

Simulation Efficace à l'Échelle Micro de Matériaux Architecturés et Structures Lattice

C. Guillet^{1,3}, T. Hirschler², P. Jolivet³, P. Antolin⁴, R. Bouclier⁵

¹ Centre Inria de l'Université de Bordeaux, Concoce équipe projet Airbus CR & T, Cerfacs et Inria

² Université Marie et Louis Pasteur, UTBM, CNRS UMR 6303, ICB

³ Sorbonne Université, LIP6, CNRS

⁴ Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Institute of Mathematics, Chair of Numerical Modeling and Simulation

⁵ Univ. Toulouse, INSA-Toulouse, IMT-Albi, ISAE-SUPAERO, CNRS UMR 5312, ICA

Résumé — Ce travail se concentre sur la simulation numérique de structures *lattice*. Pour réduire les coûts de calcul, nous exploitons la nature répétitive de ces structures en combinant des techniques de réduction de modèle et de décomposition de domaine. Une base réduite (RB) construite à partir de cellules principales représentatives permet d'approcher efficacement les opérateurs locaux. L'approche inclut un solveur FETI-DP inexact adapté aux calculs séquentiels et un préconditionneur parallèle multi-niveaux pour des simulations à grande échelle, capable de traiter des modèles linéaires comme non linéaires.

Mots clés — Matériaux architecturés ; Méthodes de décomposition de domaine ; FETI-DP inexact ; Base réduite ; Matrix-free ; Élasticité linéaire ; Modèle néo-Hookéen

1 Introduction

Dans ce travail, nous nous intéressons à la simulation numérique de la réponse mécanique des structures *lattice*. Avec l'essor de la conception de structures *lattice* représentatives, le nombre de cellules et leur complexité ont fortement augmenté. En conséquence, le coût de calcul, tant en mémoire qu'en temps de simulation, devient rapidement très élevé, voire inabordable, si les méthodes classiques sont utilisées comme des boîtes noires. Pour relever ce défi, nous exploitons les caractéristiques propres aux structures *lattice*, en particulier leur nature répétitive, afin de résoudre le problème complet à l'échelle fine tout en réduisant les coûts mémoire et de calcul. Plus précisément, nous combinons des techniques de réduction de modèle, permettant d'identifier et d'extraire les modes mécaniques dominants des cellules, avec des méthodes de décomposition de domaine utilisées pour le préconditionnement du système linéaire issu de la discrétisation du problème. Nous proposons ainsi une stratégie de base réduite (RB) qui tire parti de la répétitivité intrinsèque des cellules de la structure *lattice*. Grâce à cette approche, le nombre de calculs locaux par cellule, lors de la construction des opérateurs de rigidité ou de la résolution du système linéaire, est considérablement diminué. La base réduite est construite à partir d'un ensemble restreint de cellules dites principales. Chaque opérateur local peut alors être approximé avec précision dans cet espace réduit, permettant notamment la formation et le stockage efficace de la matrice de rigidité à moindre coût. Cette approche réduit de façon significative le temps de calcul et l'usage mémoire, en particulier pour des problèmes de grande taille. Nous introduisons également des algorithmes exploitant cette stratégie de base réduite pour résoudre efficacement le système linéaire. Dans un premier temps, une méthode FETI-DP inexacte et efficace, particulièrement adaptée aux calculs séquentiels, est présentée. Ce solveur permet notamment de traiter des problèmes comportant plusieurs milliers de cellules (soit plusieurs millions de degrés de liberté) en quelques minutes sur un ordinateur portable standard. Les cas de petites comme de grandes déformations peuvent être traités par cette approche, aussi bien pour des modèles d'élasticité linéaire que d'hyperélasticité non linéaire. Enfin, un préconditionneur parallèle multi-niveaux, étendant cette stratégie et conçu pour des simulations numériques à grande échelle sur des architectures parallèles comportant jusqu'à plusieurs milliers de cœurs, est présenté [1].

2 Stratégie de Base Réduite (RB)

Nous définissons une variété matricielle, constituée de l'ensemble des matrices de rigidité (ou tangentes) locales associées aux cellules de la structure *lattice*, et donnée par

$$\mathbb{K} := \{\mathbf{K}_h^s \mid s \in \llbracket 1, N_s \rrbracket\}.$$

Ici, \mathbf{K}_h^s désigne l'opérateur local associé à la cellule s , pouvant correspondre, par exemple, à la matrice de rigidité dans le cas linéaire, ou à la matrice tangente dans le cas non linéaire. Grâce au caractère répétitif des cellules de la structure *lattice*, on suppose que la dimension effective de cette variété est nettement inférieure à N_s , ce qui permet d'approximer \mathbb{K} par une variété de dimension réduite.

Chaque opérateur local peut alors être approché dans cet espace de base réduite (RB) selon :

$$\mathbf{K}_h^s \approx \sum_{r=1}^{N_r} \alpha_r^s \mathbf{K}_h^{s_r},$$

où N_r représente le nombre de cellules principales. L'intérêt majeur de cette approche réside dans le fait que seules les N_r matrices locales principales doivent être assemblées explicitement. L'ensemble des N_s matrices locales peut ensuite être reconstruit à partir des coefficients scalaires α_r^s formant une matrice de dimension $N_s \times N_r$.

La base réduite est construite à l'aide d'un algorithme *greedy*. L'objectif est d'identifier un petit nombre de cellules principales dont les opérateurs locaux associés constituent une base apte à approximer avec précision les opérateurs de l'ensemble des cellules. À cette fin, l'algorithme *greedy* est appliqué à un ensemble sélectionné d'instantanés, ou *snapshots*, des opérateurs locaux, générés via une règle de quadrature réduite appliquée à ces opérateurs.

L'efficacité de cette stratégie est d'autant plus grande que le nombre de cellules principales N_r reste faible. Des exemples de cellules principales identifiées, obtenus avec une tolérance de 3×10^{-4} , sont présentés sur la Fig. 1 pour deux géométries macroscopiques distinctes, plusieurs tailles de structures et différents régimes de déformation. Il apparaît naturellement que plus la géométrie macroscopique de la *lattice* et les déformations induites sont complexes, plus le nombre de cellules principales nécessaires augmente. À l'inverse, lorsque le nombre total de cellules croît, la probabilité de trouver des cellules mécaniquement similaires augmente également, ce qui renforce encore les gains de calcul offerts par la stratégie proposée.

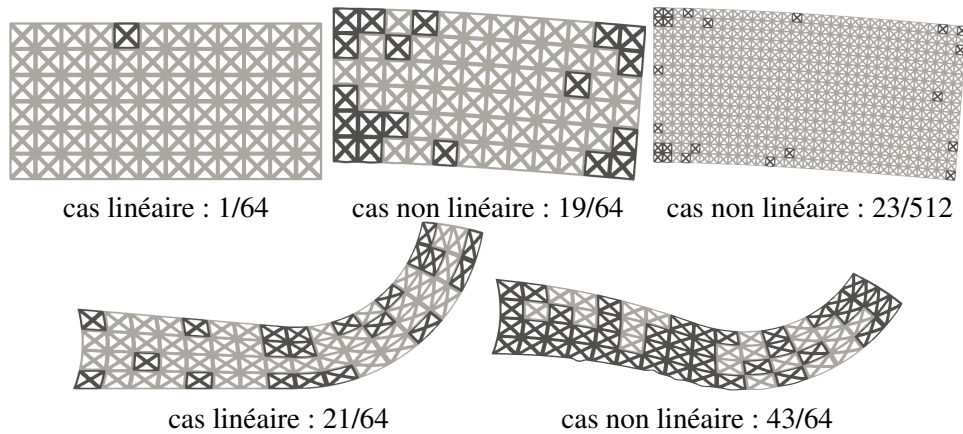


FIGURE 1 – Exemples de cellules principales identifiées pour (haut) une *lattice* rectangulaire et (bas) une *lattice* de type pédale de frein, tous deux basés sur une cellule unitaire en treillis croisé (*cross-truss*). La tolérance de la base réduite est fixée à $\varepsilon = 3 \times 10^{-4}$. Les résultats sont présentés pour les cas linéaire (petites déformations) et non linéaire (hyperélasticité à grandes déformations).

3 Solveur efficace

Nous présentons ici deux méthodes de résolution du système linéaire issu de la discrétisation des structures *lattice*. Chacune d'elles exploite la stratégie de base réduite (RB) introduite en Section 2 afin

de diminuer à la fois le temps de calcul et l’empreinte mémoire. Dans un premier temps, nous introduisons un solveur FETI-DP inexact, particulièrement adapté aux simulations numériques séquentielles effectuées sur un unique cœur de calcul. Nous présentons ensuite un préconditionneur multi-niveaux, conçu pour la simulation à grande échelle de structures *lattice* sur des architectures parallèles comportant jusqu’à plusieurs milliers de cœurs.

3.1 Solveur FETI-DP inexact

Pour résoudre efficacement le système linéaire, nous faisons le choix d’un solveur itératif. L’idée est, une fois encore, de tirer parti du caractère répétitif des cellules unitaires de la structure en réutilisant la stratégie RB au niveau du solveur, afin de réduire significativement la mémoire requise et le temps de calcul.

Nous considérons une méthode de sous-structuration sans recouvrement fondée sur la décomposition naturelle du domaine de la structure *lattice* en cellules unitaires : la méthode FETI-DP inexacte fondée sur la réduction de modèle (ROM), introduite dans [2]. En résumé, cette méthode repose sur trois composantes principales :

- (i) Dans les méthodes FETI-DP, les contraintes de continuité du déplacement aux coins des cellules unitaires sont maintenues tout au long du processus itératif, ce qui conduit naturellement à un problème grossier à chaque itération, tandis que les autres contraintes sont imposées par des multiplicateurs de Lagrange.
- (ii) En suivant le cadre des algorithmes FETI-DP inexacts [3], la résolution d’un grand nombre de systèmes locaux est évitée. Ceci est réalisé en itérant directement sur le problème de point-selle, tout en construisant un préconditionneur par blocs dédié, cohérent avec la structure du problème.
- (iii) Les cellules principales identifiées par la stratégie RB sont exploitées dans le préconditionneur du FETI-DP inexact afin de construire des bases réduites permettant d’approximer efficacement les nombreux systèmes locaux.

Le point de départ est le système de point-selle suivant :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{d} \end{pmatrix}, \quad \text{avec} \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{RR} & \mathbf{K}_{RP} \\ \mathbf{K}_{RP}^T & \mathbf{K}_{PP} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_R \\ \mathbf{u}_P \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_R \\ \mathbf{f}_P \end{pmatrix},$$

où \mathbf{K} désigne la matrice globale de rigidité (ou tangente) et \mathbf{f} le vecteur de charge (ou résidu). Les degrés de liberté (DDLs) de déplacement sont partitionnés entre les DDLs primaux (situés aux coins des cellules et notés P), assemblés globalement, et les DDLs restants (notés R), comprenant les DDLs intérieurs ainsi que les DDLs duaux situés aux interfaces entre cellules — ces derniers étant imposés via des multiplicateurs de Lagrange. Les multiplicateurs $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^L$ représentent ces contraintes de continuité, L étant le nombre total d’équations de continuité imposées de manière faible (contenues dans \mathbf{d}). La matrice \mathbf{B} est la matrice de couplage, associée aux conditions de continuité inter-cellules (elle s’annule pour les DDLs primaux).

Cette approche permet d’approcher les solutions des systèmes locaux (cellule par cellule) en utilisant la stratégie RB, contrairement à la méthode FETI-DP classique où ces problèmes doivent être résolus exactement. De plus, en adoptant une approche sans assemblage complet (*matrix-free*), on évite de construire explicitement tous les sous-blocs du préconditionneur : leur action sur un vecteur est calculée à la volée. En pratique, seules les matrices locales principales sont assemblées explicitement.

Pour appliquer ce préconditionneur par blocs à un vecteur, il est nécessaire de résoudre un problème d’interface, traité de manière itérative à l’aide d’un préconditionneur finement ajusté reposant, là encore, sur la stratégie RB (voir [2] pour plus de détails). Sur la base de la technique de sous-structuration du FETI-DP, ce problème d’interface est défini par condensation des DDLs de déplacement et construction du complément de Schur dual global. Ce complément de Schur dual est obtenu en résolvant un problème grossier posé sur les DDLs primaux (impliquant le complément de Schur primal global), construit en éliminant les DDLs restants. L’ensemble des opérateurs intervenant dans la résolution de ce problème d’interface est dérivé des opérateurs des cellules principales à l’aide de la stratégie RB. Cette méthode est synthétisée dans la Fig. 2.

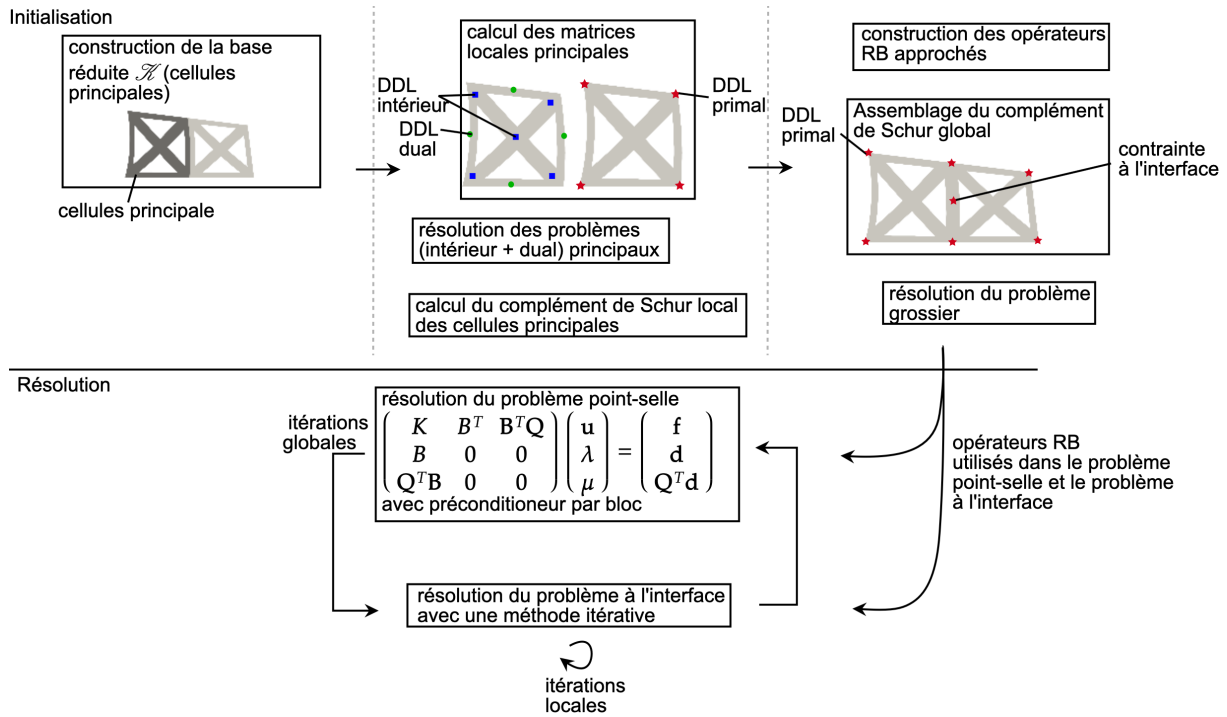


FIGURE 2 – Schéma récapitulatif de la méthode FETI-DP inexacte intégrant la stratégie de base réduite (RB).

3.2 Préconditionneur parallèle multi-niveaux *matrix-free*

Afin de réaliser des simulations à grande échelle, c'est-à-dire comportant jusqu'à plusieurs centaines de milliers de cellules, nous concevons un préconditionneur dédié pour le système linéaire [1]. Ce préconditionneur repose sur une approche multi-niveaux. Plus précisément, il s'agit d'une méthode multi-grille géométrique *hp*, dans laquelle la hiérarchie des grilles est définie à la fois en fonction du degré des splines p et de la taille de maille h . La stratégie proposée peut être résumée par les éléments principaux suivants :

- (i) deux niveaux géométriques sont considérés : un niveau fin et un niveau grossier, chacun associé à des espaces de discrétisation emboîtés ;
- (ii) une approche *matrix-free* est utilisée au niveau fin pour le calcul des produits matrice–vecteur requis par les méthodes itératives ;
- (iii) un lisseur dédié, non standard, basé sur une méthode de décomposition de domaine (DD) est employé au niveau fin ;
- (iv) des opérateurs de transfert (restriction et prolongement), basés sur un raffinement simultané en degré p et en taille de maille h , sont également implémentés de manière *matrix-free* entre les deux niveaux ;
- (v) au niveau grossier, une correction de type multi-grille algébrique (AMG) est appliquée.

Le lisseur consiste en l'application d'une itération de la méthode de *restrictive additive Schwarz* (RAS). Pour appliquer ce lisseur, le domaine de calcul est décomposé en plusieurs sous-domaines avec recouvrement, chacun constitué d'un ensemble de cellules unitaires adjacentes. L'action de l'inverse local de la matrice de rigidité sur chaque sous-domaine est calculée de manière itérative à l'aide du solveur FETI-DP inexact basé sur la RB introduit en Section 3.1. La stratégie RB exploite la nature répétitive des cellules pour construire des bases réduites permettant d'approximer efficacement les nombreux systèmes locaux (associés à chaque cellule) à partir d'un petit nombre de cellules principales.

4 Résultats numériques

Dans cette section, nous évaluons l'efficacité de la méthode proposée en considérant à la fois les régimes de petites et de grandes déformations.

4.1 Petites déformations : élasticité linéaire

Nous considérons tout d'abord le régime des petites déformations en résolvant les équations de l'élasticité linéaire. Le cas test étudié correspond à une structure *lattice* tridimensionnelle en forme de poutre droite soumise à une flexion. La cellule unitaire de référence, de type *body-centered cubic*, est modélisée géométriquement à l'aide de 32 patches de B-splines linéaires. L'analyse est ensuite réalisée sur un maillage plus fin, avec $h = 1/2$ et des fonctions de degré $p = 2$.

Une étude de scalabilité faible (*weak scaling*) du préconditionneur multi-niveaux proposé est conduite sur ce cas test. Une série de configurations comportant un nombre croissant de cellules (et donc un nombre croissant de DDL) et de processus (c'est-à-dire de sous-domaines) est considérée, tout en maintenant approximativement constant le rapport entre ces deux quantités.

Les résultats de l'analyse structurale de ce cas test sont présentés sur la figure Fig. 3. Le tableau Table 1 indique le nombre d'itérations ainsi que les temps de calcul pour la phase d'initialisation et la phase de résolution, pour différentes configurations impliquant un nombre croissant de cellules et de processus MPI. Le panneau de gauche de la Table 1 montre les temps de calcul pour les étapes d'initialisation et de résolution en fonction du nombre de processus, ainsi que le nombre de DDL par processus en fonction du nombre total de processus. Le rapport entre le nombre de cellules et le nombre de processus MPI varie entre 52 et 64 pour toutes les configurations.

Dans tous les scénarios considérés, on observe que le nombre d'itérations ne dépend pas de la taille du problème. De plus, le temps de calcul nécessaire à la résolution du système linéaire reste du même ordre de grandeur pour l'ensemble des configurations, garantissant ainsi un comportement quasi-idéal en faible passage à l'échelle. Ces simulations vont bien au-delà de l'état de l'art : à notre connaissance, de telles structures *lattice* de grande taille n'avaient encore jamais été simulées à l'aide d'une approche volumique à fine échelle.

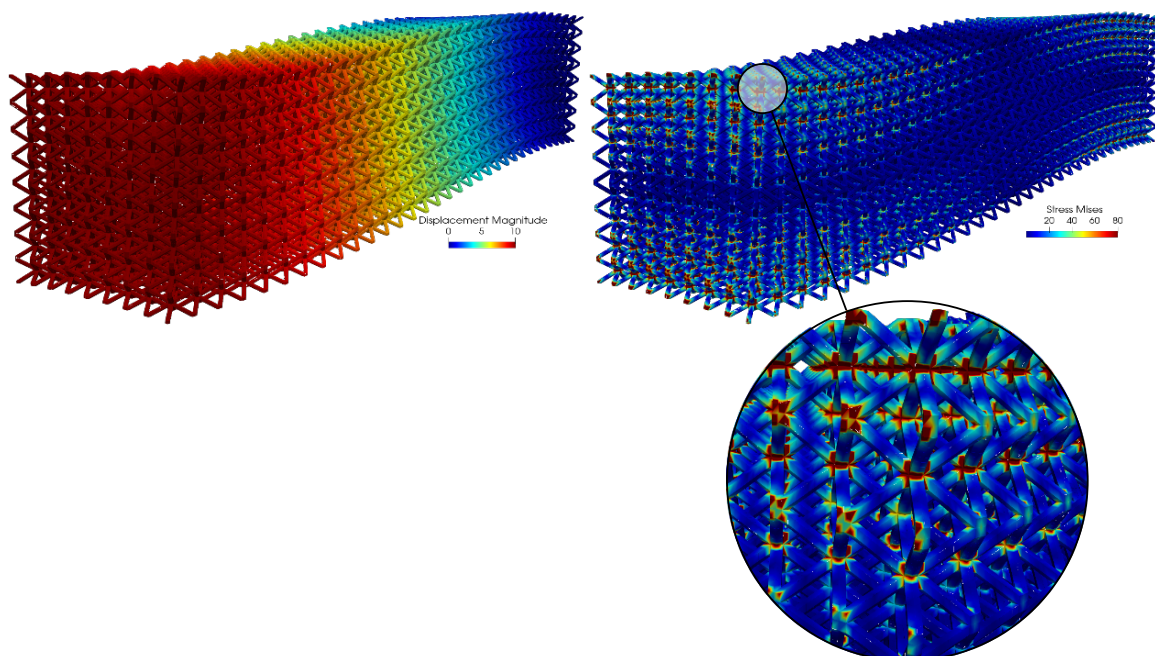


FIGURE 3 – Résultats de l'analyse structurale pour la poutre droite 3D comportant 2 048 cellules unitaires, $p = 2$, $h = 1/2$.

TABLE 1 – Étude de scalabilité faible (*weak scaling*) sur le cas test de la poutre droite 3D, avec $p = 2$, $h = 1/2$.

# cellules	# processus	# DDL	# itérations	temps (s)	
				résolution	initialisation
5x5x20 (500)	8	3.7M	15	224	114
10x10x40 (4 000)	64	29.7M	16	441	146
19x19x76 (27 436)	512	203M	16	494	159
37x37x148 (202 612)	4 096	1.5B	16	565	207

4.2 Grandes déformations : hyperélasticité non linéaire

Nous considérons à présent le régime des grandes déformations, en utilisant un matériau hyperélastique de type néo-Hookéen comme modèle constitutif, avec un module de Young $E = 5000$ MPa et un coefficient de Poisson $\nu = 0,40$.

La structure *lattice* est composée de cellules unitaires, constituées d'un carré creux comportant un trou circulaire, construites géométriquement à l'aide de quatre patchs quadratiques. L'analyse est ensuite réalisée sur un maillage plus fin avec $h = 1/8$ et des fonctions de degré $p = 3$. La géométrie macroscopique correspond à un domaine carré, modélisé par un unique patch linéaire. Un déplacement imposé de $\mathbf{u}_{y,0} = -0,82$ mm (soit une déformation de 20,5%) est appliqué.

La contrainte principale maximale correspondant à différents déplacements imposés est illustrée à la Fig. 4. Des structures de type similaire, avec des cellules unitaires percées, ont également été étudiées dans [4, 5, 6], qui rapportent un motif de déformation caractéristique sous compression. L'évolution des déformations de la structure pour divers taux de déformation est représenté à la Fig. 4.

Le processus de déformation peut être divisé en deux phases : un régime linéaire élastique et un régime hyperélastique non linéaire. Dans la phase élastique linéaire (pour des déformations inférieures à 16%), les trous circulaires subissent une compression progressive et uniforme, conduisant à une déformation quasi-affine. À mesure que la déformation augmente et que la structure sort du régime linéaire, une transformation de motif apparaît, produisant des ellipses alternées et orthogonales. Cette transformation correspond au plateau observé immédiatement après la perte de linéarité. Lorsque la compression continue, les ellipses deviennent plus marquées : leurs axes majeurs s'allongent tandis que leurs axes mineurs se contractent avec l'augmentation de la déformation macroscopique.

Références

- [1] C. Guillet, T. Hirschler, P. Jolivet, and R. Bouclier. Multilevel matrix-free method for high-performance isogeometric analysis of lattice structures. *Journal of Computational Physics*, 537 :114136, 2025.
- [2] T. Hirschler, R. Bouclier, P. Antolin, and A. Buffa. Reduced order modeling based inexact FETI-DP solver for lattice structures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 125(8) :e7419, 2024.
- [3] A. Klawonn and O. Rheinbach. Inexact FETI-DP methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 69 :284–307, 2006.
- [4] K. Bertoldi, M.C. Boyce, S. Deschanel, S.M. Prange, and T. Mullin. Mechanics of deformation-triggered pattern transformations and superelastic behavior in periodic elastomeric structures. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 56(8) :2642–2668, 2008.
- [5] T. Guo, V.G. Kouznetsova, M.G. D. Geers, K. Veroy, and O. Rokoš. Reduced-order modeling for second-order computational homogenization with applications to geometrically parameterized elastomeric metamaterials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 126(1), 2024.
- [6] S.O. Sperling, T. Guo, R.H.J. Peerlings, V. G. Kouznetsova, M.G.D. Geers, and O. Rokoš. A comparative study of enriched computational homogenization schemes applied to two-dimensional pattern-transforming elastomeric mechanical metamaterials. *Computational Mechanics*, 74(1) :169–190, 2024.

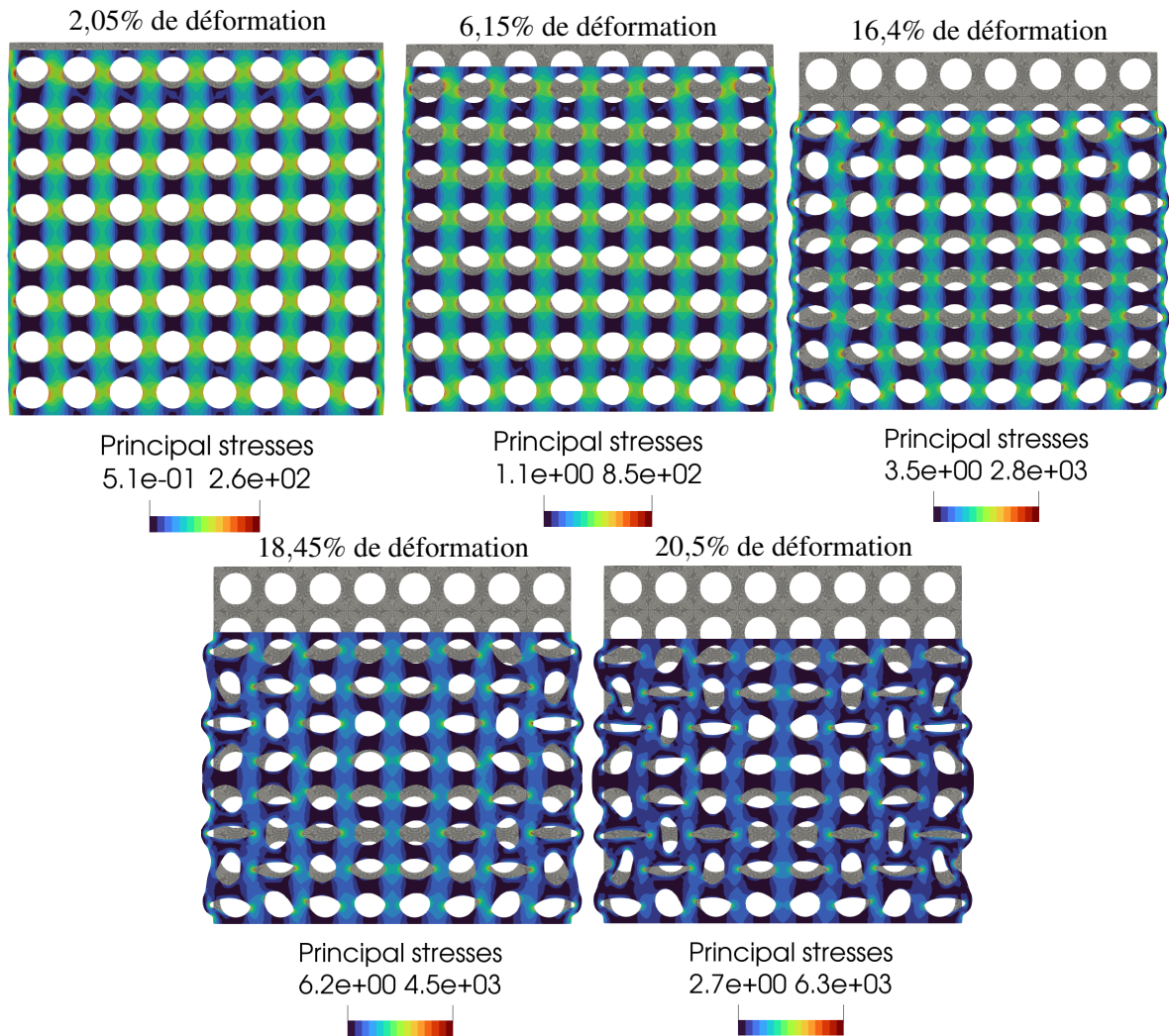


FIGURE 4 – Un déplacement vertical incrémental total de $u_{y,0} = 0,82$ mm, correspondant à 20,5% de déformation, est imposé sur la face supérieure. La structure *lattice* comprend $N_s = 32$ cellules unitaires de degré $p = 3$ et de taille de maille $h = 1/8$.