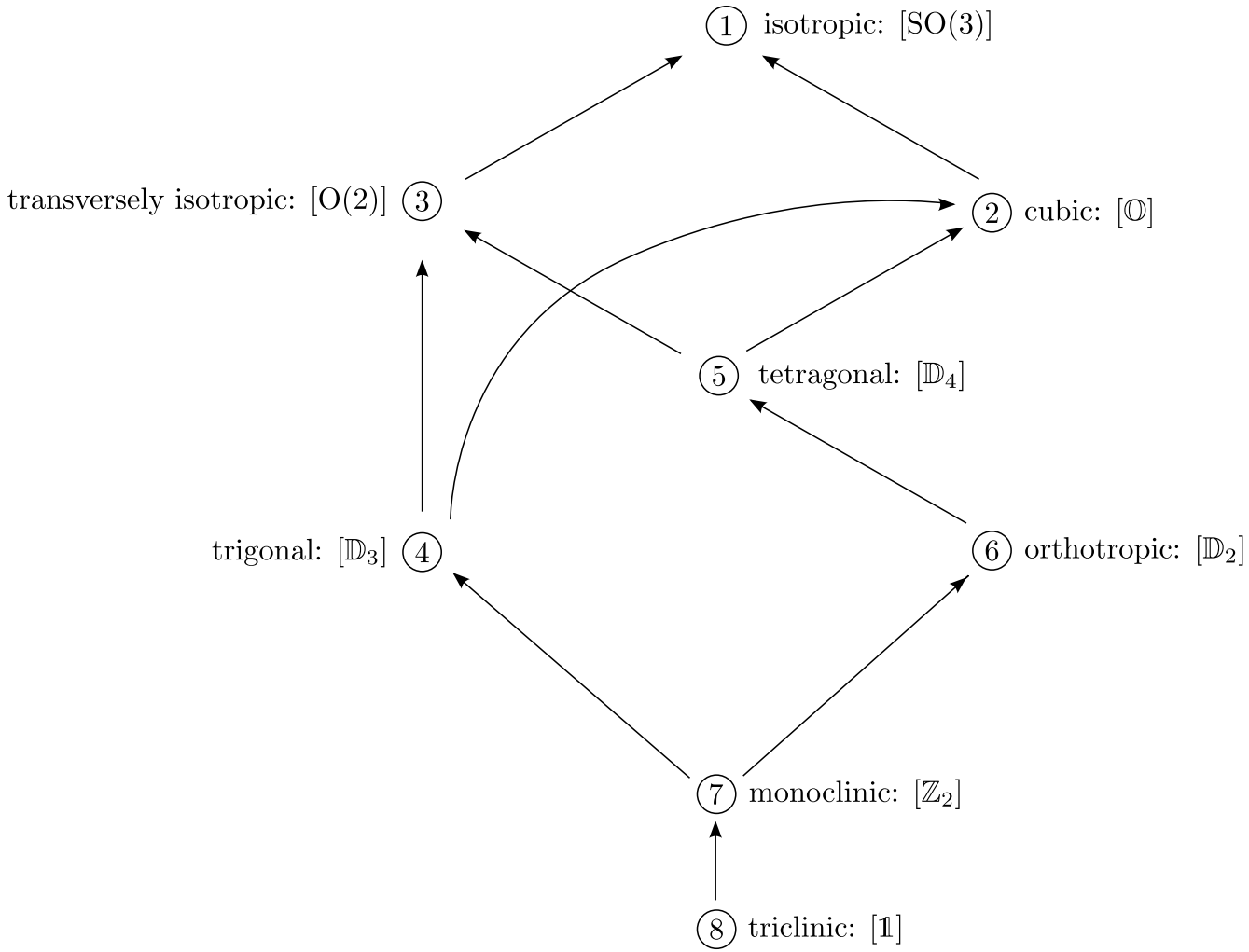
(g) Monoclinique
$[\mathbb{Z}_2]$

Pas de symétrie

(h) Triclinique $[\mathbb{1}]$

# Stratification

- Strate fermée $\overline{\Sigma}_{[H]}$ : Ensemble de tenseurs qui ont au moins la symétrie du groupe $H$.



# Problématique

- Un tenseur expérimental (mesuré) $\mathbf{E}_{\text{exp}}$ est généralement triclinique (sans symmétrie).
- Un tenseur expérimental donné $\mathbf{E}_{\text{exp}}$ associé à un matériau a une symmetrie attendue (par exemple cubique).

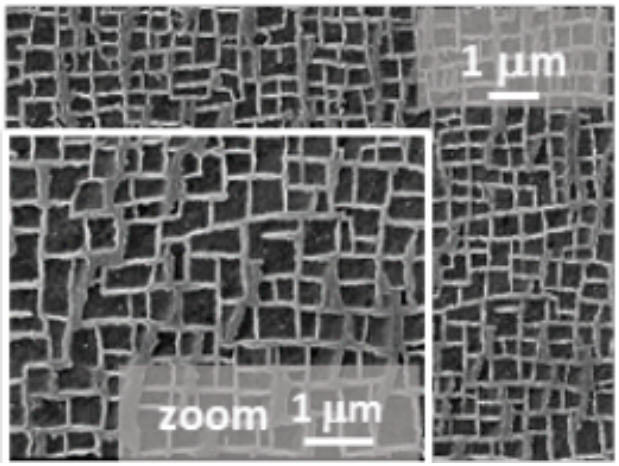



Figure – Microstructure du CMSX-4 : monocristal base Nickel (Mattiello et al 2018)

**Question :**

- Quel est le tenseur $\mathbf{E}$, ayant une classe de symétrie donnée, le plus proche du tenseur $\mathbf{E}_{\text{exp}}$ ?

# Plan


1. Motivation mécanique
2. Formulation mathématique
3. Résultat numérique
   - Par optimisation polynomiale
   - Méthode d'Euler-Lagrange
   - Forme normale
4. Perspectives

# Formulation mathématique

- $\mathbf{E} \in \mathbb{E}\mathrm{la}$ est représenté par :

$$\begin{pmatrix} E_{1111} & E_{1122} & E_{1133} & E_{1123} & E_{1113} & E_{1112} \\ E_{1122} & E_{2222} & E_{2233} & E_{2223} & E_{1223} & E_{1222} \\ E_{1133} & E_{2233} & E_{3333} & E_{2333} & E_{1333} & E_{1233} \\ E_{1123} & E_{2223} & E_{2333} & E_{2323} & E_{2331} & E_{2312} \\ E_{1113} & E_{1223} & E_{1333} & E_{2331} & E_{1313} & E_{3112} \\ E_{1112} & E_{1222} & E_{1233} & E_{2312} & E_{3112} & E_{1212} \end{pmatrix}$$

- Soit $\mathbf{E}_{\text{exp}} \in \mathbb{E}\mathrm{la}$ un tenseur expérimental et $\Sigma$ une strate d'isotropie.
  - Calculer la distance entre $\mathbf{E}_{\text{exp}}$ et $\Sigma$ :

$$d(\mathbf{E}_{\text{exp}}, \Sigma)^2 = \min_{\mathbf{E} \in \Sigma} d(\mathbf{E}_{\text{exp}}, \mathbf{E})^2 = \min_{\mathbf{E} \in \Sigma} ||\mathbf{E}_{\text{exp}} - \mathbf{E}||^2$$

  - Trouver le tenseur le plus proche dans $\Sigma$ à $\mathbf{E}_{\text{exp}}$ :

$$\mathbf{E}_c = \underset{\mathbf{E} \in \Sigma}{\text{argmin}} \left( ||\mathbf{E}_{\text{exp}} - \mathbf{E}||^2 \right)$$



# Les strates sont algébriques

## Cas des tenseurs d'ordre 2

Les strates d'isotropie des tenseurs symétriques d'ordre 2 à trace nulle sont données par des équations polynomiales :

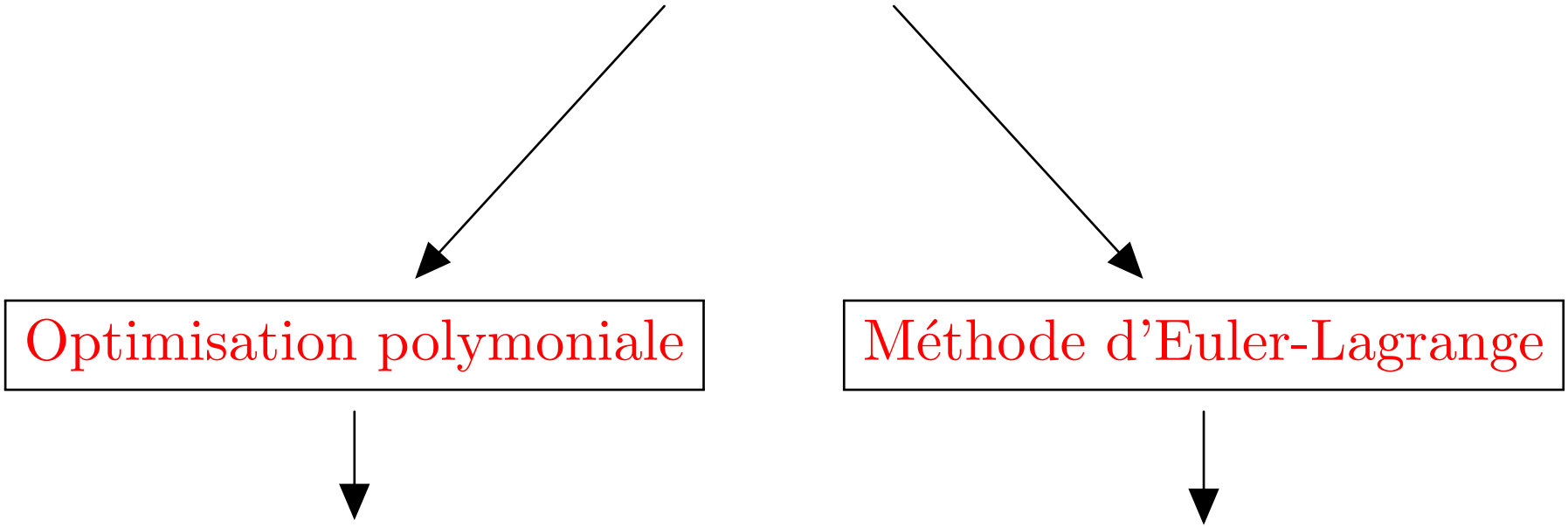
$$\mathbf{a} \text{ est isotrope transverse } \iff (\operatorname{tr} \mathbf{a}^2)^3 - 3(\operatorname{tr} \mathbf{a}^3)^2 = 0$$

## Cas des tenseurs d'élasticité (Olive et al 2018)

Les strates d'isotropie des tenseurs d'élasticité sont décrites par des équations polynomiales.

# Méthodes de résolution

Trouver le minimum d'une fonction polynomiale sous contraintes polynomiales




Existence d'algorithmes de résolution

Résolutions d'un système de $n$ équations polynomiales à $n$ variables

# Un peu de biblio

- Gazis et al 1963 : Notion de distance aux classes de symétrie.
- François et al (1995, 1996, 1998) :
  - Analyse des symmétries d'un tenseur d'élasticité : Figures de pôle se basant sur les plans de symmétrie
  - Tenseur le plus proche : Minimisation par la méthode de simplex, paramétrage par les angles d'Euler, méthode itérative dont le point de départ est déduit des figures de pôle

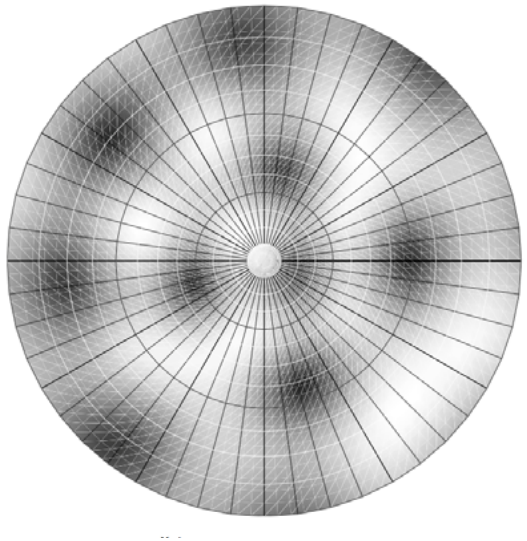
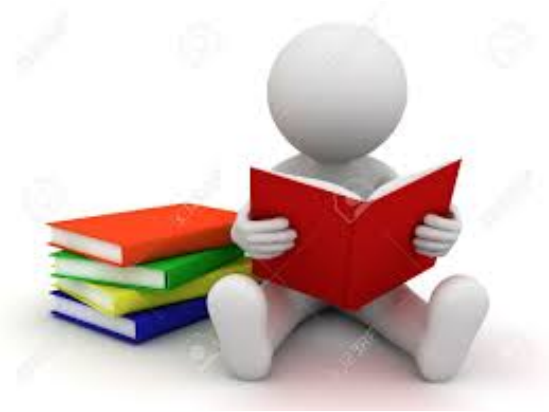


Figure de pôle cubique

- Cohin-Mehrabadi 1987, Kochetov-Slawinski-Diner 2011 : Considèrent le graphe de la distance monoclinique qui s'annule dans la direction des normales aux plans de symétries
- Moakher and Norris 2006, Bucataru-Slawinski 2008, Kochetov-Slawinski 2009 : Différentes definitions de distances (Euclidienne, Logarithmique, Riemanienne) pour résoudre le problème.



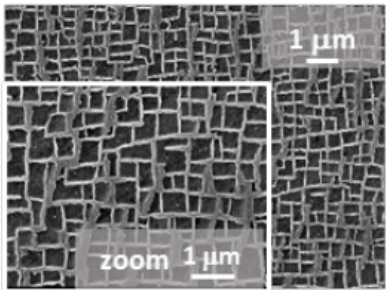
- Bona et al 2007 : Caractérisation des classes de symétrie indépendemment de l'orientation du tenseur (conditions suffisantes)
- Olive et al 2018 : Caractérisation des strates d'isotropie en utilisant des polynômes covariants (conditions nécessaires et suffisantes)

# Plan


1. Motivation mécanique
2. Formulation mathématique
3. Résultat numérique
   - Par optimisation polynomiale
   - Méthode d'Euler-Lagrange
   - Forme normale
4. Perspectives

# Tenseur d'elasticité d'un monocristal base Nickel

On considère le tenseur expérimental $\mathbf{E}_{\text{exp}}$ ( en notation de voigt) d'un monocristal base Nickel (François 1996) :




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

**Question :**

Quel est le tenseur cubique le plus proche de $\mathbf{E}_{\text{exp}}$ ?



# Décomposition harmonique

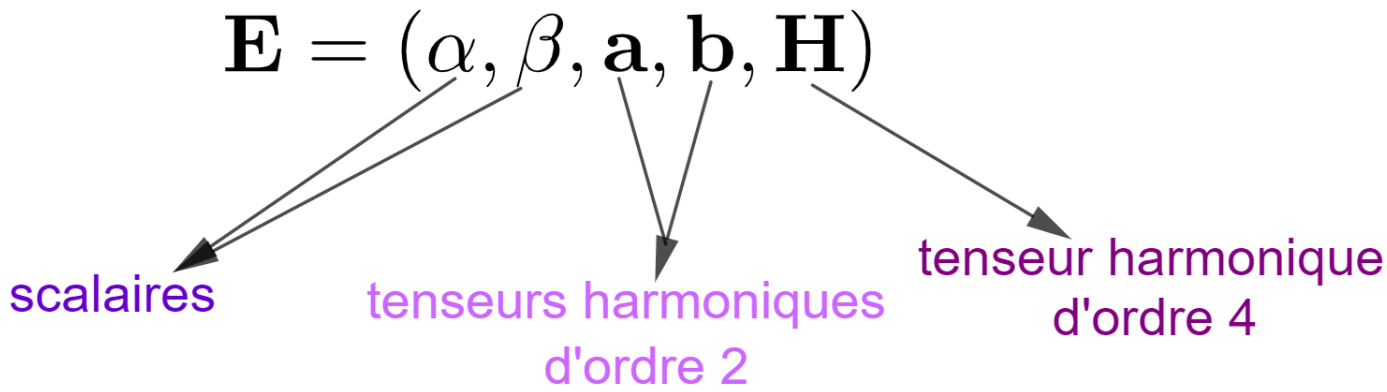
- Une décomposition harmonique explicite de $\mathbb{E}\mathrm{la}$ (Backus 1970) :

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

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

- $\mathbf{E} \in \mathbb{E}\mathrm{la}$ s'écrit :

$$\mathbf{E} = (\alpha, \beta, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{H})$$



# Extraction des composantes harmoniques

- On peut extraire les composantes harmoniques de $\mathbf{E} \in \mathbb{E}\mathrm{la}$ (Olive et al 2017) :

$$\mathbf{E} = \alpha \mathbb{1} \underset{(4)}{\otimes} \mathbb{1} + \beta \mathbb{1} \underset{(2,2)}{\otimes} \mathbb{1} + \mathbb{1} \underset{(4)}{\otimes} \mathbf{a} + \mathbb{1} \underset{(2,2)}{\otimes} \mathbf{b} + \mathbf{H}$$

où

  - $\alpha = \frac{1}{15}(\mathrm{tr}(\mathbf{d}) + 2\,\mathrm{tr}(\mathbf{v}))$
  - $\beta = \frac{1}{6}(\mathrm{tr}(\mathbf{d}) - \mathrm{tr}(\mathbf{v}))$
  - $\mathbf{a} = \frac{2}{7}(\mathbf{d}' + 2\mathbf{v}')$
  - $\mathbf{b} = 2(\mathbf{d}' - \mathbf{v}')$

- Les composantes harmoniques de $\mathbf{E} \in \mathbb{E}\mathrm{la}$ :

$$\mathbf{E} = \alpha \mathbb{1} \underset{(4)}{\otimes} \mathbb{1} + \beta \mathbb{1} \underset{(2,2)}{\otimes} \mathbb{1} + \mathbb{1} \underset{(4)}{\otimes} \mathbf{a} + \mathbb{1} \underset{(2,2)}{\otimes} \mathbf{b} + \mathbf{H}$$

où

- $(\mathbf{a} \underset{(4)}{\otimes} \mathbf{b})_{ijkl} = \frac{1}{6}(a_{ij}b_{kl} + b_{ij}a_{kl} + a_{ik}b_{jl} + b_{ik}a_{jl} + a_{il}b_{jk} + b_{il}a_{jk})$
- $(\mathbf{a} \underset{(2,2)}{\otimes} \mathbf{b})_{ijkl} = \frac{1}{6}(2a_{ij}b_{kl} + 2b_{ij}a_{kl} - a_{ik}b_{jl} - a_{il}b_{jk} - b_{ik}a_{jl} - b_{il}a_{jk})$
- $\mathbf{d}$ tenseur de dilatation : $\mathbf{d} = \mathrm{tr}_{12}\,\mathbf{E} = E_{kkij}$ et $\mathbf{d}'$ sa partie déviatorique $\left(\mathbf{d}' = \mathbf{d} - \frac{1}{3}\,\mathrm{tr}(\mathbf{d})\mathbb{1}\right)$
- $\mathbf{v}$ tenseur de voigt :$\mathbf{v} = \mathrm{tr}_{13}\,\mathbf{E} = E_{kikj}$ et $\mathbf{v}'$ sa partie déviatorique.

# Composantes de $\mathbf{E}_{\text{exp}}$

- $\alpha_{\text{exp}} = \frac{4489}{15}$ et $\beta_{\text{exp}} = \frac{26}{3}$
- $\mathbf{a}_{\text{exp}} = \begin{pmatrix} \frac{10}{21} & -\frac{40}{7} & \frac{24}{7} \\ -\frac{40}{7} & \frac{118}{21} & 6 \\ \frac{24}{7} & 6 & -\frac{128}{21} \end{pmatrix}$ GPa et $\mathbf{b}_{\text{exp}} = \begin{pmatrix} \frac{28}{3} & 26 & 30 \\ 26 & -\frac{44}{3} & 48 \\ 30 & 48 & \frac{16}{3} \end{pmatrix}$ GPa
- $[\mathbf{H}_{\text{exp}}] = \begin{pmatrix} \frac{-1986}{35} & \frac{1093}{35} & \frac{893}{35} & 5 & \frac{352}{7} & -\frac{99}{7} \\ \frac{1093}{35} & -\frac{2306}{35} & \frac{1213}{35} & -31 & \frac{3}{7} & \frac{132}{7} \\ \frac{893}{35} & \frac{1213}{35} & -\frac{2106}{35} & 26 & -\frac{355}{7} & -\frac{33}{7} \\ 5 & -31 & 26 & \frac{1213}{35} & -\frac{33}{7} & \frac{3}{7} \\ \frac{352}{7} & \frac{3}{7} & -\frac{355}{7} & -\frac{33}{7} & \frac{893}{35} & 5 \\ -\frac{99}{7} & \frac{132}{7} & -\frac{33}{7} & \frac{3}{7} & 5 & \frac{1093}{35} \end{pmatrix}$ GPa

# Caractérisation de la classe cubique

## Olive et al 2018

Soit $\mathbf{E} = (\alpha, \beta, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{H}) \in \mathbb{E}\mathrm{la}$.

$$\mathbf{E} \in \overline{\Sigma}_{[\mathbb{O}]} \iff \mathbf{a} = \mathbf{b} = 0 \text{ et } \mathbf{d}_2' = 0$$

où $\mathbf{d}_2 = \mathbf{H}\vdots\mathbf{H}$ soit $(d_2)_{ij} = \mathbf{H}_{ipqr}\mathbf{H}_{pqrj}$ et $\mathbf{d}_2' = \mathbf{d}_2 - \frac{1}{3}\,\mathrm{tr}(\mathbf{d}_2)\mathbb{1}$

# Equations de la strate cubique

$\mathbf{H}$ a 9 variables indépendantes et est représenté par la matrice suivante :

$$[\mathbf{H}] = \begin{pmatrix} \Lambda_2+\Lambda_3 & -\Lambda_3 & -\Lambda_2 & -X_1 & Y_1+Y_2 & -Z_2 \\ -\Lambda_3 & \Lambda_3+\Lambda_1 & -\Lambda_1 & -X_2 & -Y_1 & Z_1+Z_2 \\ -\Lambda_2 & -\Lambda_1 & \Lambda_1+\Lambda_2 & X_1+X_2 & -Y_2 & -Z_1 \\ -X_1 & -X_2 & X_1+X_2 & -\Lambda_1 & -Z_1 & -Y_1 \\ Y_1+Y_2 & -Y_1 & -Y_2 & -Z_1 & -\Lambda_2 & -X_1 \\ -Z_2 & Z_1+Z_2 & -Z_1 & -Y_1 & -X_1 & -\Lambda_3 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{d}_2' = \begin{pmatrix} \frac{2}{3}(2Z_2^2+2\Lambda_3^2+X_1^2+2\Lambda_2^2+Y_1^2-2Z_1^2+2Y_2^2-4X_2^2-4\Lambda_1^2 \\ -\Lambda_1\Lambda_2-4X_1X_2-\Lambda_3\Lambda_1+2\Lambda_2\Lambda_3+5Y_1Y_2-Z_1Z_2) & 4\Lambda_1Z_1+\Lambda_1Z_2+3\Lambda_2Z_1-\Lambda_2Z_2 & 3\Lambda_1Y_1-\Lambda_1Y_2-2\Lambda_2Y_1+4\Lambda_3Y_1 \\ & -2\Lambda_3Z_1+3X_1Y_1-4X_1Y_2+3X_2Y_1-X_2Y_2 & +\Lambda_3Y_2+3X_1Z_1+3X_1Z_2-4X_2Z_1-X_2Z_2 \\ 4\Lambda_1Z_1+\Lambda_1Z_2+3\Lambda_2Z_1-\Lambda_2Z_2 & \frac{2}{3}(5Z_1Z_2-\Lambda_1\Lambda_2+2\Lambda_3\Lambda_1-X_1X_2-\Lambda_2\Lambda_3-4Y_1Y_2+2Z_2^2 & -2\Lambda_1X_1+4\Lambda_2X_1+\Lambda_2X_2+3\Lambda_3X_1 \\ -2\Lambda_3Z_1+3X_1Y_1-4X_1Y_2+3X_2Y_1-X_2Y_2 & +2\Lambda_3^2-2X_1^2-4\Lambda_2^2+Y_1^2+Z_1^2-4Y_2^2+2X_2^2+2\Lambda_1^2) & -\Lambda_3X_2+3Y_1Z_1-4Y_1Z_2+3Y_2Z_1-Y_2Z_2 \\ 3\Lambda_1Y_1-\Lambda_1Y_2-2\Lambda_2Y_1+4\Lambda_3Y_1 & -2\Lambda_1X_1+4\Lambda_2X_1+\Lambda_2X_2+3\Lambda_3X_1 & \frac{2}{3}(-4Z_2^2-4\Lambda_3^2+X_1^2+2\Lambda_2^2-2Y_1^2+Z_1^2+2Y_2^2+2X_2^2 \\ +\Lambda_3Y_2+3X_1Z_1+3X_1Z_2-4X_2Z_1-X_2Z_2 & -\Lambda_3X_2+3Y_1Z_1-4Y_1Z_2+3Y_2Z_1-Y_2Z_2 & +2\Lambda_1^2+2\Lambda_1\Lambda_2+5X_1X_2-\Lambda_3\Lambda_1-\Lambda_2\Lambda_3-Y_1Y_2-4Z_1Z_2) \end{pmatrix}$$

Matrice symétrique de dimension 3 à trace nulle:

$\mathbf{d}_2' = 0 \implies$ 5 équations

# Plan


1. Motivation mécanique
2. Formulation mathématique
3. Résultat numérique
   - Par optimisation polynomiale
   - Méthode d'Euler-Lagrange
   - Forme normale
4. Perspectives

# Optimisation polynomiale

- L'optimisation polynomiale consiste à trouver l'extremum global d'une fonction polynomiale soumis à des contraintes polynomiales.

- Avantages :
  - ✓ Existence de logiciels (Par exemple GloptiPoly (Lasserre-Henrion 2008))
  - ✓ Permet d'atteindre un minimum global
  - ✓ Permet d'obtenir les minimisants

# Réduction du problème

- Fonction à minimiser :

$$f = || \underbrace{(\alpha_{\text{exp}}, \beta_{\text{exp}}, \mathbf{a}_{\text{exp}}, \mathbf{b}_{\text{exp}}, \mathbf{H}_{\text{exp}})}_{\mathbf{E}_{\text{exp}}} - \underbrace{(\alpha, \beta, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{H})}_{\mathbf{E}} ||^2$$

- On réduit le nombre de variables de 21 (composantes de $\mathbf{E}$) à 9 (composantes de $\mathbf{H}$) :

$$\begin{cases} \alpha = \alpha_{\text{exp}} \\ \beta = \beta_{\text{exp}} \\ \mathbf{a} = \mathbf{b} = 0 \end{cases} \Longrightarrow f = ||\mathbf{H}_{\text{exp}} - \mathbf{H}||^2 + ||\mathbb{1} \underset{(4)}{\otimes} \mathbf{a}_{\text{exp}} + \mathbb{1} \underset{(2,2)}{\otimes} \mathbf{b}_{\text{exp}}||^2$$

- Le problème d'optimisation devient :

$$\min_{\mathbf{d}_2'=0} ||\mathbf{H}_{\text{exp}} - \mathbf{H}||^2 \text{ avec } \mathbf{d}_2 = \mathbf{H} \vdots \mathbf{H}$$

# Résultat

- Le tenseur d'élasticité cubique le plus proche à $\mathbf{E}_{\text{exp}}$ (Gloptipoly) :

$$[\mathbf{E}_c] = \begin{pmatrix} 240.13 & 144.44 & 125.76 & 6.39 & 41.97 & -21.16 \\ 144.44 & 223.95 & 141.93 & -27.78 & 2.27 & 16.60 \\ 125.76 & 141.93 & 242.63 & 21.38 & -44.25 & 4.55 \\ 6.39 & -27.78 & 21.38 & 133.26 & 4.55 & 2.27 \\ 41.97 & 2.27 & -44.25 & 4.55 & 117.09 & 6.39 \\ -21.16 & 16.60 & 4.55 & 2.27 & 6.39 & 135.77 \end{pmatrix}$$

- $\frac{||\mathbf{E}_{\text{exp}} - \mathbf{E}_c||}{||\mathbf{E}_{\text{exp}}||} = 0.10391$

- $\mathbf{d}_2' = \begin{pmatrix} -1.8459.10^{-6} & -7.0523.10^{-6} & -9.5928.10^{-6} \\ -7.0523.10^{-6} & -6.8680.10^{-6} & 7.1824.10^{-6} \\ -6.8680.10^{-6} & 7.1824.10^{-6} & 8.7139.10^{-6} \end{pmatrix}$

# Plan


1. Motivation mécanique
2. Formulation mathématique
3. Résultat numérique
   - Par optimisation polynomiale
   - Méthode d'Euler-Lagrange
   - Forme normale
4. Perspectives

# Méthode d'Euler-Lagrange

- Problème avec contraintes:

$$\min_{\mathbf{E}} \quad ||\mathbf{E}_{\text{exp}} - \mathbf{E}||^2 \quad \text{tq} \quad (\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{d}'_2) = 0$$

$(\alpha_{\text{exp}}, \beta_{\text{exp}}, \mathbf{a}_{\text{exp}}, \mathbf{b}_{\text{exp}}, \mathbf{H}_{\text{exp}})$ $\qquad$ $(\alpha, \beta, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{H})$

- Problème sans contraintes:

$$\min_{(\mathbf{E},\lambda)} \quad ||\mathbf{E}_{\text{exp}} - \mathbf{E}||^2 + (\lambda, \mathbf{p})$$

multiplicateur de Lagrange $(\lambda_{\mathbf{a}}, \lambda_{\mathbf{b}}, \lambda_{\mathbf{d}})$ $\qquad$ $(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{d}'_2)$

# Equations d'Euler-Lagrange

- $F(\mathbf{E}, \lambda) := \underbrace{||\mathbf{E}_{\text{exp}} - \mathbf{E}||^2}_{f(\mathbf{E})} + \underbrace{\lambda_{\mathbf{a}} : \mathbf{a} + \lambda_{\mathbf{b}} : \mathbf{b} + \lambda_{\mathbf{d}} : \mathbf{d}'_2}_{(\lambda, \mathbf{p})}$

  où $f(\mathbf{E}) = ||(\alpha_{\text{exp}} - \alpha, \beta_{\text{exp}} - \beta, \mathbf{a}_{\text{exp}} - \mathbf{a}, \mathbf{b}_{\text{exp}} - \mathbf{b}, \mathbf{H}_{\text{exp}} - \mathbf{H})||^2$

- Dérivées partielles de $F$ : $\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{E}} + \lambda \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{E}} = 0 \\ \\ \frac{\partial F}{\partial \lambda} = \mathbf{p} = 0 \end{cases}$

  - $\frac{\partial F}{\partial \alpha} = 0$ et $\frac{\partial F}{\partial \beta} = 0 \implies \boxed{\alpha_{\text{exp}} = \alpha}$ et $\boxed{\beta_{\text{exp}} = \beta}$
  - $\frac{\partial F}{\partial \lambda_{\mathbf{a}}} = 0$ et $\frac{\partial F}{\partial \lambda_{\mathbf{b}}} = 0 \implies \boxed{\mathbf{a} = \mathbf{b} = 0}$
  - $\frac{\partial F}{\partial \mathbf{H}} = 0 \implies \boxed{\mathbf{H}_{\text{exp}} - \mathbf{H} + \mathbf{S}' = 0}$ avec $\mathbf{S}'$ la partie déviatorique de $\mathbf{S} := (\lambda_{\mathbf{d}}.\mathbf{H})^s$
  - $\frac{\partial F}{\partial \lambda_{\mathbf{d}}} = 0 \implies \boxed{\mathbf{d}'_2 = 0}$

# Réduction du système

- Le système à résoudre en $\mathbf{H}$ (9 variables) et $\lambda_{\mathbf{d}}$ (5 variables) :

$$\begin{cases} \mathbf{H}_{\text{exp}} - \mathbf{H} + \mathbf{S}' = 0 & \text{9 équations} \quad (1) \\ \mathbf{d}'_2 = 0 & \text{5 équations} \quad (2) \end{cases}$$

- Résolution :
  - En contractant (1) par $\mathbf{H}$ 3 fois à droite et à gauche :

$$\mathbf{H}\!:\!\mathbf{H}_{\text{exp}} - \mathbf{H}_{\text{exp}}\!:\!\mathbf{H} = 0 \quad \text{3 équations linéaires}$$

  - En contractant (1) par $\mathbf{H}$ 4 fois :

$$< \mathbf{H} - \mathbf{H}_{\text{exp}}, \mathbf{H} >= 0 \quad \text{1 équation quadratique}$$

# Résultat

- Le système devient en $\mathbf{H}$ (9 variables) :

$$\begin{cases} \mathbf{H} \vdots \mathbf{H}_{\text{exp}} - \mathbf{H}_{\text{exp}} \vdots \mathbf{H} = 0 & \text{3 équations linéaires} \\ < \mathbf{H} - \mathbf{H}_{\text{exp}}, \mathbf{H} >= 0 & \text{1 équation quadratique} \\ \mathbf{d}_2' = 0 & \text{5 équations quadratiques} \end{cases}$$

- Résolution du système avec les bases de Grobner :

$$[\mathbf{E}_c] = \begin{pmatrix} 240.13 & 144.44 & 125.76 & 6.39 & 41.97 & -21.16 \\ 144.44 & 223.95 & 141.93 & -27.78 & 2.27 & 16.60 \\ 125.76 & 141.93 & 242.63 & 21.38 & -44.25 & 4.55 \\ 6.39 & -27.78 & 21.38 & 133.26 & 4.55 & 2.27 \\ 41.97 & 2.27 & -44.25 & 4.55 & 117.09 & 6.39 \\ -21.16 & 16.60 & 4.55 & 2.27 & 6.39 & 135.77 \end{pmatrix}$$

# Plan


1. Motivation mécanique
2. Formulation mathématique
3. Résultat numérique
   - Par optimisation polynomiale
   - Méthode d'Euler-Lagrange
   - Forme normale
4. Perspectives

# Forme normale

- $H$ sous groupe de $\mathrm{SO}(3)$, l'ensemble de points fixes :

$$\mathrm{Fix}(H) := \{\mathbf{E} \in \mathbb{E}\mathrm{la};\ g \star \mathbf{E} = \mathbf{E}\ \forall g \in H\}$$

- La forme normale de $\mathbf{E}$ est un tenseur tq $g \star \mathbf{E} \in \mathrm{Fix}(H)$ pour $g \in H$
- La forme normale cubique est donnée par (en notation de Voigt) :

$$[\mathbf{E}_{\mathbb{O}}] = \begin{pmatrix} E_{1111} & E_{1112} & E_{1112} & 0 & 0 & 0 \\ E_{1112} & E_{1111} & E_{1112} & 0 & 0 & 0 \\ E_{1112} & E_{1112} & E_{1111} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{1212} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{1212} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{1212} \end{pmatrix}$$

- On appelle une base naturelle de $\mathbf{E}$ la base orthonormée de la forme normale de $\mathbf{E}$.

## Théorème (Abramian et al 2019)

Soit $\mathbf{H}$ un tenseur harmonique cubique d'ordre 4. L'espace de solutions de l'équation

$$\mathrm{tr}(\mathbf{H} \times \mathbf{a}) = 0,$$

où $\mathbf{a}$ est un tenseur symétrique d'ordre 2, est un espace vectoriel de dimension 3. De plus, les tenseurs orthotropes $\mathbf{a}$ sont denses dans l'espace des solutions et une base naturelle de $\mathbf{H}$ est fournie par une base naturelle de $\mathbf{a}$ (vecteurs propres de $\mathbf{a}$).

# Méthode

Pour chercher la forme normale cubique de $\mathbf{E}_c$ :

1. Chercher une base de l'espace de solutions $\mathbf{a}$ de l'équation

$$\mathrm{tr}(\mathbf{H}_c \times \mathbf{a}) = 0,$$

où $\mathbf{H}_c$ est la composante harmonique d'ordre 4 de $\mathbf{E}_c$, qui est de dimension 3.

2. On calcule la rotation $g$ de la forme normale à partir des vecteurs propres de la base obtenue

3. La forme normale est

$$\mathbf{E}_{\mathbb{O}} = g \star \mathbf{E}_c$$

# Forme normale cubique

- La rotation $g$ est

$$\begin{pmatrix} 0.244 & -0.112 & 0.963 \\ 0.966 & 0.111 & -0.232 \\ -0.081 & 0.987 & 0.136 \end{pmatrix}$$

- La forme normale cubique de $\mathbf{E}_c$ en GPa est

$$[\mathbf{E}_{\mathbb{O}}] = \begin{pmatrix} 213.355 & 148.489 & 148.489 & 0 & 0 & 0 \\ 148.489 & 213.355 & 148.489 & 0 & 0 & 0 \\ 148.489 & 148.489 & 213.355 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 139.823 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 139.823 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 139.823 \end{pmatrix}$$

# Plan


1. Motivation mécanique
2. Formulation mathématique
3. Résultat numérique
   - Par optimisation polynomiale
   - Méthode d'Euler-Lagrange
   - Forme normale
4. Perspectives

# Travaux en cours et perspectives

1. Démontrer l'algébricité des strates d'isotropie pour toute représentation d'un groupe compacte sur un espace vectoriel

2. Trouver les classes de symétrie de la loi couplée de piezoéléctricité à l'aide des opérations de clips

3. Appliquer l'optimisation polynomiale pour résoudre le problème de la distance aux autres classes de symétrie notamment les classe orthotrope et isotrope transverse etc...



# Merci de votre attention