

Outils Numériques pour la Conception des Structures Lattices

T. Hirschler¹, P. Antolin¹, A. Buffa^{1,2}

¹ Institut de Mathématiques, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, {thibaut.hirschler,pablo.antolin,annalisa.buffa}@epfl.ch

² IMATI, Consiglio Nazionale delle Ricerche, Pavie, Italie.

Résumé — Nous montrons comment il est possible de construire des modèles géométriques des structures lattices directement compatibles avec la simulation numérique. Afin de réduire les ressources informatiques utilisées, nous discutons d'une approche permettant la construction rapide des opérateurs éléments finis, ainsi que l'utilisation d'une méthode de décomposition de domaine pour la résolution de grands systèmes linéaires rencontrés. In fine, nous exposons comment ces outils permettent d'améliorer la conception des structures lattices.

Mots clés — Structures Lattices, Analyse Isogéométrique, Multi-échelle, Optimisation.

1 Contexte et Objectifs

Les travaux présentés ici suivent le paradigme introduit par [1] pour la conception par ordinateur de structures innovantes multi-échelles, telles que les structures lattices et autres structures composées de matériaux architecturés. L'utilisation de l'analyse isogéométrique permet de directement employer les modèles géométriques issus de [1] pour la simulation numérique comme montré dans [2] ou [3] par exemple. Cependant, le coût numérique est important lorsque des approches "standards" sont adoptées dans ce contexte.

Il y a alors deux façons de réduire les coûts associés à la simulation des structures lattices. Une première catégorie d'approches consiste à faire appel à des modèles physiques avancés décrivant le comportement mécanique de la structure à différentes échelles (échelle microscopique correspondant au motif élémentaire, échelle macroscopique correspondant à la structure globale sans les détails microstructuraux). Citons notamment les approches par homogénéisation, éventuellement numérique, [4; 5; 6; 7] où le comportement macroscopique équivalent du matériau architecturé est utilisé à l'échelle macroscopique pour effectuer la simulation. Au-delà de la contrainte d'avoir une séparation claire des échelles (généralement donné comme un critère sur les longueurs caractéristiques des deux échelles), les structures lattices peuvent exhiber des phénomènes locaux complexes qu'il peut être difficile à modéliser par homogénéisation. Ici, les structures qui nous intéressent présentent des longueurs caractéristiques proches (facteur 2 à 50) pour lesquelles il semble préférable de faire appel à la seconde catégorie d'approches : il s'agit là de considérer les structures dans leur globalité (sans séparation des échelles *a priori*) et de faire appel à des méthodes numériques avancées permettant de construire et de résoudre les grands systèmes d'équations de manière efficace et économe. Au lieu d'introduire une approche multi-échelle lors de la modélisation (avec superposition de solutions micro/macro), il convient ici d'introduire une approche multi-échelle lors de la résolution [8; 9].

Nous présentons notre approche de la manière suivante. Nous commençons par décrire les modèles géométriques employés. Ensuite nous présentons les méthodes développées pour une formation et une résolution rapide des systèmes éléments finis construits directement sur ces modèles géométriques. Finalement, nous motivons l'utilisation de tels outils pour l'optimisation de forme des structures lattices.

2 Une modélisation géométrique avancée

2.1 Modèles géométriques multi-échelles

L'approche développée dans ces travaux a pour point de départ une modélisation géométrique innovante des structures lattices. L'idée proposée par [1] peut être vue comme une approche à deux échelles.

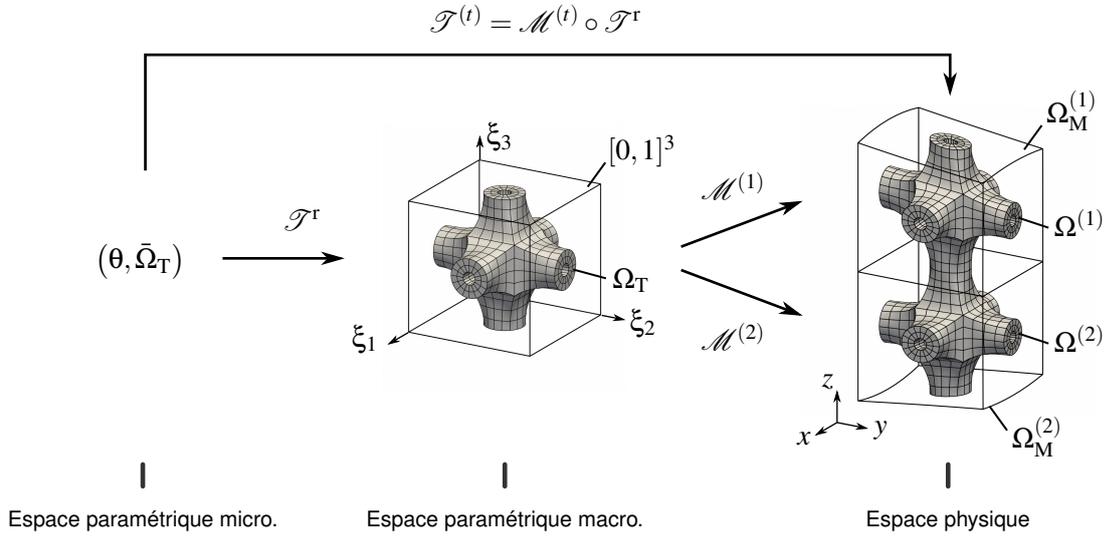


FIGURE 1 – Modélisation géométrique par composition de splines.

A l'échelle disons microscopique, il s'agit d'introduire un modèle géométrique de ce qui va constituer notre motif élémentaire à répéter. A l'échelle macroscopique, on introduit un modèle géométrique représentant notre structure sans les détails microstructuraux. Ici, on considère le cas où ces deux modèles géométriques sont construits à l'aide de splines (plus précisément, B-Splines et/ou NURBS). Finalement, la géométrie complète est générée par composition de ces deux mappings comme illustré en figure 1. Chaque élément de la discrétisation spline de la géométrie macroscopique transforme le motif microstructural élémentaire de sorte, qu'au final, toute la géométrie macroscopique est pavée de ce motif élémentaire. Il est intéressant de noter que suivant cette approche le motif élémentaire n'est pas seulement répété dans l'espace, mais subit des déformations géométriques potentiellement "non-linéaires".

Mathématiquement, de tels modèles géométriques peuvent être décrits de la manière suivante (voir également la figure 1). On introduit premièrement un mapping \mathcal{T}^r défini comme un mapping type spline, c'est-à-dire de la forme :

$$\mathcal{T}^r : \bar{\Omega}_T \rightarrow \Omega_T \subset [0, 1]^3; \theta \mapsto \mathcal{T}^r(\theta) = \sum_{i=1}^{n_T} R_i^h(\theta) t_i. \quad (1)$$

Les fonctions de bases R_i^h , définies sur l'espace paramétrique $\bar{\Omega}_T$, sont polynomiales par morceaux de degré p_T avec une continuité inter-éléments pouvant varier entre C^0 (continuité minimale) et C^{p_T-1} (continuité maximale). Dans l'équation (1), les vecteurs $t_i \in \mathbb{R}^3$ sont couramment appelés points de contrôle et viennent pondérer les fonctions de bases. La géométrie macroscopique prend initialement une forme similaire. Cependant, au lieu de considérer le mapping macroscopique globalement, on préfère ici le voir comme une collection de n_e mappings de Bézier (procédure d'extraction de Bézier) :

$$\mathcal{M}^{(e)} : [0, 1]^3 \rightarrow \Omega \subset \mathbb{R}^3; \xi \mapsto \mathcal{M}^{(e)}(\xi) = \sum_{i=1}^{n_B} B_i^H(\xi) m_i^{(e)}, \quad e = 1, \dots, n_e, \quad (2)$$

où B_i^H sont des polynômes de Bernstein. Finalement, la géométrie complète est formée d'une collection de mappings notés $\mathcal{T}^{(e)}$, chacun étant défini par la composition du mapping associé au motif élémentaire et d'un macro-élément :

$$\mathcal{T}^{(e)} : \bar{\Omega}_T \rightarrow \Omega^{(e)} \subset \Omega; \theta \mapsto \mathcal{T}^{(e)}(\theta) = (\mathcal{M}^{(e)} \circ \mathcal{T}^r)(\theta). \quad (3)$$

La structure lattice présente, par construction, une décomposition de domaine sans recouvrement.

2.2 Approche isogéométrique

Il est théoriquement possible d'effectuer un calcul des structures (et d'autres types d'analyses) directement sur les modèles géométriques introduits en utilisant la méthode dite d'analyse isogéométrique. En

effet, il est désormais établi que les modèles splines sont performants pour les simulations numériques. La régularité élevée offerte par les fonctions de bases splines est l'une des raisons principales de ces bonnes performances [10; 11]. Cependant, il est également connu que le coût associé aux discrétisations d'ordre élevé peut s'avérer limitant. Or, les compositions opérées dans la construction des géométries des structures lattices conduisent à des discrétisations d'ordre très élevé (degré couramment supérieur à 20). Pour y remédier, on préférera adopter une approche isogéométrique non-isoparamétrique en construisant, par exemple, notre espace d'approximation à partir de la discrétisation spline associée au motif élémentaire :

$$\mathbf{u}^{h(e)}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_T} (\mathbf{R}_i^h \circ \mathcal{F}^{(e)-1})(\mathbf{x}) \mathbf{u}_i^{(e)}, \quad \mathbf{x} \in \Omega^{(e)}. \quad (4)$$

Bien qu'un tel choix répond aux problèmes de degré très élevé issu de la composition de splines, il n'est pas suffisant à lui seul. Le coût de calcul reste trop important si des approches standards sont utilisées durant l'assemblage des opérateurs éléments finis et lors de la résolution des systèmes linéaires. L'ingrédient principal à exploiter est l'apparente répétabilité présente dans les structures lattices.

3 Solveurs dédiés

3.1 Assemblage multi-échelle des opérateurs Éléments Finis

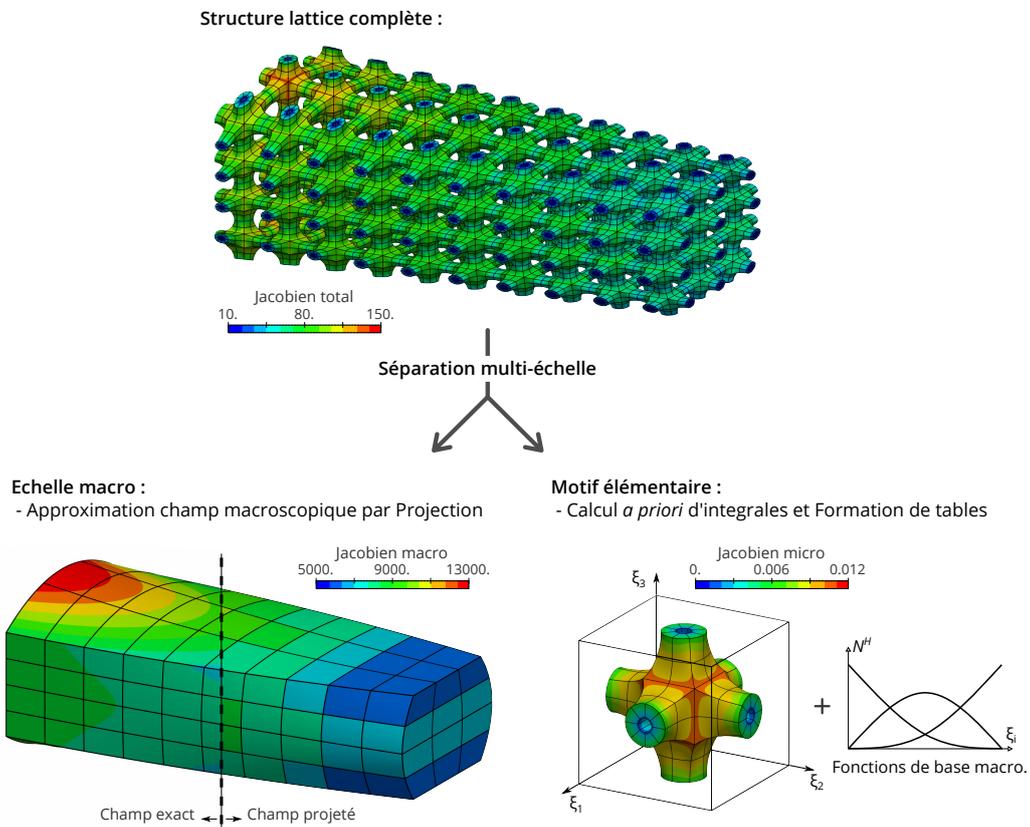


FIGURE 2 – Méthode développée pour l'assemblage des opérateurs éléments finis.

L'approche développée pour l'assemblage rapide des opérateurs éléments finis est présentée en détail dans [12]. L'idée de l'approche est illustrée en figure 2 et peut être considérée comme une approche à deux échelles. L'objectif global consiste à exploiter la similarité entre les éléments microstructuraux composants notre structure lattice. Chacun d'entre eux a en effet le même point de départ : le motif élémentaire. Ensuite, ce qui les différencie est la géométrie des éléments macroscopiques sous-jacents uniquement.

Considérons la formulation variationnelle en élasticité linéaire. On cherche $\mathbf{u} \in \mathcal{U}$ solution de :

$$\mathbf{W}_{\text{int}}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + \mathbf{W}_{\text{ext}}(\mathbf{v}) = 0, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V}, \quad (5)$$

avec :

$$W_{\text{int}}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = - \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \, d\Omega, \quad (6)$$

$$W_{\text{ext}}(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{b}) \, d\Omega + \int_{\Gamma} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{t}) \, d\Gamma, \quad (7)$$

où $\boldsymbol{\varepsilon}$ et $\boldsymbol{\sigma}$ sont les tenseurs des déformations linéarisées de Green-Lagrange et des contraintes linéarisées de Cauchy, respectivement. Les efforts extérieurs volumiques et surfaciques sont représentés par les champs vectoriels \mathbf{b} et \mathbf{t} , respectivement.

Afin de décrire la méthode suivie, intéressons nous plus particulièrement au travail des efforts intérieurs W_{int} . L'intégrale définie sur Ω peut être réécrit en invoquant la décomposition de domaine par macro-élément puis en effectuant un changement de variables par sous-domaine, de sorte que le domaine d'intégration soit désormais Ω_{T} (voir figure 1) :

$$W_{\text{int}}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \sum_{e=1}^{n_e} - \int_{\Omega_{\text{T}}} \bar{A}_{ijkl}^{H(e)} u_{kr\xi_i} v_{lr\xi_j} \, d\xi. \quad (8)$$

Sans détailler cette expression, l'important à noter ici est que les champs tensoriels $\bar{A}^{H(e)} : [0, 1]^3 \rightarrow \mathbb{R}^{3,3,3,3}$ dépendent uniquement de la géométrie macroscopique. Pour "séparer" les deux échelles et faire "sortir" l'information liée à la géométrie macroscopique des intégrales, nous effectuons une approximation polynomiale de ces champs en introduisant un projecteur :

$$\Pi^H : L^2([0, 1]^3) \rightarrow \mathcal{Q}_{p_\pi}([0, 1]^3), \quad (9)$$

où l'espace de projection est construit à l'aide de polynômes de Bernstein : $\mathcal{Q}_{p_\pi} = \text{span} \{N_C^H\}_{C=1}^{n_\pi}$. Après cette étape d'approximation polynomiale, la matrice de rigidité associée à un sous-domaine $\Omega^{(e)}$ peut être construite en combinant les coefficients de projection associés aux champs macroscopiques et des tables d'intégration liées au motif élémentaire décrivant la microstructure :

$$\mathbf{K}_{AB}^{\pi(e)} = \sum_{C=1}^{n_\pi} \langle \bar{A}_{ij}^{H(e)} \rangle_C \underbrace{\int_{\Omega_{\text{T}}} R_{A'l\xi_i}^h R_{B'l\xi_j}^h N_C^H \, d\xi}_{\text{Indépendant de } \mathcal{M}^{(e)}}. \quad (10)$$

Les tables d'intégration sont communes à tous les sous-domaines, et sont calculées *a priori* en formant une base de données. L'étape *online* consiste à projeter les champs macroscopiques, à charger ces tables (échelle micro), puis à combiner ces deux quantités (un produit matrice-matrice dans la pratique). Le lecteur souhaitant avoir plus de détails sur cette approche peut consulter [12]. L'approximation polynomiale des champs macroscopiques doit être faite de manière consistante. Dans [12], nous étudions le lien entre l'erreur de consistance introduite dans la formulation faible et l'erreur de projection, afin d'établir une stratégie pour le choix de l'espace de projection.

Pour les géométries similaires à celles présentées en figure 3, nous observons des gains en temps de calcul important lors de la formation des opérateurs éléments finis. Là où une approche standard basée sur une intégration par règle de quadrature de Gauss appliquée élément par élément peut prendre plusieurs minutes, l'approche développée requiert que quelques secondes pour former le système linéaire à résoudre.

3.2 Résolution par décomposition de domaine

La formation rapide des opérateurs éléments finis n'est pas suffisante à elle seule pour rendre accessible la simulation des structures lattices. La résolution des systèmes linéaires est un autre point limitant. En effet, choisir d'effectuer directement le calcul des structures sur la géométrie complète conduit à de large systèmes linéaires à résoudre. Au-delà du temps de calcul, le coût mémoire peut rapidement être supérieur aux ressources à disposition.

Nous proposons de construire un solveur adapté au cas des structures lattices basé sur les méthodes de décomposition de domaine [13]. Là encore, l'idée est d'exploiter la *quasi*-répétabilité et la similarité entre les sous-domaines constituant nos structures lattices. Le solveur développé fait parti d'une classe

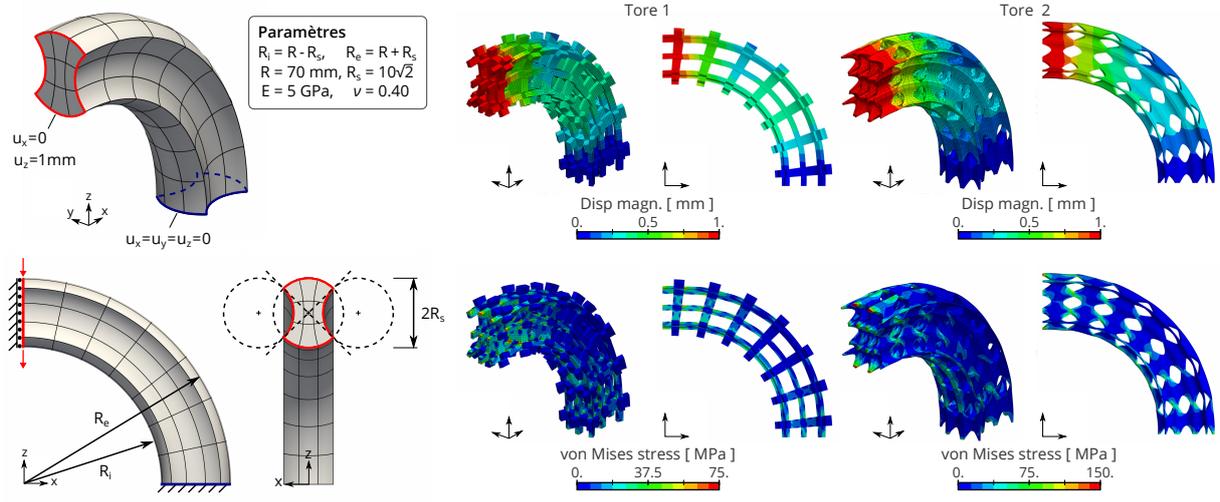


FIGURE 3 – Exemples de calcul de structures pour les structures lattices.

de méthodes appelée *inexact* FETI-dp [14; 15]. Les sous-domaines sont couplés en introduisant des multiplicateurs de Lagrange liant les degrés de liberté aux interfaces (d.d.l. “duaux” notés \mathbf{u}_D), conduisant à résoudre des systèmes de la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{B}^\top \\ \mathbf{B} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

Au-delà des d.d.l. duaux, de degrés de liberté d’interface dits “primaux” sont sélectionnés et assemblés globalement de sorte que les sous-matrices locales restantes $\mathbf{K}_{RR}^{(e)}$ soient inversibles. Un tel partitionnement permet de détailler les expressions des quantités présentées dans l’équation (11) :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{RR}^{(1)} & & & \mathbf{K}_{RP}^{(1)} \\ & \ddots & & \vdots \\ & & \mathbf{K}_{RR}^{(n_e)} & \mathbf{K}_{RP}^{(n_e)} \\ \mathbf{K}_{PR}^{(1)} & \dots & \mathbf{K}_{PR}^{(n_e)} & \mathbf{K}_{PP} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_R^{(1)} \\ \vdots \\ \mathbf{f}_R^{(n_e)} \\ \mathbf{f}_P \end{pmatrix}, \quad (12)$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{DR}^{(1)} & \dots & \mathbf{B}_{DR}^{(n_e)} & \mathbf{0}_{DP} \end{bmatrix}.$$

Le système (11) est résolu à l’aide d’un solveur itératif équipé d’un préconditionneur triangulaire par bloc de la forme [16] :

$$\hat{\mathbf{A}}^{-1} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{K}}^{-1} & \mathbf{0} \\ \hat{\mathbf{M}}^{-1} \mathbf{B} \hat{\mathbf{K}}^{-1} & -\hat{\mathbf{M}}^{-1} \end{bmatrix},$$

où :

$$\hat{\mathbf{K}}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_R & -\mathbf{K}_{RR}^{-1} \mathbf{K}_{RP} \\ \mathbf{0}_{PR} & \mathbf{I}_P \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{K}}_{RR}^{-1} & \\ & \hat{\mathbf{S}}_{PP}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{I}_R & \mathbf{0}_{RP} \\ -\mathbf{K}_{PR} \mathbf{K}_{RR}^{-1} & \mathbf{I}_P \end{bmatrix},$$

$$\hat{\mathbf{M}}^{-1} = \sum_{s=1, \dots, n} \mathbf{D}^{(s)} \mathbf{B}_R^{(s)} \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{II} & \mathbf{0}_{ID} \\ \mathbf{0}_{DI} & \hat{\mathbf{S}}_{DD}^{(s)} \end{bmatrix} \mathbf{B}_R^{(s)\top} \mathbf{D}^{(s)}.$$

L’opérateur $\hat{\mathbf{M}}^{-1}$ est couramment appelé le préconditionneur de Dirichlet dans les méthodes par décomposition de domaine, et l’opérateur $\hat{\mathbf{S}}_{PP}^{-1}$ est le complément de Schur primal constituant le problème grossier de les approches FETI-dp. Contrairement à l’approche FETI-dp standard, les degrés de liberté ne sont pas condensés à l’interface, et il est alors possible de ne pas résoudre les problèmes locaux *exactement* à chaque itération, par exemple. Dans la pratique, cela donne la possibilité de ne pas factoriser chacune des matrices locales, mais d’exploiter la similitude entre les sous-problèmes en factorisant des sous-problèmes principaux bien identifiés par exemple. L’objectif d’un tel choix est de réduire le coût mémoire durant la résolution.

4 Conception Optimale

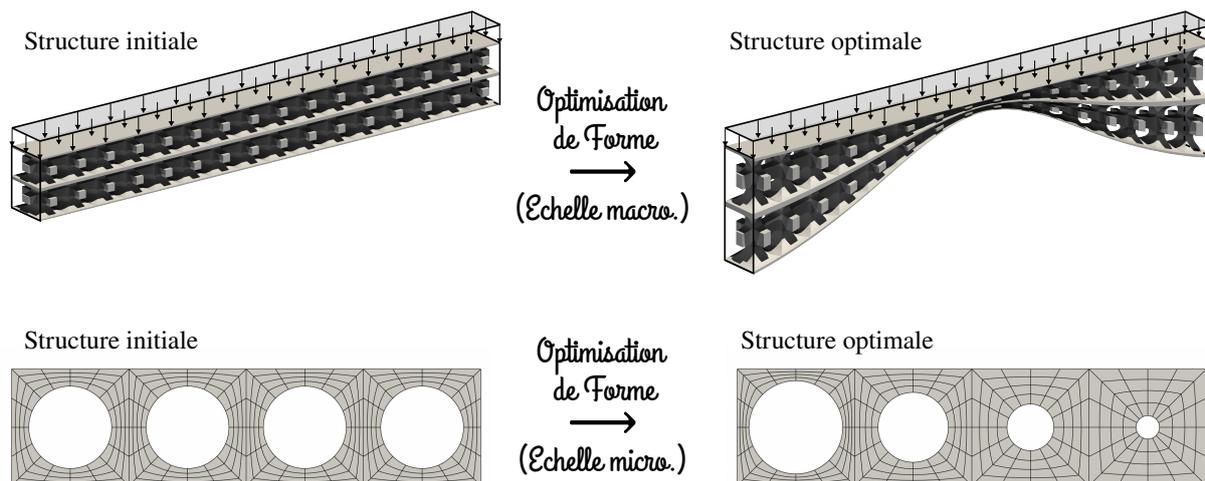


FIGURE 4 – Optimisation de forme pour les structures lattices.

Nous avons désormais à disposition un outil performant capable de modéliser la géométrie des structures lattices et capable d'effectuer des simulations directement sur ces modèles. Cette intégration modélisation géométrique/simulation dans un même modèle offre un potentiel intéressant pour construire une procédure d'optimisation. Il permet d'identifier aisément les liens autres des paramètres géométriques de conception, et le comportement mécanique d'une structure lattice. Les paramètres de conception peuvent soit concerner la géométrie globale (échelle macroscopique), ou soit le motif élémentaire (échelle microscopique) comme illustré en figure 4.

5 Conclusions et Perspectives

Nous avons construit des outils numériques dédiés aux structures lattices basés sur des modèles géométriques multiéchelles. L'avantage de l'approche développée est le lien direct entre les résultats de simulations et les paramètres géométriques, qu'ils soient liés au motif élémentaire ou à la géométrie globale macroscopique. Nous estimons que de tels outils permettent de concevoir au mieux les structures lattices et d'exploiter pleinement le potentiel de ces nouveaux types de structures.

Ces travaux sont financés au travers du programme européen de recherche et d'innovation Horizon 2020 sous la convention de subvention n. 862025 (ADAM2). Plus d'informations sur ce projet sont disponibles et mises à jour sur le site internet : www.adam2.eu.

Références

- [1] G. Elber. Precise Construction of Micro-structures and Porous Geometry via Functional Composition. In *Mathematical Methods for Curves and Surfaces*, pages 108–125. Springer International Publishing, 2017.
- [2] F. Massarwi, J. Machchhar, P. Antolin, and G. Elber. Hierarchical, random and bifurcation tiling with heterogeneity in micro-structures construction via functional composition. *Computer-Aided Design*, 102 :148–159, sep 2018.
- [3] P. Antolin, A. Buffa, E. Cohen, J. F. Dannenhoffer, G. Elber, S. Elgeti, R. Haimes, and R. Riesenfeld. Optimizing Micro-Tiles in Micro-Structures as a Design Paradigm. *Computer-Aided Design*, 115 :23–33, oct 2019.
- [4] H. Moulinec and P. Suquet. A FFT-based numerical method for computing the mechanical properties of composites from images of their microstructures. In *IUTAM Symposium on Microstructure-Property Interactions in Composite Materials*, pages 235–246. Springer Netherlands, 1995.
- [5] Frédéric Feyel. A multilevel finite element method (FE2) to describe the response of highly non-linear structures using generalized continua. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(28-30) :3233–3244, July 2003.

- [6] N. Charalambakis. Homogenization techniques and micromechanics. a survey and perspectives. *Applied Mechanics Reviews*, 63(3), May 2010.
- [7] J. Schröder. A numerical two-scale homogenization scheme : the FE2-method. In *Plasticity and Beyond*, pages 1–64. Springer Vienna, 2014.
- [8] P. Ladevèze, O. Loiseau, and D. Dureisseix. A micro–macro and parallel computational strategy for highly heterogeneous structures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 52(12) :121–138, September 2001.
- [9] P. Oumaziz, P. Gosselet, K. Saavedra, and N. Tardieu. Analysis, improvement and limits of the multiscale latin method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 384 :113955, October 2021.
- [10] Y. Bazilevs, L. Beirão da Veiga, J. A. Cottrell, T. J. R. Hughes, and G. Sangalli. Isogeometric Analysis : approximation, stability and error estimates for h-refined meshes. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 16(07) :1031–1090, July 2006.
- [11] A. Buffa, J. Rivas, G. Sangalli, and R. Vázquez. Isogeometric discrete differential forms in three dimensions. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 49(2) :818–844, January 2011.
- [12] T. Hirschler, P. Antolin, and A. Buffa. Fast and multiscale formation of isogeometric matrices of microstructured geometric models. *Computational Mechanics*, October 2021.
- [13] P. Gosselet and C. Rey. Non-overlapping domain decomposition methods in structural mechanics. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 13(4) :515–572, dec 2006.
- [14] A. Klawonn and O. Rheinbach. Inexact FETI-DP methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 69(2) :284–307, 2006.
- [15] O. Rheinbach. Parallel iterative substructuring in structural mechanics. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 16(4) :425–463, August 2009.
- [16] V. Simoncini. Block triangular preconditioners for symmetric saddle-point problems. *Applied Numerical Mathematics*, 49(1) :63–80, April 2004.