

Extension des solveurs FFT aux conditions aux limites non-périodiques en mécanique : implémentation parallèle dans *AMITEX**

Y. A. AMOUZOU-ADOUN¹; L. GÉLÉBART¹; C. FLAGEUL²; Y. WANG³

¹ Université Paris-Saclay, CEA, SRMA, Gif-sur-Yvette, 91191, France, yaovi.amouzou-adoun@cea.fr, lionel.gelebart@cea.fr

² Curiosity Group, Pprime Institute, CNRS - University of Poitiers - ENSMA, France, cedric.flageul@univ-poitiers.fr

³ Université Paris-Saclay, UVSQ, CNRS, CEA, Maison de la Simulation, 91191, Gif-sur-Yvette, France, yushan.wang@cea.fr

Résumé — Dans ce travail, nous proposons une extension naturelle aux conditions non-périodiques (Neumann et/ou Dirichlet) de l'approche itérative spectrale de type point fixe, utilisant la transformée de Fourier, jusqu'alors restreinte aux conditions périodiques [1]. En adoptant des schémas de différentiation finie de type hexaédrique [2] ou double tétraédrique [3], des opérateurs de Green discrets sont construits. L'implémentation de cette nouvelle approche est réalisée dans le code *AMITEX**, une nouvelle version en cours de développement du code massivement parallèle *AMITEX* [4]. Deux exemples de poutre en flexion sont proposés afin d'illustrer les nouvelles possibilités du futur code *AMITEX**.

Mots clés — Conditions non-périodiques, transformées trigonométriques, transformée de Fourier, opérateurs de Green discret, grandes transformations.

Grandeurs physiques et notations

\mathbf{u} vecteur de déplacement total, \mathbf{u}^* vecteur de déplacement imposé satisfaisant les conditions aux limites de Dirichlet, \mathbf{u}^f vecteur fluctuation de déplacement réponse du matériau à \mathbf{u}^* et/ou à une force imposée, $\boldsymbol{\sigma}$ tenseur d'ordre 2 de Cauchy, \mathbf{P} premier tenseur de Piola-Kirchoff d'ordre 2, $\mathbf{\Pi}$ second tenseur de Piola-Kirchoff d'ordre 2, \mathcal{F} loi de comportement quelconque (linéaire ou non-linéaire).

“ \odot ” produit tensoriel d'Hadamard (c'est-à-dire $[\mathbf{A} \odot \mathbf{B}]_{ij} = A_{ij}B_{ij}$), \widehat{E} transformée discrète de Fourier d'un champ périodique E et \widetilde{G} transformée discrète trigonométrique d'un champ G ayant des propriétés de symétries définies pour chacun des six plans du contour du volume considéré.

1 Contexte

Les travaux fondateurs de Moulinec et Suquet [1] introduisant une approche de résolution des problèmes en mécanique des matériaux, basée sur la transformée de Fourier (FFT) ont permis une avancée majeure. Bien qu'efficace du point de vue de la performance numérique en comparaison aux codes généralistes fondés sur la méthode des éléments finis, les codes basés sur une résolution par la FFT sont limités aux conditions aux limites (CL) de types périodiques.

Dans l'objectif d'aller au delà de cette limitation, le concept de zone tampon (ou buffer), permettant d'étendre le domaine étudié par une couche supplémentaire, a été proposée (voir par exemple [5, 6, 7]). Monchiet et Bonnet [8] ont quant à eux proposé de symétriser le domaine étudié et le chargement afin de reproduire des conditions Neumann et/ou Dirichlet. Cela revient à traiter un problème périodique sur une taille plus grande (multiplication du domaine par 8 en 3D). Cette méthodologie devient donc coûteuse en temps de calcul. Une résolution différente reposant sur l'utilisation des transformées trigonométriques en sinus/cosinus, qui remonte aux travaux de Wiegmann [9], a été récemment mise en œuvre afin d'appliquer des CL orthogonales mixtes uniformes [10]. L'établissement du lien entre les CL et les symétries des champs solutions permet d'exploiter les relations entre les transformées discrètes trigonométriques (DTT) et la transformée discrète de Fourier (DFT) pour résoudre le problème avec des CL non-périodiques. Dans ce contexte, une première preuve de concept, implémentée sous Matlab, a été mise en place pour un modèle de thermique linéaire [11].

Cette preuve de concept est ici étendue à la mécanique, linéaire, non-linéaire, en petites perturbations ainsi qu'en grandes transformations. L'implémentation proposée s'appuie sur *AMITEX**, une nouvelle

version du code *AMITEX* adossée à une évolution majeure de la librairie *2DECOMP&FFT* [12, 13] permettant d'appliquer les différents types de DTT. Ici, les CL (Neumann, Dirichlet ou Périodiques) sont définies par face et par composante du vecteur déplacement (ou traction). Enfin, en complément du schéma de différentiation finie hexaédrique [2], le schéma double tétraédrique récemment proposé [3, 14] a été introduit dans *AMITEX**.

2 Principe de l'extension aux conditions non-périodiques

Dans cette section, nous décrivons les différents aspects théoriques de la méthode de résolution spectrale pour des problèmes mécaniques avec CL de types Neumann et/ou Dirichlet. Les travaux en thermique de Gélébart [11] sont étendus ici au cas mécanique avec une implémentation parallèle et en introduisant différents schémas de différentiation finie servant à écrire l'opérateur de Green discret.

On considère une cellule hétérogène parallélépipédique, comme décrit sur la Figure 1, avec des faces $S_{i\alpha}$ avec $i \in \{1,2,3\}$ (correspondant à la direction de la normale) et $\alpha \in \{0,1\}$ (numéro de la face). Ce domaine est discrétisé en n_i voxels de taille h_i avec $i \in \{1,2,3\}$ (avec donc $N_i = n_i + 1$ nœuds par direction). Les CL sont ici appliquées par face et par composante du vecteur déplacement (ou contrainte) sur chaque face.

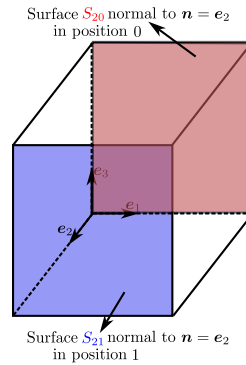


FIGURE 1 – Cellule hétérogène Ω de forme parallélépipédique avec des faces de type $S_{i\alpha}$, $i \in \{1,2,3\}$ (correspondant à la direction de la normale) et $\alpha \in \{0,1\}$ (numéro de la face)

2.1 Formulation du problème mécanique

Sans perte de généralité, en l'absence des forces de volumes et dans un cadre statique, on peut distinguer une formulation en petites et grandes transformations des problèmes mécaniques avec CL. En petites perturbations, le problème à résoudre est décrit par le système d'équations (1)

$$\text{Inconnue } \mathbf{u}^f / \left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} = 0 \quad \text{dans } \Omega \\ \underline{\underline{\sigma}} = \mathcal{F}(\nabla^s \mathbf{u}) \quad \text{dans } \Omega \quad \text{sachant que } \sigma_{ij} = \sigma_{ji} \\ \mathbf{u} = \mathbf{u}^* + \mathbf{u}^f \quad \text{dans } \Omega \\ \text{Sur les surfaces } S_{i\alpha} \quad i \in \{1,2,3\}; \alpha \in \{0,1\} \text{ de normale } \mathbf{n} : \\ u_j^f = 0 \quad (\text{CL de Dirichlet}) \text{ ou} \\ [\underline{\underline{\sigma}} \cdot \mathbf{n}]_j = t_j^* = 0 \quad (\text{CL de Neumann}) ; j \in \{1,2,3\} \end{array} \right. \quad (1)$$

Dans ce travail, on met l'accent sur le cadre grandes transformations. Le problème à résoudre est donné, en formulation lagrangienne, par le système d'équations (2)

$$\text{Inconnue } \mathbf{u}^f / \left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \underline{\underline{P}} = 0 \quad \text{dans } \Omega \\ \underline{\underline{\Pi}} = \mathcal{F}(\nabla \mathbf{u}) \quad \text{dans } \Omega \\ \mathbf{u} = \mathbf{u}^* + \mathbf{u}^f \quad \text{dans } \Omega \\ \text{Sur les surfaces } S_{i\alpha} \quad i \in \{1,2,3\}; \alpha \in \{0,1\} \text{ de normale } \mathbf{N} : \\ u_j^f = 0 \quad (\text{CL de Dirichlet}) \text{ ou} \\ [\underline{\underline{P}} \cdot \mathbf{N}]_j = T_j^* = 0 \quad (\text{CL de Neumann}) ; j \in \{1,2,3\} \end{array} \right. \quad (2)$$

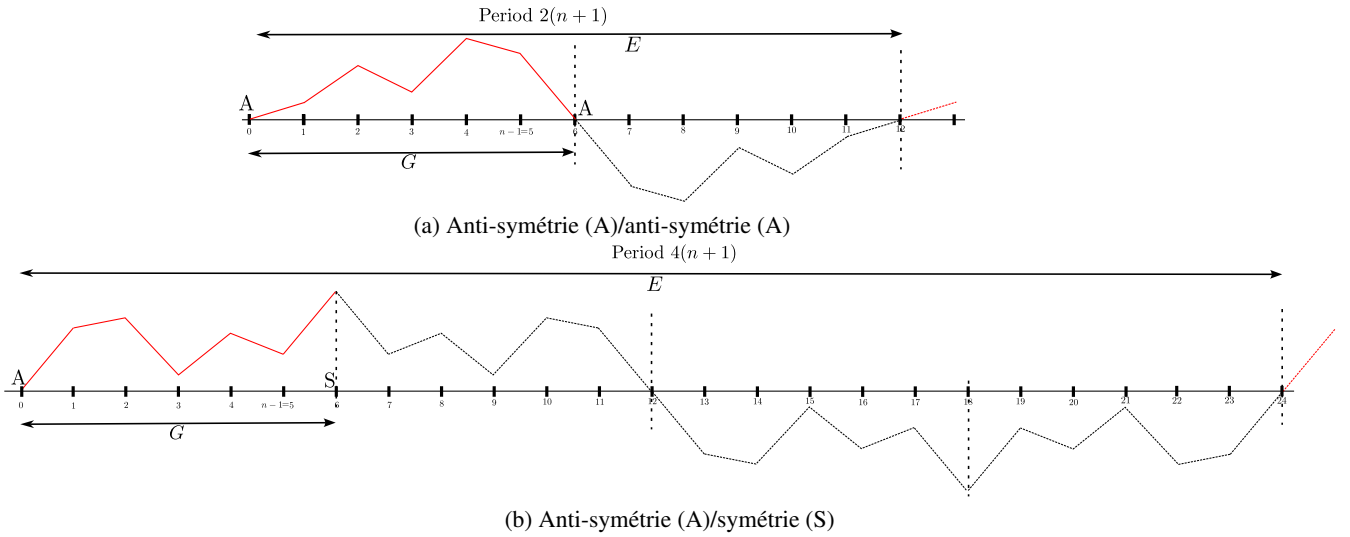


FIGURE 2 – Construction de champs périodiques E à partir de champs G possédant des propriétés symétries

Avec ces formulations, on remarque que les conditions de type Dirichlet mènent naturellement à des composantes de la fluctuation de déplacement \mathbf{u}^f qui s'annulent systématiquement aux bords concernés. De même, les conditions de Neumann conduisent ici à des composantes de la contrainte $\underline{\underline{P}}$ (ou $\underline{\underline{\sigma}}$ en petites perturbations) qui s'annulent systématiquement aux bords concernés (voir *remarque* ci-dessous).

Il est donc intéressant de traduire les conditions de Dirichlet sur \mathbf{u}^f et de Neumann sur $\underline{\underline{P}}$ par des propriétés d'anti-symétries spatiales sur les composantes concernées. Les composantes non soumises aux CL sont quant à elles supposées symétriques (spatiales) par rapport à la face considérée (dans ce cas, cela n'impose aucune valeur du champ sur les surfaces). Étant donné que la fluctuation de déplacement \mathbf{u}^f est l'inconnue du problème et rappelant que les contraintes représentent une quantité duale du gradient de \mathbf{u}^f , on peut résumer sans perte de généralité, que les conditions de Dirichlet et de Neumann correspondent respectivement aux caractères d'anti-symétries et de symétries (spatiales) sur les composantes concernées de \mathbf{u}^f . On décrit par la suite les conséquences de ces propriétés de symétries sur l'approche spectrale.

Remarque : Par souci de simplicité et de concision dans ce document, la formulation des CL de type Neumann est écrite avec un effort imposé nul, mais comme le montrent les exemples traités, des conditions de forces non-nulles peuvent être imposées.

2.2 Méthode spectrale

Considérant un matériau de référence homogène avec un tenseur d'élasticité \mathbb{C}_0 , le système (2) en grandes transformations est réécrit comme suit

$$(2) \iff \begin{cases} \nabla \cdot (\mathbb{C}_0 : \nabla \underline{\underline{u}}^f - \underline{\underline{P}}) = \underline{\underline{p}} = \nabla \cdot (\mathbb{C}_0 : \nabla \underline{\underline{u}}^f) & \text{dans } \Omega \\ \underline{\underline{\Pi}} = \mathcal{F}(\nabla \underline{\underline{u}}) & \text{dans } \Omega \\ \underline{\underline{u}} = \underline{\underline{u}}^* + \underline{\underline{u}}^f & \text{dans } \Omega \\ \text{Sur les surfaces } S_{i\alpha} \ i \in \{1, 2, 3\}; \alpha \in \{0, 1\} \text{ de normale } \mathbf{N} : \\ u_j^f = 0 & \text{(CL de Dirichlet) ou} \\ [\underline{\underline{P}} \cdot \mathbf{N}]_j = T_j^* = 0 & \text{(CL de Neumann) ; } j \in \{1, 2, 3\} \end{cases} \quad (3)$$

Le concept de l'approche de résolution itérative spectrale [1, 4], dans le contexte des champs de déformations périodiques, consiste en la déduction de \mathbf{u}^f en introduisant un opérateur de Green. En effet, à une itération donnée, on utilise l'équation

$$\underbrace{\underline{\underline{p}} = \nabla \cdot (\mathbb{C}_0 : \nabla \underline{\underline{u}}^f - \underline{\underline{P}})}_{\text{calcul de } \underline{\underline{p}} \text{ à l'itération en cours connaissant } \underline{\underline{u}}^f}$$

TABLE 1 – Correspondance entre les CL (à gauche et à droite), les symétries, les DTT et DFT pour un champ 1D. Neu. \equiv Neumann, Dir. \equiv Dirichlet, A \equiv anti-symétrie, S \equiv symétrie

CL	Symétries	DTT(G)	DFT(E)
Neu./Neu.	S/S	$\tilde{G}_k = \sum_{j=0}^{N-1} \beta_j g_j \cos(\xi^k j)$ avec $\xi^k = \frac{\pi k}{N-1}$; $\beta_j = 2 - \delta_{j,0} - \delta_{j,N-1} \quad \forall k \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket$	$\hat{E}_k = \tilde{G}_k$
Neu./Dir.	S/A	$\tilde{G}_k = g_0 + 2 \sum_{j=1}^{N-2} g_j \cos(\xi^k j)$ avec $\xi^k = \frac{\pi(k+1/2)}{N-1}$; $\forall k \in \llbracket 0, N-2 \rrbracket$	$\hat{E}_k = 2\tilde{G}_k$
Dir./Dir.	A/A	$\tilde{G}_k = 2 \sum_{j=0}^{N-3} g_j \sin(\xi^k(j+1))$ avec $\xi^k = \frac{\pi(k+1)}{N-1}$; $\forall k \in \llbracket 0, N-3 \rrbracket$	$\hat{E}_k = -i\tilde{G}_k$
Dir./Neu.	A/S	$\tilde{G}_k = (-1)^k g_{N-2} + 2 \sum_{j=0}^{N-3} g_j \sin(\xi^k(j+1))$ avec $\xi^k = \frac{\pi(k+1/2)}{N-1}$; $\forall k \in \llbracket 0, N-2 \rrbracket$	$\hat{E}_k = -2i\tilde{G}_k$

pour calculer le champ p dans l'espace de Fourier. Par la suite en écrivant l'égalité

$$\underbrace{\nabla \cdot (\mathbb{C}_0 : \nabla \mathbf{u}^f)}_{\text{prédiction de } \mathbf{u}^f \text{ pour l'itération suivante}} = \mathbf{p}$$

toujours dans l'espace de Fourier, on déduit \mathbf{u}^f à l'itération suivante (application de l'opérateur de Green). Sachant que les CL de Neumann et/ou Dirichlet mènent à des champs possédant des propriétés de symétries et non de périodicité, l'approche spectrale en Fourier ne peut pas être directement appliquée. Toutefois, le lien mathématique entre les DFT et les DTT permet de préserver les grandes lignes de l'approche basée sur la FFT.

Pour ce faire, considérons un champ discrétisé G unidimensionnel (1D) donné par ses valeurs discrètes g_j et qui possède des propriétés de symétries (A \equiv anti-symétrie, S \equiv symétrie spatiale). En fonction des symétries de G , il est possible de construire *virtuellement* un champ étendu E périodique. En effet, en prolongeant le champ G deux ou quatre fois, on obtient un champ E périodique. La Figure 2 montre deux exemples de champs G anti-symétrie/anti-symétrie (A/A) et anti-symétrie/symétrie (A/S). On peut alors calculer \hat{E} c'est-à-dire la DFT de E et, la relier à \tilde{G} la DTT du champ originel G . Le Tableau 1 résume les liens entre les CL de type Neumann et/ou Dirichlet, les symétries, les DFT et les DTT. Les correspondances entre \hat{E} et \tilde{G} permettent de ne pas étendre physiquement le domaine simulé. Ces liens étant clairement établis, dans la suite du document et dans l'objectif de ne pas alourdir les notations, on utilise la notation \tilde{G} pour un champ G possédant des propriétés de symétries. Le cas tridimensionnel (3D) est une extension directe.

Avec les conditions générales non-périodiques, le système (3) peut être finalement résolu en employant l'approche itérative décrite précédemment. L'expression complète de l'opérateur de Green discret est donnée dans la section qui suit en fonction du schéma de différentiation finie.

2.3 Opérations de dérivation et opérateur de Green discret

Afin de construire l'opérateur de Green discret, on choisit d'utiliser une approche basée sur l'utilisation de schéma de différentiation finie [2, 11]. Deux schémas, hexaédrique [2] et double tétraédrique [3], sont considérés dans ce travail (voir Figure 3). La dérivation d'un champ défini aux nœuds produit un champ défini aux centres des voxels et inversement. Le schéma hexaédrique fait intervenir tous les huit nœuds en une fois, menant à un unique point de dérivation. Quant au schéma double tétraédrique, deux points de dérivation sont obtenus en passant des nœuds aux centres de voxels et un point de dérivation

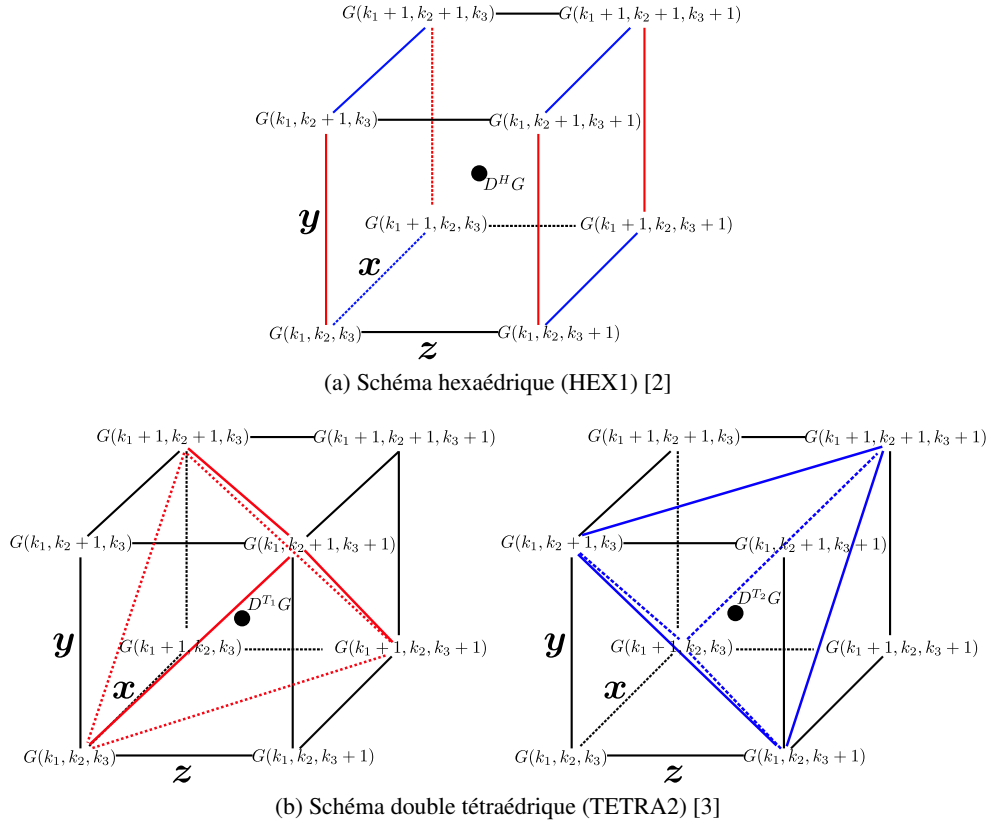


FIGURE 3 – Schéma de différentiation finie

en passant des centres de voxels aux nœuds. Sur la base de ces schémas, les opérations de dérivation, à savoir le gradient et la divergence intervenant dans le système (3), sont exprimées dans l'espace réel et dans l'espace spectral. On peut par la suite en déduire l'opérateur de Green discret.

2.3.1 Opérations de dérivation

Avec le schéma hexaédrique, les opérations discrètes de gradient (sur un champ vectoriel \mathbf{G}) et de divergence (sur un champ tensoriel \mathcal{G}) sont données dans l'espace spectral par

$$\widehat{d\nabla_{\sim}^H \mathbf{G}} = i \left[\widehat{\mathcal{G}} \otimes \boldsymbol{\xi}_H \right] \exp \left[i \frac{\xi_1 + \xi_2 + \xi_3}{2} \right] \quad ; \quad \widehat{d\nabla^H \cdot \mathcal{G}} = i \left[\widehat{\mathcal{G}} \cdot \boldsymbol{\xi}_H \right] \exp \left[i \frac{\xi_1 + \xi_2 + \xi_3}{2} \right]$$

avec ξ_1, ξ_2 et ξ_3 des fréquences (valeurs ξ^k dans le Tableau 1) qui dépendent de la symétrie du champ \mathbf{G} (ou \mathcal{G}) et $\boldsymbol{\xi}_H$ le vecteur fréquence modifiée à valeurs réels

$$\boldsymbol{\xi}_H = \begin{pmatrix} \frac{2}{h_1} \sin\left(\frac{\xi_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi_3}{2}\right) \\ \frac{2}{h_2} \cos\left(\frac{\xi_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi_3}{2}\right) \\ \frac{2}{h_3} \cos\left(\frac{\xi_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi_2}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi_3}{2}\right) \end{pmatrix}$$

Pour le schéma double tétraédrique, les gradients et divergences s'écrivent

$$\begin{aligned} \widehat{d\nabla_{\sim}^{T_1} \mathbf{G}} &= \left[\widehat{\mathcal{G}} \otimes \boldsymbol{\xi}_{T_1} \right] \exp \left[i \frac{\xi_1 + \xi_2 + \xi_3}{2} \right] \quad ; \quad \widehat{d\nabla_{\sim}^{T_2} \mathbf{G}} = \left[\widehat{\mathcal{G}} \otimes \boldsymbol{\xi}_{T_2} \right] \exp \left[i \frac{\xi_1 + \xi_2 + \xi_3}{2} \right] \\ \widehat{d\nabla^{T_1} \cdot \mathcal{G}} &= \left[\widehat{\mathcal{G}} \cdot \boldsymbol{\xi}_{T_1} \right] \exp \left[i \frac{\xi_1 + \xi_2 + \xi_3}{2} \right] \quad ; \quad \widehat{d\nabla^{T_2} \cdot \mathcal{G}} = \left[\widehat{\mathcal{G}} \cdot \boldsymbol{\xi}_{T_2} \right] \exp \left[i \frac{\xi_1 + \xi_2 + \xi_3}{2} \right] \end{aligned}$$

avec ξ_{T_1} et ξ_{T_2} les vecteurs fréquences modifiées à valeurs complexes

$$\xi_{T_1} = \begin{pmatrix} \frac{2}{h_1} \cos\left(\frac{\xi_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi_2}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi_3}{2}\right) \\ \frac{2}{h_2} \sin\left(\frac{\xi_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi_2}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi_3}{2}\right) \\ \frac{2}{h_3} \sin\left(\frac{\xi_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi_3}{2}\right) \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} \frac{2}{h_1} \sin\left(\frac{\xi_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi_3}{2}\right) \\ \frac{2}{h_2} \cos\left(\frac{\xi_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi_3}{2}\right) \\ \frac{2}{h_3} \cos\left(\frac{\xi_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi_2}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi_3}{2}\right) \end{pmatrix} ; \quad \xi_{T_2} = -\overline{\xi_{T_1}}$$

L'opérateur de Green discret peut donc être déduit en fonction du schéma de différentiation finie.

2.3.2 Opérateur de Green discret

Il est important de noter que divers options peuvent être utiliser pour décrire le comportement du matériau de référence. En s'inspirant des travaux de Paux et al. [15] et dans l'objectif de pouvoir appliquer toutes les CL possibles, nous employons ici le pré-conditionneur suivant

$$\begin{cases} \mathbf{p} = \mathbf{d}\nabla \cdot (\mathbb{C}_0 : \mathbf{d}\nabla \tilde{\mathbf{u}}^f - \underline{\mathbf{P}}) \\ \mathbf{d}\nabla \cdot (\mathbb{C}_0 : \mathbf{d}\nabla \tilde{\mathbf{u}}^f) = \mathbf{p} \end{cases} \quad \text{avec } \mathbb{C}_0 : \mathbf{d}\nabla \tilde{\mathbf{u}}^f = 2\mu_0 \mathbf{d}\nabla \tilde{\mathbf{u}}^f + \lambda_0 \mathbf{d}\nabla \tilde{\mathbf{u}}^f \odot \underline{\mathbf{I}}$$

μ_0 et λ_0 les coefficients de Lamé du matériau de référence. On obtient l'opérateur de Green discret \widehat{G}_0 suivant le schéma de différentiation finie :

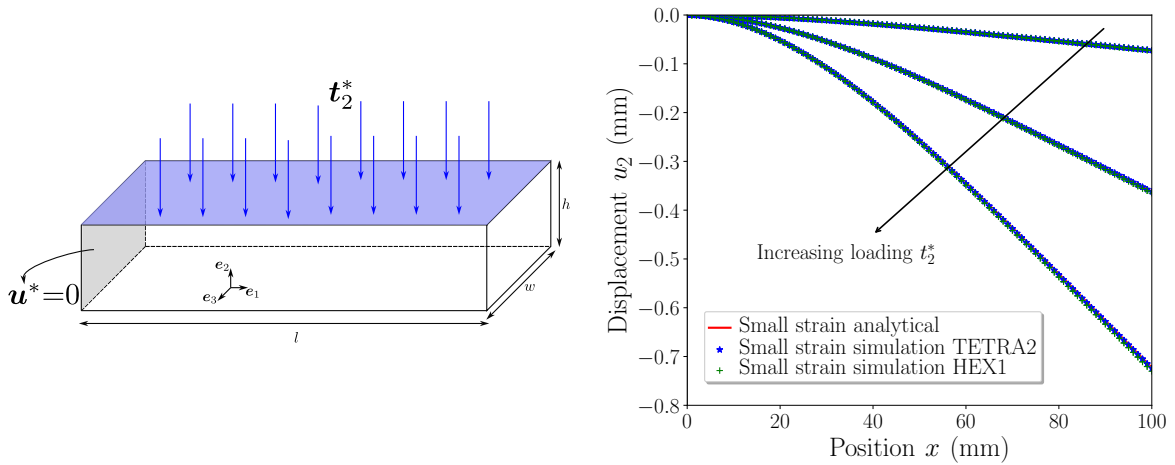
$$\widehat{u}_i^f = -\frac{1}{2\mu_0 \|\xi_H\|^2 + \lambda_0 (\xi_H^i)^2} \widehat{p}_i = {}_H \widehat{G}_0(\widehat{\mathbf{p}}) \quad (\xi_H \text{ à valeurs réelles pour HEX1})$$

$$\widehat{u}_i^f = -\frac{1}{2\mu_0 \|\xi_{T_1}\|^2 + \lambda_0 |\xi_{T_1}^i|^2} \widehat{p}_i = {}_{T_1 T_2} \widehat{G}_0(\widehat{\mathbf{p}}) \quad (\xi_{T_1} \text{ à valeurs complexes pour TETRA2})$$

3 Exemples de simulation numérique

En guise d'applications, des exemples de flexion en élasticité petites et grandes transformations sont traités dans cette section.

3.1 Flexion de poutre encastree : effort réparti



(a) Mise en place : $l \times w \times h = 100 \times 10 \times 10 \text{ mm}^3$ avec $100 \times 10 \times 10$ voxels

(b) Déformée de la poutre au cours du chargement en fonction des schémas de différentiation finie

FIGURE 4 – Flexion d'une poutre encastree soumise à un effort réparti

Considérons une poutre élastique dont la loi de comportement est décrite par la loi de Hooke

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C} : \underline{\underline{\nabla}}^s \underline{\underline{u}} = \mu \underline{\underline{\nabla}}^s \underline{\underline{u}} + \lambda \text{tr}(\underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{u}}) \underline{\underline{1}}$$

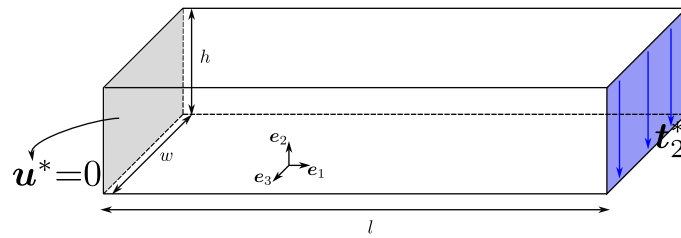
et soumise à un chargement réparti sur sa surface supérieure avec un encastrement sur l'extrémité gauche comme schématisé à la Figure 4a.

La solution analytique de ce problème est donnée par

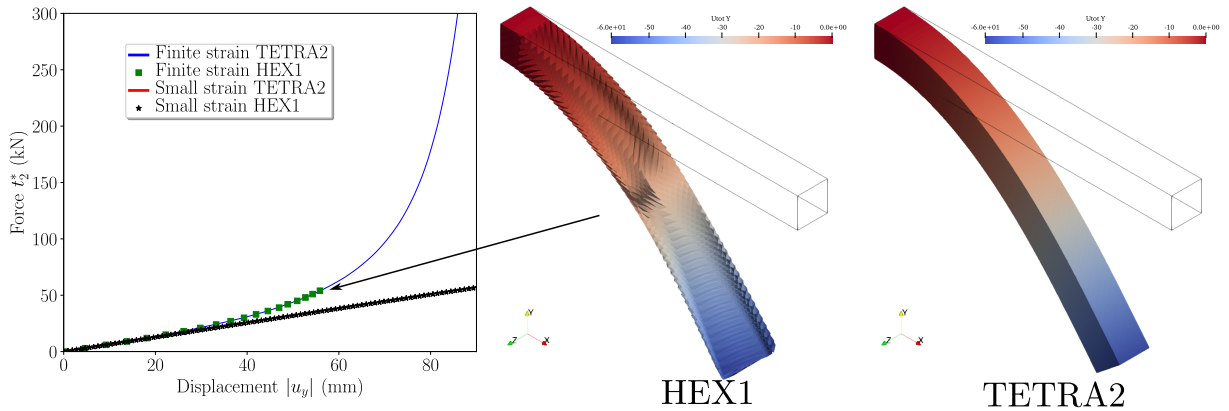
$$u_2(x) = -\frac{t_2^* w}{EI} \left(\frac{l^2 x^2}{4} - \frac{l x^3}{6} + \frac{x^4}{24} \right) \quad \text{avec} \quad I = \frac{w h^3}{12} \quad \text{et} \quad x \in [0, l]$$

E est le module de Young. La Figure 4b présente la déformée de la poutre pour un chargement croissant et cela pour les deux schémas HEX1 et TETRA2. On remarque un très bon accord avec la solution analytique. Cet exemple consiste en une première validation de l'implémentation des conditions de Neumann et des schémas de différentiation finie dans *AMITEX*^{*}. Le prochain exemple en grandes transformations permet de mieux distinguer l'effet de ces deux schémas HEX1 et TETRA2.

3.2 Flexion de poutre encastree : effort à l'extrémité



(a) Mise en place : $l \times w \times h = 100 \times 10 \times 10 \text{ mm}^3$ avec $100 \times 10 \times 10$ voxels



(b) Réponses macroscopiques en flexion et visualisation de la déformée, *sans amplification*, de la poutre en grandes transformations en fonction des schémas de différentiation finie

FIGURE 5 – Flexion d'une poutre encastree soumise à un effort appliqué à l'extrémité : petites et grandes transformations

L'exemple traité dans cette section concerne une poutre encastree soumise à un effort à son extrémité droite (voir Figure 5a). On considère un matériau hyper-élastique avec une formulation en grandes transformations telle que

$$\underline{\underline{\Pi}} = \mathbb{C} : \underline{\underline{E}} = \mu \underline{\underline{E}} + \lambda \text{tr}(\underline{\underline{E}}) \underline{\underline{1}} \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{E}} = \frac{1}{2} (\underline{\underline{F}}^T \underline{\underline{F}} - \underline{\underline{1}}) \quad \text{et} \quad \underline{\underline{F}} = \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{u}}$$

La Figure 5b montre la réponse macroscopique en flexion. Les prédictions, linéaires en petites transformations et non-linéaires en grandes transformations, sont identiques pour un faible niveau de force appliquée. En grandes transformations, on remarque que le schéma HEX1 conduit à des oscillations sur le champ de déplacement et finalement à une non-convergence du calcul pour des efforts appliqués élevés. Le schéma TETRA2 quant à lui, donne une bien meilleure description du déplacement, permettant ainsi d'appliquer des chargements en force très élevés.

4 Conclusion

Dans ce travail, l'approche basée sur la transformée de Fourier [1] initialement limitée aux champs de déformations périodiques, est étendue aux conditions non-périodiques (Dirichlet/Neumann) et implémentée dans une nouvelle version *AMITEX**, en cours de développement, du code massivement parallèle *AMITEX*. Le premier point de la nouvelle approche consiste à faire le lien entre les conditions aux limites et les symétries des champs recherchés. Par la suite, il est possible d'établir une relation entre ces symétries, les transformées trigonométriques (DTT) et la transformée de Fourier (DFT).

Grâce aux schémas de différentiation finie hexaédrique (HEX1) [2] et double tétraédrique (TETRA2) [3, 14], les opérations de dérivation (dans l'espace réel et dans l'espace spectral) peuvent être réalisées. Cela permet de construire l'opérateur de Green discret correspondant.

Des chargements en flexion ont été mis en place afin de valider l'approche proposée et son implémentation. Ces exemples en élasticité petites et grandes transformations ont permis de comparer aussi les performances des deux schémas HEX1 et TETRA2. On remarque que le schéma TETRA2 donne de meilleurs résultats spécialement pour des chargements fortement non-homogènes. Des exemples avec des conditions de Dirichlet et d'autres plus complexes notamment en plasticité cristalline ont également été traités et seront présentés au cours de la conférence.

Au vue des observations sur les schémas de différentiation finie, il serait intéressant dans un futur travail d'introduire des schémas de type C3D20, C3D20R. En outre, il faudrait appliquer la nouvelle approche sur des problèmes couplés (thermo-mécanique) et sur des modèles d'ordre supérieur de type plasticité à gradient.

Références

- [1] H. Moulinec, P. Suquet, *A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 157, 69–94, 1998.
- [2] F. Willot, *Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields*, Comptes Rendus. Mécanique 343, no. 3, p. 232-245. 2015
- [3] A. Finel, *A tetrahedron-based discretization for FFT-based computational homogenization with smooth solution fields*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 436, 117703, 2025.
- [4] L. Gélébart, J. Derouillat, *AMITEX_FFTP-Simulations FFT massivement parallèles en mécanique des matériaux hétérogènes*, 13e colloque national en calcul des structures, 2017.
- [5] L. Gélébart, *A modified FFT-based solver for the mechanical simulation of heterogeneous materials with Dirichlet boundary conditions*, Comptes Rendus. Mécanique 348 (8-9), 693-704, 2020.
- [6] N.B.N. Kaptchouang, L. Gélébart, *Multiscale coupling of FFT-based simulations with the LDC approach*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 394, 114921, 2022.
- [7] M. Zecevic, R. A. Lebensohn, *Extended FFT-based micromechanical formulation to consider general non-periodic boundary conditions*, International Journal of Solids and Structures, 311, 113225, 2025.
- [8] V. Monchiet, G. Bonnet, *FFT based iterative schemes for composite conductors with uniform boundary conditions*, European Journal of Mechanics - A/Solids, 103, 105146, 2024.
- [9] A. Wiegmann, *Fast Poisson, fast Helmholtz and fast linear elastostatic solvers on rectangular parallelepipeds*, Lawrence Berkeley National Lab. (LBNL), Berkeley, CA (United States), Tech. Rep., 1999.
- [10] H. Grimm-Strele, M. Kabel, *FFT-based homogenization with mixed uniform boundary conditions*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 122 (23), 7241–7265, 2021.
- [11] L. Gélébart, *FFT-based simulations of heterogeneous conducting materials with combined non-uniform Neumann, periodic and Dirichlet boundary conditions*, European Journal of Mechanics-A/Solids, 105, 105248, 2024.
- [12] N. Li and S. Laizet, *2DECOMP&FFT – A highly scalable 2D decomposition library and FFT interface*, Cray User Group 2010 conference, Edinburgh, 2010
- [13] S. Rolfo, C. Flageul, P. Bartholomew, F. Spiga, S. Laizet, *The 2DECOMP&FFT library : an update with new CPU/GPU capabilities*, Journal of Open Source Software, pp.5813, 8 (91), 2023.
- [14] L. Gélébart, *An accurate and robust FFT-based solver for transient diffusion in heterogeneous materials*, Comptes Rendus. Mécanique 353 (G1), 113-125, 2025.
- [15] J. Paux, L. Morin, L. Gélébart, and A. M. Amadou Sanoko, *A discrete sine-cosine based method for the elasticity of heterogeneous materials with arbitrary boundary conditions*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 433 :117488, 2025.