

Apprentissage d'une loi de comportement viscoélastique homogénéisée à l'aide d'un réseau de neurones dans le cadre des matériaux standards généralisés

M. Duvillard¹, R. Masson¹

¹ (CEA Cadarache), Saint-Paul-Lès-Durance, marius.duvillard@cea.fr

Résumé — Nous proposons un modèle de réseau de neurones permettant d'apprendre le comportement homogénéisé d'un matériau composite constitué de deux phases viscoélastiques. Le modèle est physiquement augmenté afin de respecter les principes du cadre des matériaux standards généralisés. Les paramètres microstructuraux sont intégrés dans la prédiction de la réponse homogénéisée au moyen d'un réseau de neurones partiellement convexe. Les performances du modèle sont évaluées sur des essais de relaxation générés à partir d'une loi d'homogénéisation formulée sous la forme d'un modèle de Maxwell généralisé. L'étude analyse l'évolution de la dissipation et des variables internes ainsi que la réponse mécanique en fonction de la fraction volumique. Les résultats mettent en évidence la capacité du réseau à restituer fidèlement la réponse mécanique effective en fonction des paramètres de la microstructure tout en garantissant le respect des contraintes physiques.

Mots clés — apprentissage profond, homogénéisation, réseaux de neurones physiquement augmentés, matériaux standards généralisés

1 Introduction

Les réseaux de neurones se sont récemment imposés comme des outils performants pour inférer de manière précise des lois de comportement à partir de données [4]. Une large variété de comportements ont pu être modélisés, en particulier ceux qui dépendent de l'historique de chargement, tels que la viscosité ou la plasticité. Cela est réalisé soit à l'aide de réseaux de neurones récurrents, soit en utilisant directement un formalisme à variables d'histoire et en apprenant leurs lois d'évolution [11]. Cette dernière représentation est aujourd'hui majoritairement utilisée, car elle permet d'imposer des contraintes basées sur la physique, telles que les inégalités de Clausius–Duhem. En particulier, ces conditions sont satisfaites dans le cadre des matériaux standards généralisés (GSM) [7]. L'utilisation de réseaux de neurones convexes par rapport aux données d'entrée (ICNN) permet de définir des architectures de réseaux respectant dans leur structure même les hypothèses d'un GSM [11, 3].

Dans le cas de matériaux microstructurés, le comportement effectif est généralement déterminé à l'aide de méthodes d'homogénéisation. Par exemple, en viscoélasticité linéaire, des méthodes de champ moyen combinées au principe de correspondance permettent de déterminer la réponse macroscopique d'un matériau microstructuré, exprimée sous la forme d'un modèle de Maxwell généralisé [9]. Pour des matériaux plus complexes, la réponse macroscopique peut être approchée par des simulations sur des VER pour un coût de calcul bien plus important. Les réseaux de neurones apparaissent alors comme une méthode efficace pour apprendre cette réponse pour un coût bien moindre. Plusieurs applications d'apprentissage de réseaux de neurones existent sur des VER [6, 10], mais elles considèrent le cas d'une microstructure fixe. Or, la microstructure et les propriétés des phases peuvent évoluer au cours d'une simulation. Certaines approches intègrent la géométrie à l'aide de réseaux de neurones convolutifs ou de graphes [5], tandis que d'autres cherchent directement à apprendre le champ complet [2].

Dans l'étude qui suit, une méthode d'apprentissage est proposée pour obtenir la réponse homogénéisée en fonction des propriétés des phases et des descripteurs de la microstructure. Elle s'inscrit dans le cadre d'une formulation GSM des réseaux de neurones, en apprenant les potentiels d'énergie libre et de dissipation.

Tout d'abord, nous rappellerons en quoi consiste le cadre des matériaux standards généralisés (GSM).

Ensuite, nous présenterons comment un réseau de neurones peut, de manière structurelle, satisfaire aux propriétés physiques et comment définir un modèle viscoélastique. Nous montrerons ensuite comment notre méthode permet de tenir compte des propriétés de la microstructure. Enfin, des résultats seront présentés sur un composite viscoélastique synthétique.

2 Cadre des matériaux standards généralisés

Le cadre des matériaux standards généralisés (GSM), introduit par Halphen et Nguyen [7], offre une description unifiée de comportements dissipatifs variés, tels que la plasticité, la viscoélasticité ou les phénomènes thermo-mécaniques. Les lois constitutives s'obtiennent directement à partir des deux potentiels que sont l'énergie libre $\Psi(\varepsilon, \alpha_i)$ et le potentiel de dissipation $\Phi(\dot{\alpha}_i)$, où α_i sont les variables internes décrivant l'histoire du matériau. La contrainte thermodynamique est définie comme la dérivée de l'énergie libre par rapport à la déformation, et les forces thermodynamiques A_i par rapport aux variables internes :

$$\sigma = \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon}(\varepsilon, \alpha_i), \quad A_i = -\frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_i}.$$

Dans un cadre incrémental, adapté à la résolution numérique, les variables internes au pas de temps $n + 1$ sont déterminées en résolvant

$$\alpha_i^{n+1} = \arg \min_{\alpha_i} \left[\Psi(\varepsilon^{n+1}, \alpha_i) + \Delta t \Phi\left(\frac{\alpha_i - \alpha_i^n}{\Delta t}\right) \right]. \quad (1)$$

Lorsque les deux potentiels Ψ et Φ sont convexes dans leurs arguments respectifs, la dissipation intrinsèque associée au processus d'évolution est automatiquement positive. Dans ce cas, l'inégalité de Clausius–Duhem est vérifiée pour tout processus admissible, garantissant simultanément la stabilité énergétique et la conformité au second principe de la thermodynamique.

3 Réseaux de neurones GSM pour la visco-élasticité

Des réseaux de neurones (NN) peuvent être utilisés dans le cadre des GSM. Deux NN, NN_Ψ et NN_Φ , sont entraînés pour prédire respectivement les potentiels d'énergie libre et de dissipation. Grâce à l'autodifférentiation, les quantités dérivées de ces potentiels, comme les contraintes et les forces thermodynamiques, peuvent être directement calculées. La propriété de convexité peut être imposée à l'aide de réseaux de neurones convexes par rapport aux entrées (ICNN) [1]. Un réseau de neurones est convexe par rapport à ses entrées lorsque :

- les fonctions d'activation sont convexes et non décroissantes;
- chaque coefficient des matrices de poids \mathbf{W}_l est positif.

Ainsi, les activations \mathbf{y}_{l+1} des neurones à la couche $l + 1$ sont obtenues par :

$$\mathbf{y}_{l+1} = g_l(\mathbf{W}_l \mathbf{y}_l + \mathbf{b}_l), \quad l = 0, \dots, k - 1.$$

On utilise généralement la fonction d'activation softplus, $g(x) = \ln(1 + e^x)$, car elle est croissante et infiniment différentiable. Des architectures plus complexes peuvent inclure, à chaque couche, un terme linéaire non contraint $\mathbf{W}_l^0 \mathbf{y}_0$, ainsi qu'un terme quadratique en \mathbf{y}_0 sur la couche finale [8, 12]. L'intégration des variables internes n'est pas explicite mais est le résultat d'un processus itératif. Elle peut être réalisée à partir de couches implicites pour résoudre l'équation incrémentale (1).

Les variables internes α_i ne sont pas connues a priori. Il est possible de réaliser un apprentissage en intégrant le comportement décrit par (NN_Ψ, NN_Φ) sur des séquences de chargement initialisées à zéro. L'apprentissage à partir de données $\mathcal{D} = \left\{ \left\{ (\varepsilon_i^n, \sigma_i^n); n = 1, \dots, N_i \right\} \right\}_{i=1}^M$ peut être effectué en minimisant la fonction de coût :

$$J(\theta_\Psi, \theta_\Phi) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \frac{1}{N_i} \sum_{n=1}^{N_i} \|\sigma_i^n - \hat{\sigma}_i^n\|^2,$$

où $\hat{\sigma}_i^n$ est la contrainte prédite par le modèle au pas n de la séquence i , θ_Ψ et θ_Φ sont les paramètres des potentiels NN_Ψ et NN_Φ respectivement.

FIGURE 1 – Graph

Dans le cas d'un comportement viscoélastique, N_{var} variables internes sont introduites sous la forme de tenseurs symétriques d'ordre deux $\alpha_i \in \text{Sym}(2)$. Nous faisons le choix de conserver un potentiel d'énergie libre à partir de terme quadratique, avec des matrices élastiques isotropes \mathbb{C}_i à déterminer :

$$\Psi(\varepsilon, \alpha_i) = \frac{1}{2} \varepsilon : \mathbb{C}_0 : \varepsilon + \sum_{i=1}^{N_{\text{var}}} \frac{1}{2} (\varepsilon - \alpha_i) : \mathbb{C}_i : (\varepsilon - \alpha_i). \quad (2)$$

Le terme de dissipation prend lui en compte des effets d'interaction non-linéaire entre les variables grâce à un réseau de neurones ICNN dépendant des principaux invariants (I_1, I_2, I_3) tels que :

$$\Phi(\{\dot{\alpha}_i\}) : \dot{\alpha}_i \mapsto \{I_1, I_2, I_3\}_i \mapsto NN_{\Phi}(\{I_1, I_2, I_3\}_i)$$

4 Réseaux de neurones GSM pour des matériaux hétérogènes

Dans un matériau hétérogène périodique, l'homogénéisation vise à déterminer le comportement macroscopique effectif, défini comme la moyenne spatiale des champs locaux de contrainte et de déformation sur un VER ou un volume infiniment grand :

$$\bar{\sigma} = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{|V|} \int_V \sigma(\mathbf{x}), d\mathbf{x}, \quad \bar{\varepsilon} = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{|V|} \int_V \varepsilon(\mathbf{x}), d\mathbf{x}.$$

La relation entre $\bar{\sigma}$ et $\bar{\varepsilon}$ dépend des paramètres de microstructure θ , incluant la géométrie et le comportement des phases. Pour des phases linéairement viscoélastiques, des méthodes classiques comme le principe de correspondance et la relation de Hashin–Shtrikman permettent de déterminer une loi effective de type Maxwell généralisé [9]. L'utilisation de réseaux de neurones permet de prendre en compte des comportements effectifs plus généraux à partir de données, incluant des microstructures complexes ou des non-linéarités.

Dans notre approche, les paramètres de la microstructure θ sont intégrés en conditionnant les potentiels : $\Psi(\varepsilon, \alpha_i; \theta)$ et $\Phi(\dot{\alpha}_i; \theta)$. Pour la forme de l'énergie libre choisie en (2), cela revient à prédire les paramètres des tenseurs \mathbb{C}_i . Nous utiliserons un réseau de neurones dense NN_C afin de prédire les modules (G_i, K_i) . Afin de garantir la positivité de ces grandeurs, une couche d'activation ReLU, $g(x) = \max(0, x)$, est appliquée à la sortie.

Concernant le potentiel de dissipation (3), le réseau de neurones prend comme entrée les invariants des variables internes et les paramètres de microstructure, $(\{I_1, I_2, I_3\}_i, \theta)$. Pour garantir la convexité du potentiel par rapport aux invariants $\{I_1, I_2, I_3\}_i$, un réseau de neurones partiellement convexe (PICNN) est utilisé. Chaque couche du PICNN combine une contribution linéaire sur les invariants convexes \mathbf{y} avec une contribution linéaire libre sur les paramètres non convexes \mathbf{x} , initialisés par $\mathbf{x}_0 = \theta$:

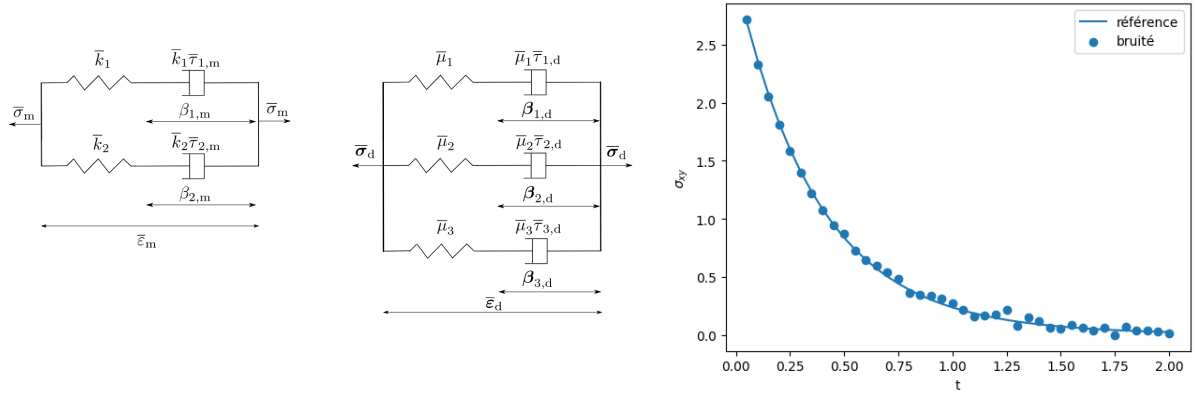
$$\mathbf{x}_{l+1} = g_l^x(\mathbf{W}_l^{xx} \mathbf{x}_l + \mathbf{b}_l^x) \quad l = 0, \dots, k-2, \quad (3)$$

$$\mathbf{y}_{l+1} = g_l^y(\mathbf{W}_l^{yy} \mathbf{y}_l + \mathbf{W}_l^{yx} \mathbf{x}_l + \mathbf{b}_l^y), \quad l = 0, \dots, k-1, \quad (4)$$

où g_l est une fonction d'activation convexe et non décroissante (ex. softplus), \mathbf{W}_l^y est contraint à être positif, \mathbf{y} , et \mathbf{W}_l^x reste libre. Des structures plus riches peuvent être obtenues dans [8, 12]. Le modèle proposé est représenté sur la figure 1.

5 Résultats

Le modèle est entraîné à partir de chargements issus d'une loi homogénéisée d'un matériau à deux phases viscoélastiques linéaires sur la composante déviatorique décrite dans [9]. Elle s'exprime comme un modèle Maxwell généralisé à cinq branches visqueuses comme représenté sur la figure 2a. Dans notre



(a) Modèle rhéologique de Maxwell généralisé utilisé pour représenter la réponse effective d'un composite viscoélastique; D'après [9]. (b) Evolution de la contrainte de cisaillement σ_{xy} pour une déformation imposée $\epsilon_{xy} = \text{cte.}$, avec ou sans bruit.

FIGURE 2 – Modèle de génération de données et exemple de chargement.

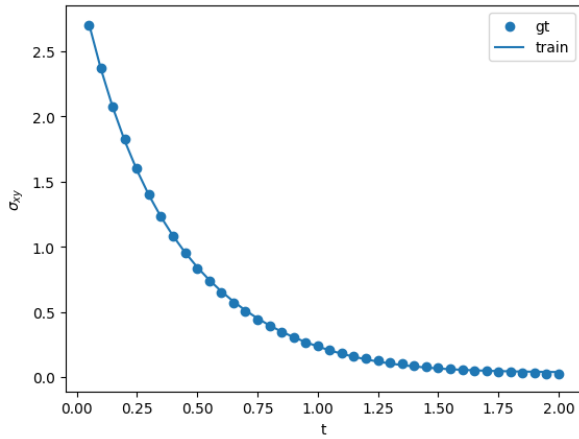
cas, la partie élastique est la même dans les deux phases. Un essai de relaxation sur la composante ϵ_{xy} est réalisé, sollicitant les trois branches visqueuses du modèle Maxwell généralisé. Les contraintes et les déformations sont normalisées et un bruit gaussien est ajouté comme représenté sur la figure 2b. Un ensemble de $M = 40$ séquences sont générées avec le même chargement en faisant varier le paramètre de fraction volumique $f_v \in [0, 1]$ pour des paramètres matériaux fixes de telle sorte que $\theta = [f_v]$.

5.1 Entraînement du réseau de neurones GSM pour des paramètres de microstructure fixes

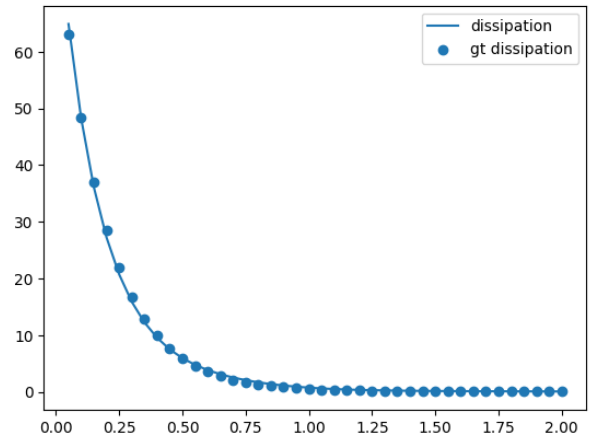
Le modèle est entraîné dans un premier temps pour une fraction volumique fixée afin de vérifier le comportement du réseau de neurones GSM. Le nombre de variables internes est fixé à $N_{var} = 3$ pour correspondre aux 3 branches de la partie déviatorique. Le réseau de neurones NN_{Φ} est un réseau dense avec $[8, 8]$ neurones. La figure 3a montre une bonne correspondance des contraintes prédites avec les données d'entraînement. D'autre part, la dissipation obtenue est positive et est proche de la dissipation théorique à un facteur proportionnel près $k = 1.e - 7$ comme illustré figure 3b. Le coefficient de proportionnalité vient simplement du fait qu'il n'y a pas unicité de la solution (Ψ, Φ) et des variables internes obtenues comme analysé dans [3]. L'évolution de la partie déviatorique des variables internes α_d en figure 4a décrivent effectivement une évolution cohérente à des déformations visqueuses avec des temps de variation plus ou moins long. Les effets visqueux des deux premières branches sont du même ordre avec des modules cisaillement visqueux (pour les données normalisées) de $G_i = [0.17, 0.16, 0.004]$. L'évolution linéaire dans l'échelle log-log en figure 4b permet néanmoins de constater une décroissance en loi de puissance différent d'une loi exponentielle pour un Maxwell. Cette observation peut provenir du fait que NN_{Φ} va faire émerger des variables interne avec des superpositions de multiples temps de relaxation. Une étude plus poussée sur le choix de N_{var} et l'analyse des transformations pour retrouver les variables internes de référence pourrait approfondir cette première analyse.

5.2 Entraînement du réseaux de neurones GSM pour des fractions volumiques variables

Le modèle est ensuite entraîné en tenant compte de f_v . La taille des réseaux est de nouveau choisi arbitrairement avec $[8, 8]$ neurones pour $NN_{\mathbb{C}}$ ainsi que pour la partie non convexe du PICNN défini en équation (3). La première figure 5a représente la relaxation pour les différentes fractions volumiques. Des écarts peuvent apparaître mais on peut constater que les tendances au cours du temps sont cohérentes selon les f_v . Cette tendance est vérifiée également en représentant la contraintes en fonction de la fraction volumique pour différents pas de temps sur la figure 5b. En particulier, pour des temps faibles, on obtient bien une relation linéaire comme attendu. Les plus forts écarts apparaissent principalement dans les zones où f_v est moins échantillonné, comme $f_v = 0.5$, du fait d'un échantillonnage relativement faible.

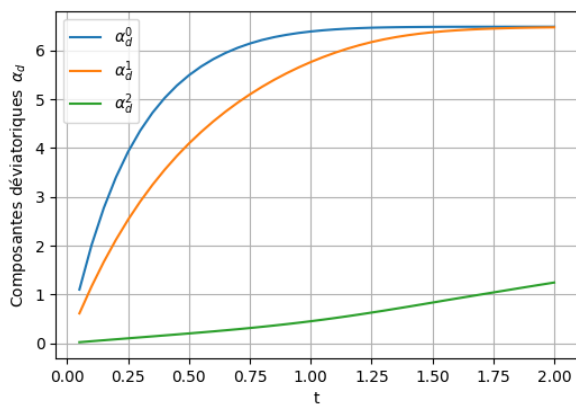


(a) Comparaison des contraintes de cisailment effective prédite et sur les données d'entraînement

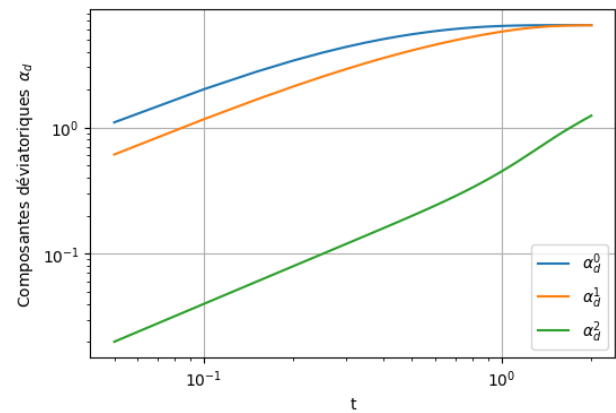


(b) Dissipation

FIGURE 3 – Résultat de l'apprentissage du modèle pour un chargement à f_v fixé.

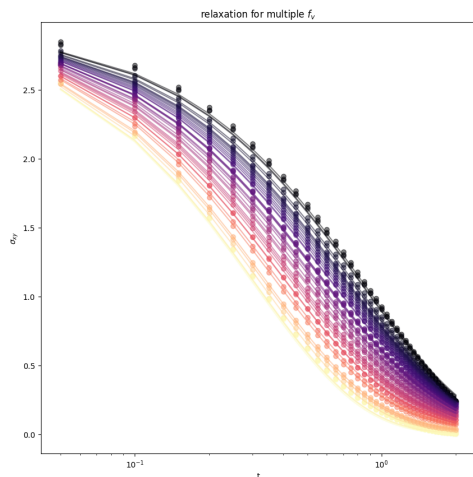


(a) échelle linéaire

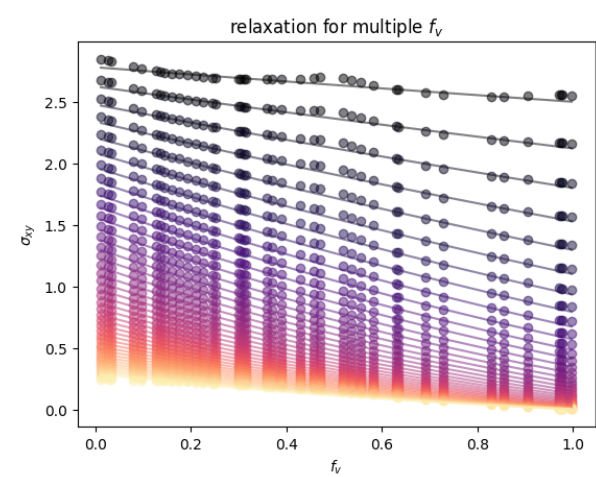


(b) échelle log-log

FIGURE 4 – Evolution de la déformation déviatorique α_d des variables internes en fonction du temps pour différentes échelles.



(a) Courbes de relaxation colorées par fraction volumique



(b) Contrainte de cisailment en fonction de la fraction volumique colorée pour différents pas de temps.

FIGURE 5 – Comparaison de la réponse effective pour différentes fractions volumiques f_v au cours du temps.

6 Conclusion

Les travaux actuels présente une méthode d'homogénéisation capable d'identifier une loi de comportement qui suit le cadre des matériaux standards généralisés à partir de réseaux de neurones. Notre modèle peut tenir compte des paramètres décrivant la microstructure ainsi que les propriétés des phases. L'approche a été testée sur un matériau bi-phasé avec un comportement local visqueux linéaire en tenant compte de la fraction volumique comme propriété de la microstructure. Le modèle a été construit pour pouvoir intégrer d'autres paramètres de la microstructure comme les propriétés de chacune des phases et peut également intégrer des séquences avec des pas de temps variables. L'approche par réseaux de neurones permet sans difficulté supplémentaire d'être appliquée à des comportements visqueux non-linéaires et d'être entraîné à partir de données simulées par la simulation de VER. Enfin, des travaux complémentaires devront être réalisés afin de déterminer des statistiques de champ, comme les moyennes et les moments d'ordre 1 par phase.

Références

- [1] B. Amos, L. Xu, et J. Z. Kolter. *Input Convex Neural Networks*, Proc. 34th Int. Conf. Mach. Learn., PMLR, 146–155, 2017.
- [2] K. Bhattacharya, L. Cao, G. Stepaniants, A. Stuart, et M. Trautner. *Learning Memory and Material Dependent Constitutive Laws*, Prépublication, arXiv :2502.05463, 5 mai 2025.
- [3] M. Flaschel, P. Steinmann, L. De Lorenzis, et E. Kuhl. *Convex Neural Networks Learn Generalized Standard Material Models*, J. Mech. Phys. Solids, 200, 106103, juillet 2025.
- [4] J. N. Fuhg, G. Anantha Padmanabha, N. Bouklas, et al. *A Review on Data-Driven Constitutive Laws for Solids*, Arch. Comput. Methods Eng., 32, 1841–1883, 2025.
- [5] A. L. Frankel, C. Safta, C. Alleman, et R. E. Jones. *Mesh-based graph convolutional neural networks for modeling materials with microstructure*, Journal of Machine Learning for Modeling and Computing, 3(1), 2022.
- [6] M. B. Gorji, M. Mozaffar, J. N. Heidenreich, J. Cao, et D. Mohr. *On the Potential of Recurrent Neural Networks for Modeling Path Dependent Plasticity*, J. Mech. Phys. Solids, 143, 103972, octobre 2020.
- [7] B. Halphen et Q. S. Nguyen. *Sur les matériaux standards généralisés*, J. Mécanique, 14(1), 39–63, 1975.
- [8] S. Huang, Z. He, B. Chem, et C. Reina. *Variational Onsager Neural Networks (VONNs) : A Thermodynamics-Based Variational Learning Strategy for Non-Equilibrium PDEs*, J. Mech. Phys. Solids, 163, 104856, juin 2022.
- [9] N. Lahellec, R. Masson, et P. Suquet. *Effective Thermodynamic Potentials and Internal Variables : Linear Viscoelastic Composites*, J. Mech. Phys. Solids, 188, 105649, juillet 2024.
- [10] M. A. Maia, I. B. C. M. Rocha, P. Kerfriden, et F. P. van der Meer. *Physically Recurrent Neural Networks for Path-Dependent Heterogeneous Materials : Embedding Constitutive Models in a Data-Driven Surrogate*, Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 407, 115934, mars 2023.
- [11] M. Rosenkranz, K. A. Kalina, J. Brummund, et M. Kästner. *A Comparative Study on Different Neural Network Architectures to Model Inelasticity*, Int. J. Numer. Methods Eng., 124(21), 4802–4840, 2023.
- [12] M. Rosenkranz, K. A. Kalina, J. Brummund, et al. *Viscoelasticity with Physics-Augmented Neural Networks : Model Formulation and Training Methods without Prescribed Internal Variables*, Comput. Mech., 74, 1279–1301, 2024.