

Une stratégie d'optimisation structurelle avec matériaux micro-architecturés et présence d'incertitudes

C. Chu¹, D. Dureisseix¹, B. Faverjon¹, N. Blal¹

¹ Univ Lyon, INSA Lyon, CNRS, LaMCoS, UMR5259, 69621 Villeurbanne, France

Résumé — L'optimisation de structures fabriquées à partir de matériaux micro-architecturés pose le problème du coût numérique. Une stratégie couplant homogénéisation, modèles réduits, optimisations topologique (à l'échelle de la structure) et paramétrique (à l'échelle de la microstructure) est proposée pour permettre une analyse multiéchelle avec propagation d'incertitudes et optimisation robuste. Les exemples d'application concernent les problèmes thermo-mécaniques.

Mots clés — multiéchelle, multiphysique, propagation d'incertitudes.

1 Introduction

L'optimisation topologique est un exemple de conception qui se base sur l'utilisation de la simulation numérique pour prédire les performances d'une structure qui n'existe pas encore, mais dont on souhaite guider le dimensionnement, [8, 14]. Ces approches relèvent de la classe des problèmes inverses *many-query* (comme la propagation d'incertitude) qui font de nombreux appels au problème direct de la prédiction des performances d'une structure donnée. Ce problème direct doit donc pouvoir être résolu à faible coût de calcul.

Dans le cas où on utilise des matériaux micro-architecturés (par exemple des matériaux hétérogènes dont la microstructure est constituée de plusieurs phases), et avec les techniques de fabrication additive de type impression 3D, la microstructure (géométrie et/ou phases) peut aussi être optimisée à petite échelle, [7]. Des techniques efficaces doivent alors être mises en place pour éviter l'explosion des coûts de calcul. Un autre objectif est aussi d'assurer la fabricabilité, avec des contraintes sur la faisabilité de la microstructure. De plus la technique de fabrication entraîne aussi de la variabilité dans la réalisation dont on peut vouloir tenir compte.

On est ici concerné par des problèmes thermo-mécaniques (on se restreint pour simplifier aux cas de comportement couplé linéaire), Une technique d'homogénéisation pseudo-périodique est utilisée pour appréhender l'aspect multiéchelle (une contrainte supplémentaire sera donc de vérifier des conditions de pseudo-périodicité de la microstructure). L'optimisation topologique est utilisée à l'échelle macroscopique seulement, la microstructure étant paramétrée de façon à pouvoir restreindre le domaine admissible (fabricable) des paramètres d'optimisation de la microstructure. Une précédente approche consistait à bâtir un abaque de caractéristiques macroscopiques en phase *offline* [4, 6], qui peut s'avérer une phase coûteuse.

Le problème d'optimisation visé est de type multiéchelle, multiphysique et potentiellement robuste. Le coût de calcul est maîtrisé par l'utilisation de méthodes de chaos polynomial pour la propagation d'incertitudes [13] et de modèles de substitution micro-macro [1].

2 Homogénéisation périodique avec propagation d'incertitudes

Pour répondre à la problématique multiéchelle, on considère ici un matériau à micro-structure pseudo-périodique (dont les variations de caractéristiques sont suffisamment lentes, donc à grande échelle), pour permettre l'utilisation d'une approche par homogénéisation périodique.

On considère ainsi une microstructure bi-phasique (dont les phases sont notées S et F), et un modèle thermo-mécanique linéaire pour simplifier. Le contraste entre les propriétés matérielles des phases est supposé d'ordre de grandeur inférieur à ε^{-2} (ε étant le rapport d'échelles) de façon à conduire à un mo-

dèle macroscopique du même type (thermo-mécanique classique). On obtient alors les résultats suivants pour les caractéristiques homogénéisées déterministes :

- la capacité thermique massique C_M est obtenue par une simple loi de mélange
- la matrice de conductivité thermique k_M est obtenue par résolution de plusieurs problèmes de thermique stationnaire sur une cellule élémentaire
- la matrice de Hooke D_M ainsi que la matrice de couplage thermomécanique A_M sont obtenues par résolution de plusieurs problèmes de mécanique quasi-statique sur une cellule élémentaire

Notons q_M l'une de ces caractéristiques homogénéisées, et q les paramètres de la microstructure. Si ces derniers sont des variables aléatoires, ils peuvent être décrits avec une transformation de probabilités à partir d'un jeu de variables aléatoires uniformes $\xi \in [-1, 1]$: $q(\xi)$, et une représentation par chaos polynomial est

$$q_M(\xi) \approx \sum_{i=0}^P Q_i \Psi_i(\xi) \quad (1)$$

où les Ψ_i sont une base polynomiale multivariable (ici : les polynômes de Legendre, bien adaptés à des lois stochastiques uniformes). P est le nombre total de polynômes utilisés dans le développement déterminé par $P = 1 + \sum_{s=1}^p \frac{1}{s!} \prod_{r=0}^{s-1} (N+r)$ avec p l'ordre du chaos polynomial et N le nombre de variables aléatoires. Les Q_i sont des coefficients à déterminer, à partir d'un nombre réduit de calculs de q_M correspondant aux r points de collocation $\xi_k, k = 1, 2, \dots, r$. Classiquement, on prend $r = (p+1)^N$.

Par exemple, considérons la conductivité thermique homogénéisée k_M . Une cellule élémentaire est illustrée sur la figure 1a. $k_M = f(k_S, k_F, n)$ où les intervalles de variation des paramètres (uniformes) sont : pour la conductivité thermique k_S de la phase S , $[0.5, 2]$ daW/m/K ; pour la conductivité thermique k_F de la phase F , $[1, 3]$ daW/m/K ; pour la fraction volumique n de phase F , $[0.3539, 0.3981]$. Afin de réduire le nombre de paramètres, on peut utiliser une analyse dimensionnelle qui donne $k_M/k_S = f(k_F/k_S, n)$; une technique de transformation de probabilité permet alors de se ramener à un jeu de paramètres ξ uniformes. En choisissant un degré p du développement en chaos polynomial, on peut calculer une erreur par rapport au calcul direct en utilisant un échantillonnage (par exemple ici de type Sobol), et en calculant l'écart à la prédiction. La courbe coût-précision est reportée sur la figure 1b ; elle illustre la convergence vis-à-vis du degré polynomial, et l'influence du nombre de paramètres sur le coût.

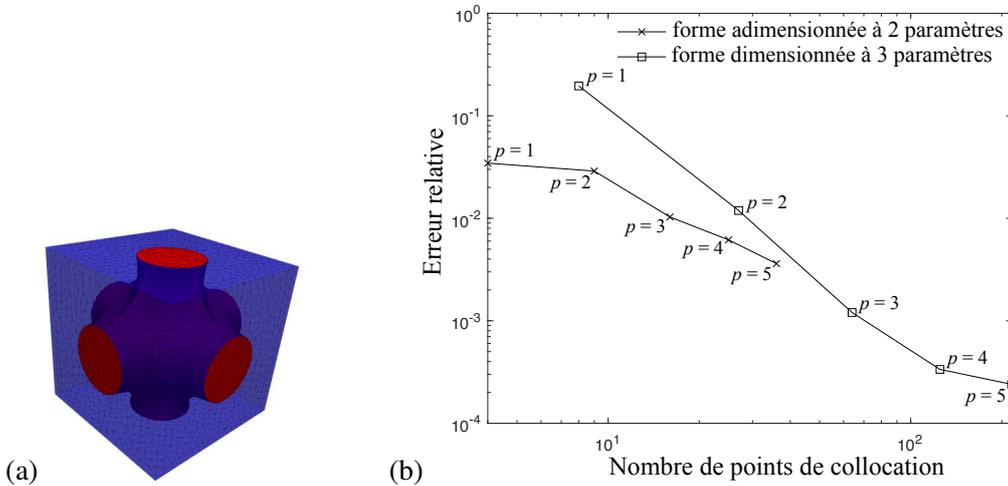


FIGURE 1 – (a) Détails de la cellule unitaire (inclusion F , matrice S), et (b) courbe coût-précision en fonction du degré polynomial p (l'erreur est en norme moyenne sur les points de collocation)

3 Optimisations topologique et paramétrique

La cible visée ici consiste à optimiser simultanément la structure, d'une part sur sa topologie à l'échelle macro, et d'autre part sur des paramètres de micro-structure à l'échelle inférieure.

De façon générale, au moins deux classes de méthodes d'optimisation sont très répandues : les techniques des algorithmes génétiques [12], et celles basées sur des gradients [3, 15, 10]. Les premiers ont l'avantage de ne pas dépendre du problème traité : il s'agit d'une approche *black-box*. Par contre leur

coût dépend de la taille de la population, et du nombre d'itérations (de générations). Les approches par gradient ont en général un taux de convergence plus élevé et sont donc moins coûteuse. Par contre elles nécessitent un développement spécifique au problème traité pour obtenir les expressions des gradients par rapport aux paramètres de conception. Dans la suite, nous utiliserons l'approche MMA (*Method of Moving Asymptotes*) [11, 3].

Les paramètres peuvent être classés en plusieurs catégories : les paramètres de conception par rapport auxquels on optimise, les paramètres aléatoires qui interviennent dans la propagation d'incertitude, et les paramètres appartenant aux deux précédentes catégories. Une optimisation topologique fera intervenir à minima un champ macroscopique de pseudo-densité ρ . L'optimisation de micro-structure peut faire intervenir des champs (variant à l'échelle macro) de caractéristiques de microstructure, comme les caractéristiques matérielles des deux phases, et les paramètres géométriques de la micro-structure.

3.1 Optimisation déterministe

Une description de la dépendance des caractéristiques matérielles macroscopiques q_M aux paramètres micro p par modèles réduits nécessite un modèle de substitution semi-analytique. En effet, les calculs directs étant coûteux, un modèle réduit est plus efficace, et le calcul de sensibilité peut alors être réalisé analytiquement, réduisant là aussi les coûts.

Nous utilisons ici une représentation de type chaos polynomial (1) comme de tels modèles réduits, où les ξ sont l'analogue des champs macroscopiques de paramètres micro de conception. Il ne s'agit plus ici d'obtenir une description de l'aléa, mais bien d'une réduction de modèle par *fit* d'une fonction analytique polynomiale. Les gradients $\partial q_M / \partial \xi$ peuvent alors être obtenus analytiquement aisément.

Le gradient de l'objectif déterministe c par rapport aux paramètres est donc obtenu assez simplement. Pour l'illustrer, prenons le cas classique de la minimisation de la souplesse d'une structure purement élastique par élément finis : $c = f^T u$ où f est le chargement généralisé et u le vecteur des déplacements nodaux, avec l'équilibre $Ku = f$ où K est la matrice de rigidité. On montre facilement que $\partial c / \partial q = 2f^T u - u^T (\partial K / \partial q) u$ et K est l'assemblage des contributions élémentaires de rigidité faisant intervenir directement $\rho D_M(q)$ (ρ est un champ de coefficient multiplicatif seuillé, proche de 0 ou de 1, permettant de prendre en compte la topologie). Il est de même facile d'obtenir les gradients de possibles contraintes de la forme $f(q_M) = 0$ ou $f(q) = 0$, quand f est une fonction dérivable (sinon, une pénalisation peut être utilisée pour la régulariser).

Concernant la description des champs de paramètres, une régularisation est en général nécessaire pour éviter la dépendance au maillage macroscopique entraînant l'effet *checkerboard* par exemple, [2]. Une solution est d'utiliser des *level-set* et de l'interpolation [9]; ici nous utilisons un lissage entre éléments d'un maillage grossier. Cependant, ce type de problème possède souvent aussi des minima locaux, et il est nécessaire de relancer plusieurs fois l'optimisation à partir d'initialisations différentes pour essayer de cartographier les minima. Pour illustrer cela, considérons le problème suivant :

- thermo-mécanique stationnaire linéaire ; le domaine englobant est 2D rectangulaire, figure 2a, flux thermique nul et encastrement à gauche et à droite, soumis en bas à une température imposée et un chargement localisé, et en haut à un chargement mécanique nul et un flux thermique imposé ;
- le matériau est biphasique (ici pour simplifier, on utilise une simple loi de mélange pour les caractéristiques macro) ;
- l'objectif est de minimiser la souplesse apparente $c = f^T u$, sur les champs de paramètres : ρ pour la topologie, n la fraction volumique de phase F ;
- la contrainte (portant sur ρ) est d'avoir un ratio global de volume occupé par de la matière de 40 % ;
- l'initialisation se fait avec une structure rectangulaire pleine ($\rho = 1$ partout) et une microstructure uniforme $n = \eta$.

Suivant la valeur de η l'algorithme de type gradient converge vers éventuellement différents minima, illustrés sur la figure 2b. On voit aussi apparaître une solution avec un gradient de propriétés macro, correspondant à une adaptation de la microstructure.

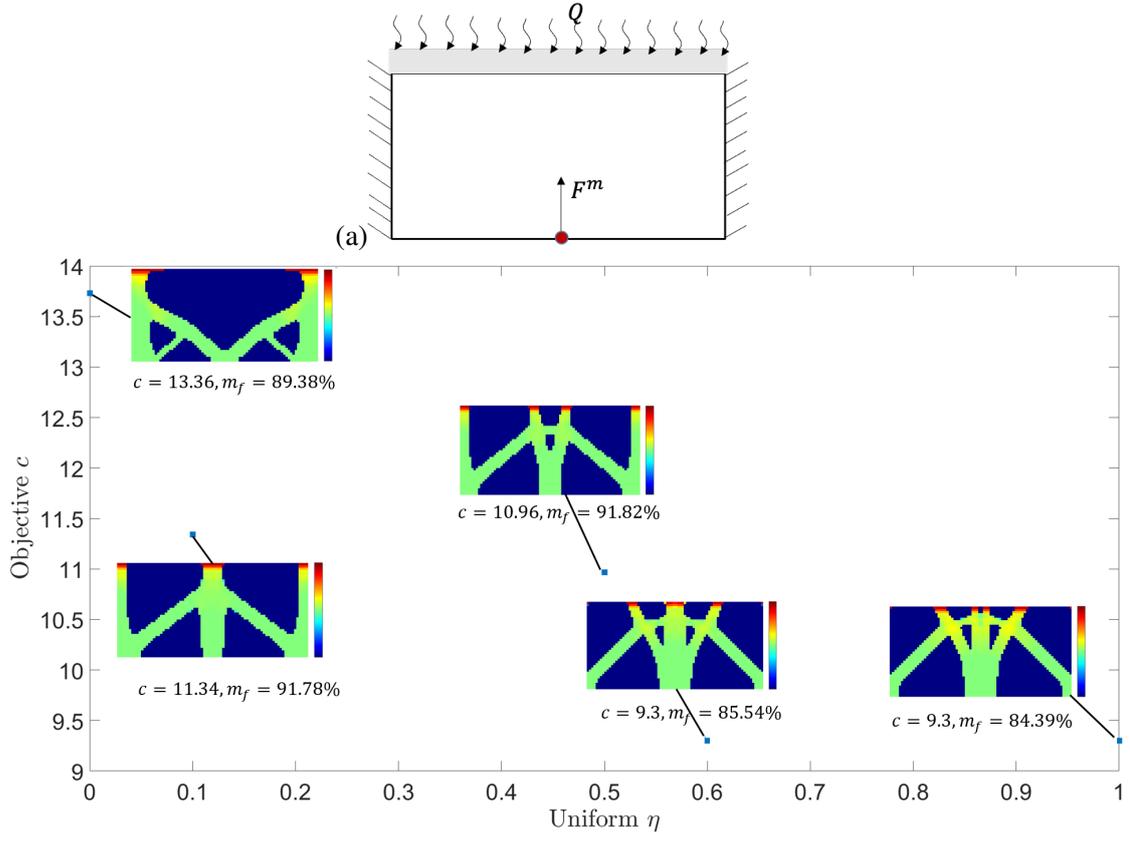


FIGURE 2 – (a) Problème de référence, et (b) solutions obtenues (m_f est la fraction totale de masse de la phase F dans la structure, la couleur vert clair correspond à $n = 1$ et la couleur rouge à $n = 0$)

3.2 Optimisation robuste

Pour tenir compte de la variabilité dans les paramètres du problème, une analyse par propagation d'incertitude est nécessaire. L'objectif de l'optimisation c est alors modifié pour chercher à pondérer la minimisation de sa valeur nominale (typiquement sa moyenne \bar{c}) avec celle de sa dispersion (par exemple son écart type σ_c) : en utilisant un coefficient de pondération λ (à choisir par le concepteur), le nouvel objectif à minimiser est ainsi $\tilde{c}(q) = \bar{c}(q) + \lambda\sigma_c(q)$.

Pour illustrer l'approche, nous considérons dans un premier temps uniquement le chargement comme variable aléatoire. Le même exemple que pour l'optimisation déterministe est repris, avec un aléa sur le flux thermique $Q(\xi)$. Une approche possible consiste alors à obtenir les moyennes et écart type de c en utilisant une représentation par chaos polynomial de la fonction objectif elle-même : à chaque itération de l'algorithme d'optimisation, l'évaluation de la fonction objectif est faite pour r valeurs de collocation des paramètres aléatoires, conduisant à identifier la représentation $c(\xi) \approx \sum_{i=0}^P C_i \Psi_i(\xi)$: si les valeurs de c aux points de collocation sont stockées dans un vecteur colonne \mathbf{c} , le vecteur colonne \mathbf{C} des coefficients C_i est obtenu par moindres carrés avec un système linéaire de la forme $\mathbf{C} = \mathbf{W}\mathbf{c}$. La moyenne est $\bar{c} = C_0 = \mathbf{W}_0\mathbf{c}$ où \mathbf{W}_i est la $(i+1)$ ème ligne de \mathbf{W} ; et la variance est définie par $\sigma_c^2 = \sum_{i=1}^P C_i^2 \langle \Psi_i^2 \rangle$, ce qui donne $\sigma_c^2 = \sum_{i=1}^P \frac{C_i^2}{2i-1}$. On obtient alors

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial q} = \mathbf{W}_1 \frac{\partial}{\partial q} \mathbf{c} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \sigma_c}{\partial q} = \frac{1}{\sigma_c} \sum_{i=2}^P \frac{C_i}{2i-1} \times \mathbf{W}_i \frac{\partial}{\partial q} \mathbf{c} \quad (3)$$

Avec cette approche, seules les valeurs de c et de son premier gradient sont nécessaires, mais en chaque point de collocation. Le coût est alors de l'ordre de r fois celui de l'optimisation déterministe.

Ceci est à comparer au coût d'une approche par algorithme génétique : celui-ci nécessiterait d'estimer c et son premier gradient (avec une méthode de type simplex, donc plus de points de calculs autour de la valeur nominale), pour tous les membres de la population.

Pour illustrer l’approche, on teste plusieurs optimisations avec des pondérations λ différentes, et on peut tracer les solutions à la façon d’un front de Pareto, comme sur la figure 3. Pour obtenir ces résultats, la même difficulté que pour l’optimisation déterministe est présente, à savoir la présence de minima locaux (une solution consisterait à procéder par raffinements successifs de la discrétisation des champs de paramètres pour guider l’algorithme d’optimisation).

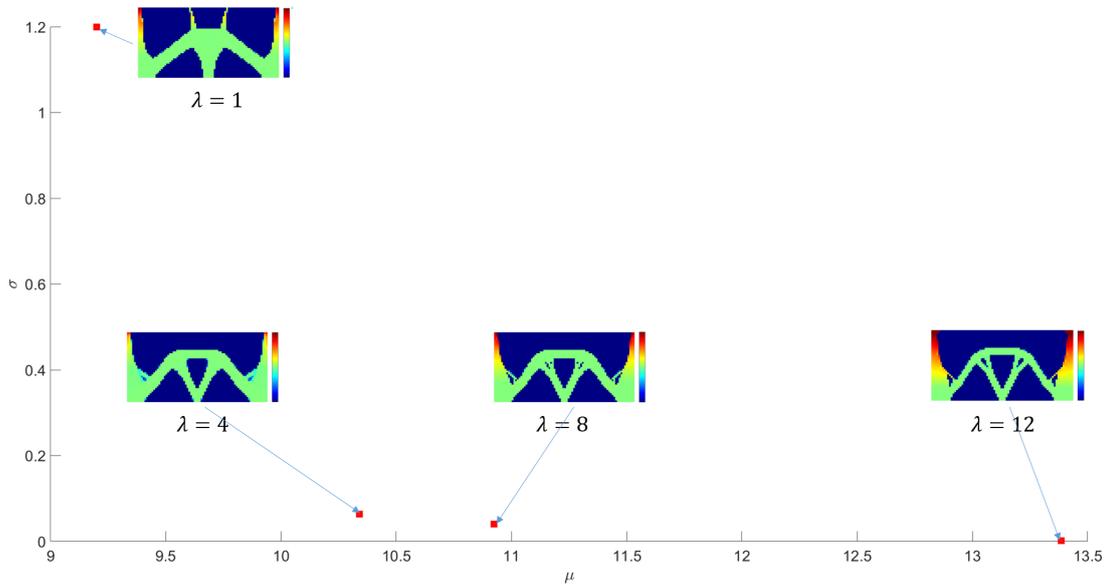


FIGURE 3 – Solutions obtenues pour différentes valeurs de pondération λ (la couleur vert clair correspond à $n = 1$ et la couleur rouge à $n = 0$, l’axe vertical, respectivement horizontal, est l’écart-type, respectivement la moyenne, de l’objectif)

La suite de l’étude est de prendre aussi en compte un aléa sur les paramètres micro de champs de propriétés de la microstructure $q(M, \xi)$. Pour éviter de faire exploser les coûts avec le nombre de variables aléatoires, une décomposition de type Karhunen–Loève de ces champs aléatoires peut être utilisée, et les précédents modèles de chaos polynomial peuvent être réutilisés, à la fois comme modèles de substitution et aussi localement pour estimer les dispersions autour des valeurs moyennes des paramètres.

4 Conclusions

La synergie de plusieurs approches est nécessaire pour répondre au problème fixé : l’homogénéisation pour l’aspect multiéchelle, la réduction de modèle pour les coûts de calcul, la propagation d’incertitude pour la robustesse, et l’analyse de sensibilité pour l’optimisation. Le couplage de ces approches est illustré dans la stratégie proposée afin d’obtenir la conception de structures à partir de matériaux micro-architecturés.

Les limitations sont celles du nombre de paramètres de conception (limitation de la grande dimension de l’espace des paramètres), et la capacité d’estimer la sensibilité de l’objectif à faible coût pour les méthodes de gradient. Elles constituent des perspectives de recherche pour la suite, avec l’application à des problèmes plus complexes, et éventuellement multi-objectifs.

Ici, nous n’avons considéré que l’aspect multiéchelle en espace, mais des techniques d’homogénéisation en temps couplées aussi à de la propagation d’incertitude sont envisageables comme dans [5].

Remerciements. Les auteurs souhaitent remercier le China Scholarship Council pour la participation au financement de ces travaux (CSC grant 201801810065).

Références

- [1] D. Amsallem, M. Zahr, Y. Choi, and C. Farhat. Design optimization using hyper-reduced-order models. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 51(4) :919–940, 2014. doi:10.1007/s00158-014-1183-y.

- [2] M. V. O. Araujo, E. N. Lages, and M. A. A. Cavalcante. Checkerboard free topology optimization for compliance minimization applying the finite-volume theory. *Mechanics Research Communications*, 108 :103581, sep 2020. doi:10.1016/j.mechrescom.2020.103581.
- [3] M. P. Bendsøe and O. Sigmund. *Topology Optimization*. Springer Berlin Heidelberg, 2004. doi:10.1007/978-3-662-05086-6.
- [4] Y. Choi, G. Boncoraglio, S. Anderson, D. Amsallem, and C. Farhat. Gradient-based constrained optimization using a database of linear reduced-order models. *Journal of Computational Physics*, 423 :109787, 2020. doi:10.1016/j.jcp.2020.109787.
- [5] C. Chu, M. Bhattacharyya, D. Dureisseix, and B. Faverjon. Weakly intrusive time homogenization technique to deal with pseudo-cyclic coupled thermomechanical problems with uncertainties. *Computational Mechanics*, 66(3) :669–682, 2020. doi:10.1007/s00466-020-01871-9.
- [6] T. Djourachkovitch, N. Blal, N. Hamila, and A. Gravouil. Multiscale topology optimization of 3D structures : A micro-architected materials database assisted strategy. *Computers & Structures*, 255 :106574, 2021. doi:10.1016/j.compstruc.2021.106574.
- [7] E. Duriez, J. Morlier, M. Charlotte, and C. Azzaro-Pantel. A well connected, locally-oriented and efficient multi-scale topology optimization (EMTO) strategy. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2021. doi:10.1007/s00158-021-03048-1.
- [8] V.-N. Hoang, T. Pham, S. Tangaramvong, S. P. A. Bordas, and H. Nguyen-Xuan. Robust adaptive topology optimization of porous infills under loading uncertainties. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 63(5) :2253–2266, 2021. doi:10.1007/s00158-020-02800-3.
- [9] X. Li, L. Gao, Y. Zhou, and H. Li. A hybrid level set method for the integrated optimization of structural topology and multicomponent layout. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 122(11) :2802–2828, 2021. doi:10.1002/nme.6642.
- [10] L. Siva Rama Krishna, N. Mahesh, and N. Sateesh. Topology optimization using solid isotropic material with penalization technique for additive manufacturing. *Materials Today : Proceedings*, 4(2) :1414–1422, 2017. doi:10.1016/j.matpr.2017.01.163.
- [11] K. Svanberg. The method of moving asymptotes—a new method for structural optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24(2) :359–373, 1987. doi:10.1002/nme.1620240207.
- [12] S. Y. Wang, K. Tai, and M. Y. Wang. An enhanced genetic algorithm for structural topology optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 65(1) :18–44, 2005. doi:10.1002/nme.1435.
- [13] Z. Wang and R. Ghanem. An extended polynomial chaos expansion for PDF characterization and variation with aleatory and epistemic uncertainties. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 382 :113854, 2021. doi:10.1016/j.cma.2021.113854.
- [14] D. Yago, J. Cante, O. Lloberas-Valls, and J. Oliver. Topology optimization methods for 3D structural problems : A comparative study. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 2021. doi:10.1007/s11831-021-09626-2.
- [15] K. Yang, E. Fernandez, C. Niu, P. Duysinx, J. Zhu, and W. Zhang. Note on spatial gradient operators and gradient-based minimum length constraints in SIMP topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 60(1) :393–400, 2019. doi:10.1007/s00158-019-02269-9.