

Méthode sans matrice multigrille massivement parallèle pour le calcul non-linéaire sur image : application à des composants minces obtenus par fabrication additive LPBF

L. Gautier^{1,2}, X. Liu¹, M. Chevreuil¹, D. Bardel², J. Réthoré¹

¹ Nantes Université, Ecole Centrale Nantes, CNRS, GeM, UMR 6183, F-44000 Nantes, France, {mathilde.chevreuil}@univ-nantes.fr
{lilou.gautier,julien.rethore,xiaodong.liu}@ec-nantes.fr;

² Framatome, {lilou.gautier,didier.bardel}@framatome.com

Résumé — La technique de fabrication additive de fusion laser sur lit de poudre produit des pièces qui contiennent des défauts dont la taille, la forme et la distribution spatiale lui sont spécifiques. Une voie pour étudier leur impact sur le comportement de ces pièces consiste à effectuer du calcul directement sur des images 3D qui seraient acquises lors d'un contrôle par tomographie aux rayons X. Cela nécessite la mise en place d'une stratégie de calcul haute performance comme celle que nous proposons et qui utilise une méthode de résolution multigrille sans matrice préconditionnée de manière *ad hoc*.

Mots clés — multigrille, simulation sur images, fabrication additive, LPBF, défautologie.

1 Introduction

Les techniques de fabrication additive (FA) suscitent un intérêt significatif dans différentes applications industrielles en raison de leur potentiel d'optimisation des conceptions [14], de réduction des coûts et de raccourcissement des délais de production. Parmi ces techniques, le procédé de Fusion Laser sur Lit de Poudre (LPBF) se distingue par sa capacité à produire des composants avec des designs complexes et des propriétés matériaux satisfaisantes. En particulier, il permet l'obtention de géométries inaccessibles par les procédés de fabrication traditionnels. Ces caractéristiques sont également pertinentes dans l'industrie nucléaire, notamment pour les composants internes des réacteurs, qui sont fortement sollicités dans des espaces très restreints [1].

Malgré ses avantages, ce procédé présente aussi une défautologie particulière. Cette dernière se distingue par (1) la répartition spatiale spécifique des défauts, fortement corrélée au chemin du laser [5], (2) la variété de formes et de tailles des défauts en fonction de leur origine (inclusion de gaz, manque de fusion ou keyhole) [13]. Ces particularités suggèrent un fort potentiel d'interaction entre défauts. De plus, leur impact mécanique doit être justifié dans des structures rendues fines par l'optimisation géométrique. Ainsi, la validité de l'hypothèse de séparation des échelles pourrait être remise en question dans certaines configurations, ce qui proscrit l'utilisation de méthodes plus traditionnelles en ruptures ductiles, comme les modèles GTN [12].

C'est pourquoi, dans ce travail, on préfère une description explicite des populations de défauts. Aussi, pour s'affranchir de la procédure de maillage et tirer profit d'images de tomographie disponibles sur des populations de défauts réelles, on propose d'utiliser une méthode de calcul sur image. Pour conserver une bonne description de la géométrie, ce type de simulations implique un grand nombre de degrés de liberté. Elles nécessitent donc des méthodes de calcul haute performance (HPC) tant en termes de temps de calcul que de coût en mémoire. Ainsi, ce travail présente une stratégie multigrille sans matrice pour des calculs élasto-plastiques sans utilisation des variables internes aux niveaux grossiers. Elle est préférée, à des méthodes FFT par exemple, car elle permet, intrinsèquement, l'application de conditions limites de bord libre, qui sont d'intérêt pour les structures fines considérées.

2 Méthode multigrille sans matrice en élasto-plasticité

On considère un domaine Ω soumis à des déplacements imposés \underline{u}^{imp} sur son contour $\partial\Omega$. En négligeant les effets inertiels, résoudre le problème mécanique revient à trouver le déplacement $\underline{u}(x)$ vérifiant le principe des puissances virtuelles

$$\int_{\Omega} \underline{\underline{\sigma}}(\underline{u}) \nabla \underline{u}^* d\Omega = \int_{\partial\Omega} \underline{u}^* \underline{\underline{\sigma}}(\underline{u}^{imp}) \underline{n} dS \quad (1)$$

pour tout champ test $\underline{u}^*(x)$.

Autrement dit, il s'agit de vérifier l'équilibre entre les forces internes \underline{f}_{int} de puissance virtuelle associée

$$\int_{\Omega} \underline{\underline{\sigma}} \nabla \underline{u}^* d\Omega \quad (2)$$

et les forces externes \underline{f}_{ext} de puissance

$$\int_{\partial\Omega} \underline{u}^* \underline{\underline{\sigma}} \underline{n} dS. \quad (3)$$

La géométrie est décrite par une image tri-dimensionnelle en niveau de gris, discrétisée suivant le nombre de voxels la constituant. Elle est vue comme un maillage régulier de grille où chaque voxel correspond à un des 8 noeuds d'un élément fini hexaédrique linéaire. Cette structure de maillage assure une scalabilité quasi-optimale sur architecture massivement parallèle à mémoire distribuée. La microstructure est prise en compte *via* les propriétés matériaux définies aux noeuds. Ainsi, la valeur des modules de compressibilité hydrostatique B et de cisaillement G est interpolée linéairement depuis les noeuds en fonction de l'intensité du voxel associé : elle correspond à celle du matériau homogène pour un voxel blanc (255), et à 10^{-9} fois cette valeur pour un voxel noir (0).

La solution en déplacement est approximée par discrétisation en éléments finis, telle que

$$\underline{u}^c \simeq \sum_{j=1}^8 \Psi_j U_j^c, \quad (4)$$

avec Ψ_j les fonctions de formes et U_j^c la composante c du déplacement au noeud j . Ainsi, l'expression de la composante c des forces internes au noeud j s'exprime comme

$$F_{int}^c = \sum_e \sum_g w_g \sum_m \sigma_{cm} \Psi_{j,m}, \quad (5)$$

avec $\Psi_{j,m}$ la j -ème fonction de forme dérivée par rapport à la direction $m = \{1, 2, 3\}$ et g l'indice d'un des 8 points de Gauss de l'élément e .

En élasto-plasticité, le comportement du matériau ne dépend pas linéairement du déplacement. Ainsi, pour minimiser le résidu d'équilibre

$$R = F_{int} - F_{ext}, \quad (6)$$

on décompose la résolution en appliquant le chargement incrémentalement. À chaque incrément t , on cherche le déplacement qui minimise le résidu avec un algorithme de Newton. Ainsi, à chaque itération d'équilibre n , on cherche une correction δU à la solution en déplacement en résolvant le système linéaire

$$\frac{\partial R}{\partial U} \delta U = -R. \quad (7)$$

La stratégie de résolution proposée s'appuie sur la méthode multigrille matrix-free proposée par [10] en élasticité. Ainsi, un solveur itératif Gradient Conjugué Préconditionné (PCG) est utilisé pour résoudre le système linéaire (7). Cette option est préférée à des solveurs directs puisqu'elle permet d'éviter d'assembler la matrice de rigidité $\frac{\partial R}{\partial U}$ du système. Ce qui est critique dans le cas de simulations sur images de grande dimension.

Un préconditionneur de Jacobi est privilégié. Ainsi, seules les composantes diagonales de la matrice de rigidité ont besoin d'être assemblées et le calcul d'une relaxation s'effectue degré de liberté par degré de liberté (DdL-par-DdL).

Le solveur Jacobi-PCG n'est pas efficace seul pour corriger les erreurs basse fréquence. C'est pourquoi, il est couplé avec une méthode multigrille (MG). La méthode MG tire profit du maillage de grille régulière généré par l'image. Le principe est d'effectuer un faible nombre de relaxations coûteuses sur la grille fine puis de corriger la solution obtenue avec des calculs plus abordables sur des grilles grossières homogénéisées. De plus, les erreurs basse fréquence sur la grille fine se transforment en des erreurs haute fréquence sur les grilles grossières. Alors, elles peuvent être éliminées efficacement par le PCG.

Les propriétés matériaux des grilles grossières α^H ne sont pas connues *a priori*. Elles doivent être évaluées à partir des propriétés matériaux de la grille fine avec pour objectif d'assurer une bonne convergence du solveur MG. À nouveau, on suit la stratégie proposée par [9] qui utilise les bornes de Voigt α^{HV} et Reuss α^{HR} (VR) puisqu'elles peuvent être calculées récursivement d'une grille plus fine à plus grossière. Plus précisément, les propriétés matériaux des grilles grossières sont calculées comme la moyenne des moyennes arithmétiques et géométriques des bornes de VR des propriétés matériaux des grilles fines

$$\alpha^H = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} (\alpha^{HR} + \alpha^{HV}) + \sqrt{\alpha^{HR} \cdot \alpha^{HV}} \right). \quad (8)$$

Ce choix garantit que les propriétés matériaux des niveaux grossiers se trouvent entre les bornes physiques de VR tout en assurant une bonne performance du solveur.

Les champs nodaux sont transférés des grilles fines aux grilles grossières avec un opérateur de restriction \mathcal{R} et inversement des grilles fines aux grilles grossières avec un opérateur de prolongation $\mathcal{P} = \mathcal{R}^T$ comme détaillé dans [9].

Cette stratégie est schématisée dans la figure 1.

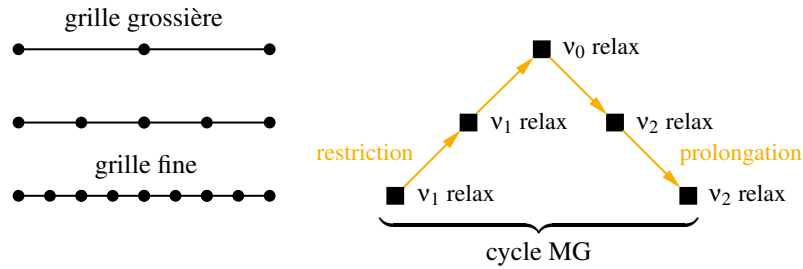


FIGURE 1 – Schéma du principe d'un V-cycle multigrille.

La méthode présentée ici revient à utiliser une stratégie MG linéaire pour résoudre un problème linéarisé comme dans [8], on parle de stratégies Newton-MG. Elle est habituellement moins performante lorsque le module d'écroutissage est faible et sensible à l'initialisation de la solution [4]. Une autre option, communément utilisée pour des problèmes non-linéaires, consiste à appliquer une stratégie MG non linéaire comme la méthode de Stockage d'Applications Complètes (FAS) [2]. Dans les deux cas, les variables internes décrivant le comportement du matériau sont généralement utilisées à tous les niveaux de grilles. Dans [8], le comportement plastique est intégré uniquement à l'échelle fine et les variables internes sont interpolées entre les niveaux MG. Par ailleurs, pour de bonnes performances du FAS il est nécessaire d'intégrer directement le comportement plastique à toutes les grilles [4].

Dans ce travail, on souhaite conserver le couplage PCG-MG et la stratégie de construction des grilles grossières homogénéisées proposés dans [10]. En effet, Liu a montré que cette structure permettait une convergence optimale pour des propriétés matériaux très contrastées comme dans notre étude [11]. Cela permet aussi de s'affranchir des coûts computationnels, d'implémentation et de mémoire induit par le transfert des variables internes ou la résolution du comportement plastique à toutes les échelles. Ainsi, on utilise le MG uniquement comme un accélérateur de convergence. On résout l'équilibre mécanique uniquement à l'échelle la plus fine et transfère uniquement des corrections de déplacement et deux propriétés matériaux scalaires entre les grilles. Alors, le choix de la méthode d'évaluation du préconditionneur du PCG est critique pour préserver une bonne qualité de convergence. On explore 2 stratégies différentes.

La première stratégie consiste à différencier le système linéaire résolu aux échelles fine et grossières. À l'échelle fine, on propose de calculer le préconditionneur à partir du module tangent consistant C' . Ainsi, pour un noeud j , la composante diagonale de la matrice de rigidité dans la direction $c = \{1, 2, 3\}$,

s'exprime comme

$$K_j^c = \sum_e \sum_g w_g \left(\sum_m \sum_p C'_{mccp} \Psi_{j,p} \Psi_{j,m} \right) \quad (9)$$

avec C' le module tangent consistant évalué au point de Gauss g . En revanche, aux échelles grossières, on utilise un préconditionneur élastique, entièrement déterminé par les modules de compressibilité hydrostatique B_g et de cisaillement G_g aux points de Gauss. Ainsi, la composante diagonale de la matrice de rigidité dans la direction $c = \{1, 2, 3\}$, s'exprime comme

$$K_j^c = \sum_e \sum_g w_g \left(\left(B_g + \frac{1}{3} G_g \right) \Psi_{j,c} \Psi_{j,c} + G_g \sum_m \Psi_{j,m} \Psi_{j,m} \right). \quad (10)$$

Pour la seconde stratégie, on complète la proposition précédente en améliorant les corrections apportées par les grilles grossières. Pour cela, on calcule des propriétés élastiques équivalentes (B' , G') à partir du tenseur d'élasticité isotrope le plus proche [3] du module tangent consistant C' :

$$9B' = C'_{1111} + C'_{2222} + C'_{3333} + 2(C'_{2233} + C'_{3311} + C'_{1122}), \quad (11)$$

$$15G' = C'_{1111} + C'_{2222} + C'_{3333} - C'_{2233} - C'_{3311} - C'_{1122} + 3(C'_{1212} + C'_{1313} + C'_{2323}), \quad (12)$$

qui sont évaluées après chaque itération d'équilibre. Ainsi, on calcule un préconditionneur élastique équivalent toujours en transférant uniquement deux propriétés matériau scalaires.

Dans les deux stratégies, on décompose le calcul en deux étapes : purement élastique puis élasto-plastique. Ainsi, on propage plus rapidement le déplacement imposé pendant le calcul élastique. De plus, on initialise la solution de l'incrément de chargement courant proportionnellement à celle de l'incrément précédent.

3 Applications

3.1 Cas test élémentaire

Les deux stratégies MG retenues sont appliquées sur un cas test élémentaire et comparées avec l'utilisation d'un préconditionneur totalement élastique. On considère un défaut sphérique unique représenté par 8 voxels dans son diamètre et placé au centre d'un cube de 64^3 voxels (figure 2). Il est soumis à

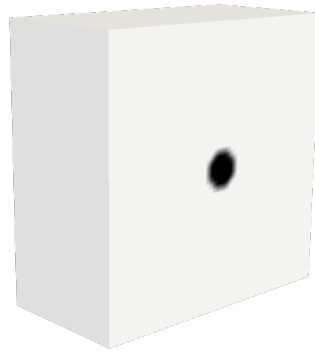


FIGURE 2 – Image de la moitié du cube contenant le défaut sphérique.

un chargement uniaxial en déformation imposée selon z à $u^{imp}/L = 1.25\%$. Le matériau suit un modèle élasto-plastique d'écrouissage linéaire isotrope avec $E = 200$ GPa, $\nu = 0.3$, $\sigma_y = 300$ MPa et $H = E/100$. L'intégration du comportement élastoplastique est effectuée avec MFront [6] et intégrée au solveur C++ avec MGIS [7]. L'incrément de chargement est choisi constant et fixé à $\Delta u^{imp}/L = 0.012\%$. Les paramètres des cycles MG sont fixés à 3 niveaux de grille et $\nu_0 = 30$, $\nu_1 = 2$ et $\nu_2 = 3$ relaxations du PCG respectivement sur la grille la plus grossière, lors des étapes de restriction et de prolongation.

La figure 3 présente le nombre cumulé de cycles MG nécessaires pour converger vers la solution, pour les 3 stratégies :

1. préconditionneur totalement élastique : (B, G),

2. préconditionneur tangent sur la grille fine et élastique sur les grilles grossières : $C' + (B, G)$,
3. préconditionneur tangent sur la grille fine et élastique équivalent sur les grilles grossières : $C' + (B', G')$.

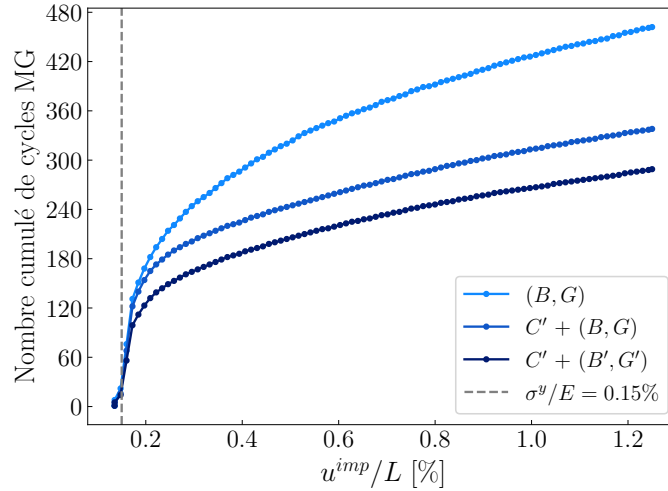


FIGURE 3 – Nombre cumulé de cycles MG nécessaires pour converger vers la solution, pour les 3 stratégies MG comparées.

La stratégie utilisant un préconditionneur élastique équivalent aux niveaux grossiers apparaît comme la plus performante. En effet, on remarque une diminution de 37.4% du nombre de cycles multigrilles nécessaires entre les stratégies 1 et 3. Plus particulièrement, l'utilisation combinée d'un préconditionneur tangent à l'échelle fine et d'un préconditionneur élastique équivalent aux échelles grossières permet une diminution de 15.5% du nombre de cycles MG nécessaires par rapport à la stratégie 2.

On analyse le comportement des deux stratégies à différents niveaux de plasticité. La figure 4 présente le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence du résidu d'équilibre pour un incrément de chargement. Le nombre de cycles multigrilles nécessaires à la résolution du système linéaire est indiqué par le nombre de point (\bullet) entre chaque itération (\star).

Dans les trois cas, un seul cycle MG par itération est presque systématiquement suffisant pour que la résolution du système linéaire converge. À faible niveau de plasticité, (figure 4a), les performances des deux stratégies à préconditionneur tangent sont similaires avec un gain de près de 50% sur le nombre d'itérations comparé à un préconditionneur totalement élastique. En revanche, lorsqu'un grand nombre d'éléments entrent en plasticité (figure 4b) la stratégie aux modules d'élasticité équivalents est plus efficace avec une diminution de 27.7% du nombre d'itérations nécessaires par rapport à la stratégie 2. Finalement, à plus haut niveau de plasticité (figure 4c), les performances des deux stratégies à préconditionneur tangent sont une nouvelle fois similaires. On remarque aussi que l'initialisation choisie pour la solution permet d'atteindre rapidement de faibles ordres de grandeurs du résidu d'équilibre.

Ainsi, pour la suite on retient la 3ème stratégie MG combinant préconditionneur tangent sur la grille fine et modules d'élasticité équivalents sur les grilles grossières.

3.2 Composant LPBF

Les performances de la stratégie multigrille retenue permettent et facilitent des calculs sur des microstructures plus complexes, adaptées aux composants LPBF. Ainsi, la même simulation est effectuée avec 5 niveaux MG, sur un composant fin de dimensions $0.44 \times 3.52 \times 7.04$ mm, discrétisé par $65 \times 513 \times 1025$ voxels. Il est peuplé de défauts sphériques de diamètre $d = 55$ μm , soient 8 voxels, pour atteindre une porosité de 1%. Ces derniers sont répartis en clusters structurés en motifs de grille, comme détaillé dans [5]. La figure 5 gauche, présente l'image de tomographie virtuelle correspondante avec les projections des centre des défauts dans les 3 directions.

La figure 6 présente le nombre cumulé de cycles multigrilles nécessaires pour converger vers la solution présentée dans la figure 5 en utilisant un incrément de chargement adaptatif. Ainsi, la méthodologie permet l'étude de structures fines et la caractérisation de l'impact mécanique de défauts critiques car

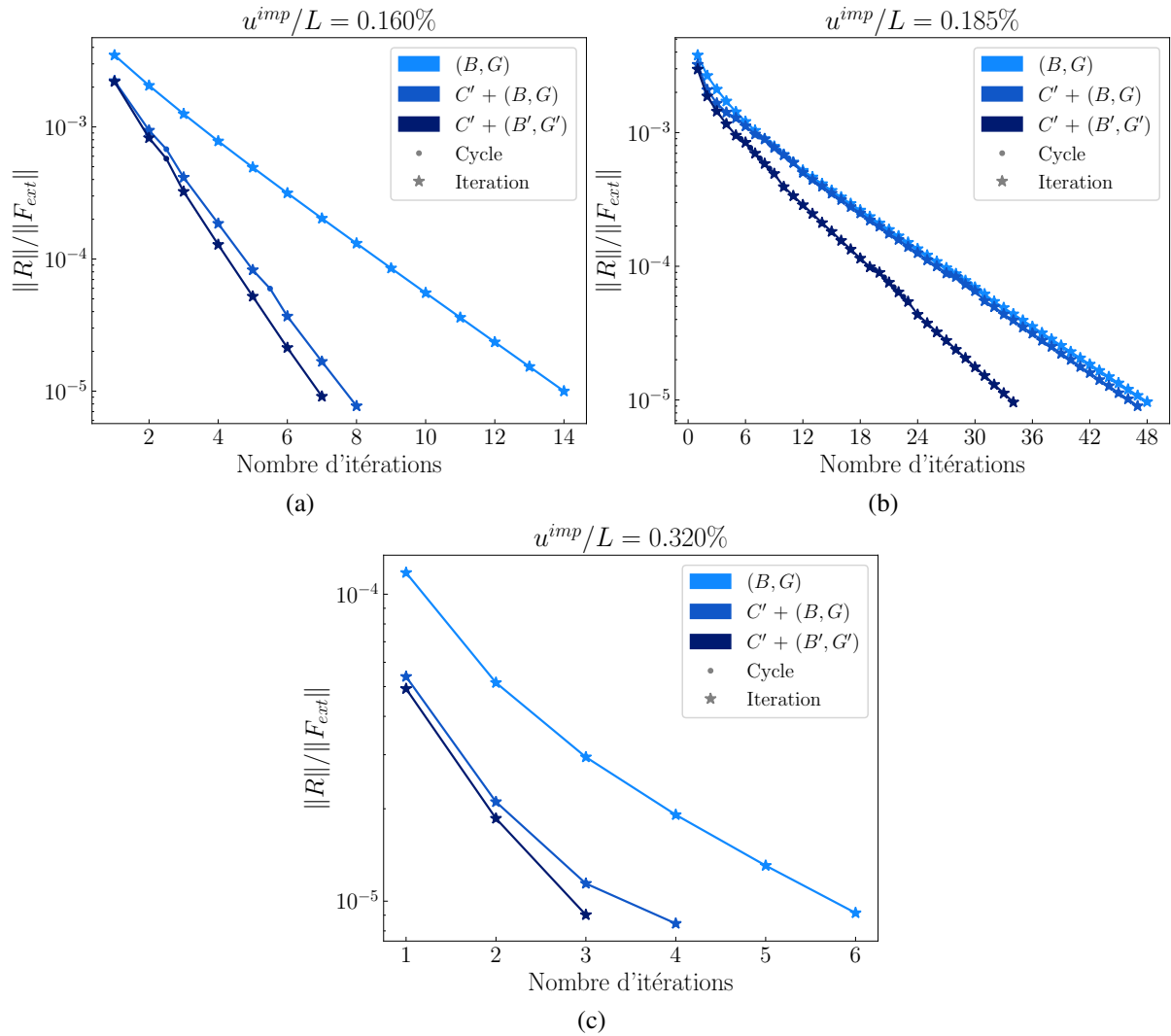


FIGURE 4 – Nombre d’itérations nécessaires pour atteindre la convergence du résidu d’équilibre pour un incrément de chargement à trois niveaux de plasticité différents.

débouchants ou très proches des bords du composant.

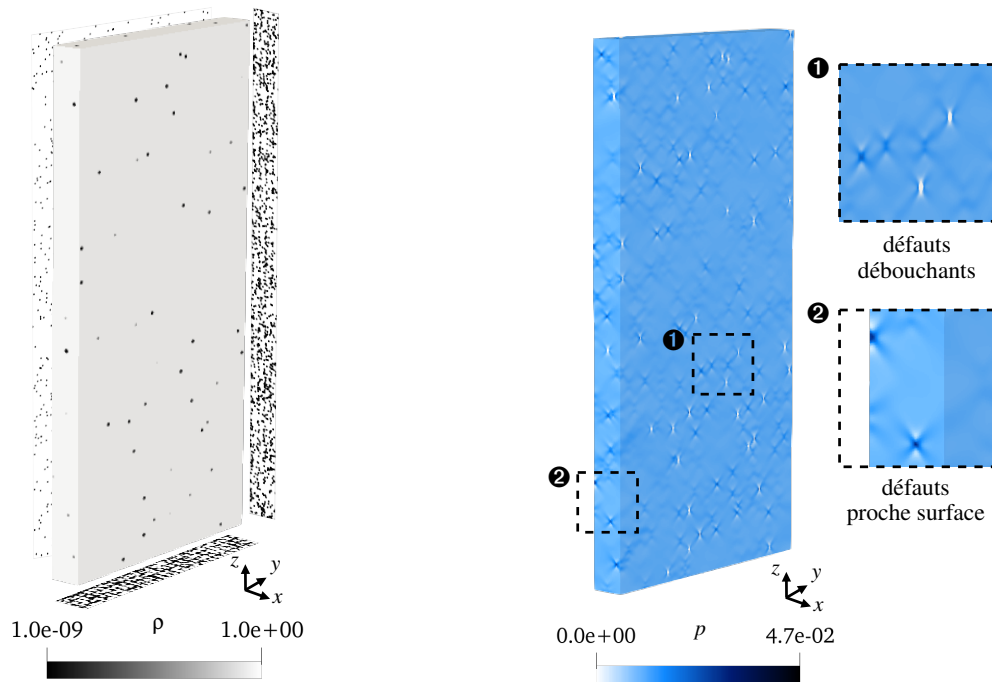


FIGURE 5 – Image du composant avec projection des centres des défauts dans les 3 directions (gauche). Champ de plasticité cumulée p dans le composant LPBF à $u^{imp}/L = 1.25\%$ (droite).

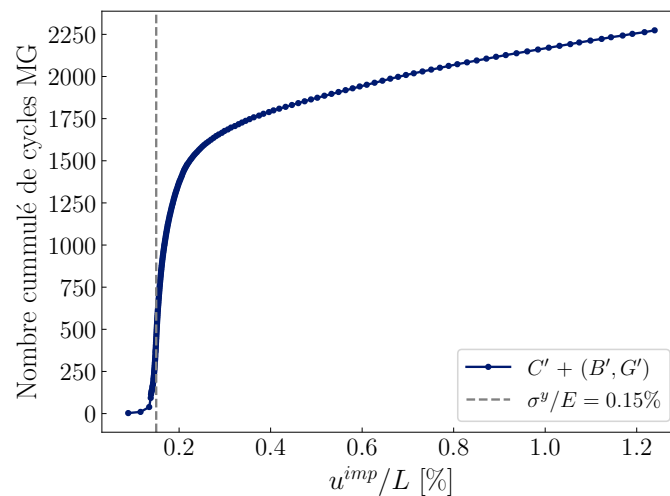


FIGURE 6 – Nombre cumulé de cycles MG nécessaires pour converger vers la solution, pour le composant LPBF.

4 Conclusion et perspectives

Ces travaux présentent une stratégie multigrille peu coûteuse pour résoudre des problèmes élastoplastiques. Elle utilise le MG comme un accélérateur de convergence et une résolution différenciée aux différents niveaux. Le comportement élastoplastique est évalué uniquement à l'échelle fine et transféré aux grilles grossières sous forme de modules d'élasticité équivalents au module tangent. Les performances de la méthode sont suffisamment satisfaisantes pour effectuer des calculs sur des composants LPBF avec un grand nombre de degrés de liberté et des chargement significatifs.

La méthode proposée devra être appliquée à des images de toмоgraphies réelles présentant une géométrie non idéalisée et des niveaux de gris moins contrastés. Ses performances pourront aussi être

évaluées pour d'autres modèles de comportement élasto-plastique.

Remerciements

Computations were performed using the computer clusters and data storage resources of the GLiCID (Groupement Ligérien pour le Calcul Intensif Distribué, www.glicid.fr).

Références

- [1] D. Bardel, G. Badinier, D. Magne, S. Cachat, E. Schweitzer, D. Blavius, J. Klar, C. Wiltz, J. Strumpell, *Additive manufacturing for Fuel components : an overview of key achievements at Framatome*, Top Fuel, Santander, Spain, 2021.
- [2] A. Brandt, *Multi-level adaptive solutions to boundary-value problems*, Math. Comput. 31, 333–390, 1977.
- [3] F. I. Fedorov, *Theory of elastic waves in crystals*, Plenum Press, New York, 1968.
- [4] J. Fish, M. Pandheeradi, V. Belsky, *An efficient multilevel solution scheme for large scale non-linear systems*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, p. 1597-1610, 1995.
- [5] L. Gautier, D. Bardel, X. Liu, M. Chevreuil, J. Réthoré, *Calcul haute performance sur image pour l'étude de l'impact de défauts issus de fabrication additive LPBF*, 16ème Colloque National en Calcul de Structures (CSMA 2024), Hyères, France, 2024.
- [6] T. Helfer, B. Michel, J.M. Proix, M. Salvo, J. Sercombe, M. Casella, *Introducing the open-source mfront code generator : Application to mechanical behaviours and material knowledge management within the PLEIADES fuel element modelling platform*, Computers & Mathematics with Applications, p. 994-1023, 2015.
- [7] T. Helfer, J. Bleyer, T. Frondelius, I. Yashchuk, T. Nagel, D. Naumov, *The 'MFrontGenericInterfaceSupport' project*, Journal of Open Source Software, p. 2003, 2020.
- [8] S. Kacou, I.D. Parsons, *A parallel multigrid method for history-dependent elastoplasticity computations*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, p. 1-21, 1993.
- [9] X. Liu, J. Réthoré, M.-C. Baietto, P. Sainsot, A. A. Lubrecht. *An efficient strategy for large scale 3D simulation of heterogeneous materials to predict effective thermal conductivity*, Computational Materials Science, 166, pp.265-275, 2019.
- [10] X. Liu, J. Rethore, M.-C. Baietto, P. Sainsot, A. A. Lubrecht *An efficient finite element based multigrid method for simulations of the mechanical behavior of heterogeneous materials using CT images*, Comput Mech, vol. 66, n° 6, p. 1427-1441, 2020.
- [11] X. Liu, J. Rethore, A. A. Lubrecht *An efficient matrix-free preconditioned conjugate gradient based multigrid method for phase field modeling of fracture in heterogeneous materials from 3D images*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 388, 114266, 2022.
- [12] L. Morin, D. Kondo, *Basic concepts and modeling of ductile fracture*, MEALOR II Damage Mechanics and Local Approach to Fracture. CERN - European Organization for Nuclear Research, p. 257-298, 2023.
- [13] N. Sanaei, A. Fatemi, N. Phan, *Defect characteristics and analysis of their variability in metal L-PBF additive manufacturing*, Materials & Design, vol. 182, p. 108091, 2019.
- [14] T. Vaneker, A. Bernard, G. Moroni, I. Gibsona, Y. Zhang, *Design for additive manufacturing : Framework and methodology*, CIRP ANN-MANUF TECHN, vol. 69, n° 2, p. 578-599, 2020.