

D'AMITEX à AMITEX*

L. Gélébart¹, A. Amouzou-Adoun¹, C.Flageul², Y. Wang³

¹ Université Paris-Saclay, CEA, SRMA, 91191, Gif-sur-Yvette, France, lionel.gelebart@cea.fr, yaovi.amouzou-adoun@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 — Après avoir brièvement présenter le code AMITEX, dédié à la simulation massivement parallèle du comportement mécanique de matériaux hétérogènes soumis à des conditions aux limites (CL) périodiques, on présente le projet AMITEX*, version revisitée d'AMITEX visant notamment à étendre le champ d'application du code à des CL non-périodiques et par conséquent à la simulation de petites structures telles que des éprouvettes. Cette refonte est également l'occasion d'envisager de nouveaux schémas de différences-finies ou éléments-finis et la mise en place de couplages, notamment thermo-mécanique.

Mots clefs — FFT, non-périodiques, grandes transformations.

1. AMITEX

Le code AMITEX, mis à disposition de la communauté « mécanique et matériaux » pour une utilisation « éducation & recherche » [4], permet de simuler le comportement mécanique d'un volume élémentaire de matériaux hétérogènes soumis à des conditions aux limites périodiques. Le code intègre un solveur reposant sur l'utilisation d'un opérateur de Green discret et son application dans l'espace de Fourier (via la Transformée de Fourier Discrète, ou FFT). Massivement parallèle, il permet de repousser les limites atteintes par des codes éléments-finis généralistes utilisés dans le même contexte.

A titre d'illustration, la Figure 1 présente deux exemples d'application. L'un utilise directement comme donnée d'entrée une image tomographique Haute Résolution (image 3D $\sim 2000^3$) d'un tube composite SiC/SiC afin d'évaluer la distribution des contraintes au sein du matériau [1]. L'autre utilise également une image expérimentale d'un polycristal d'INCONEL718, obtenue par EBSD-3D (image $\sim 500^3$), afin de tester l'aptitude des modèles de plasticité cristalline à reproduire la localisation de la déformation mesurée en surface par corrélation d'images.

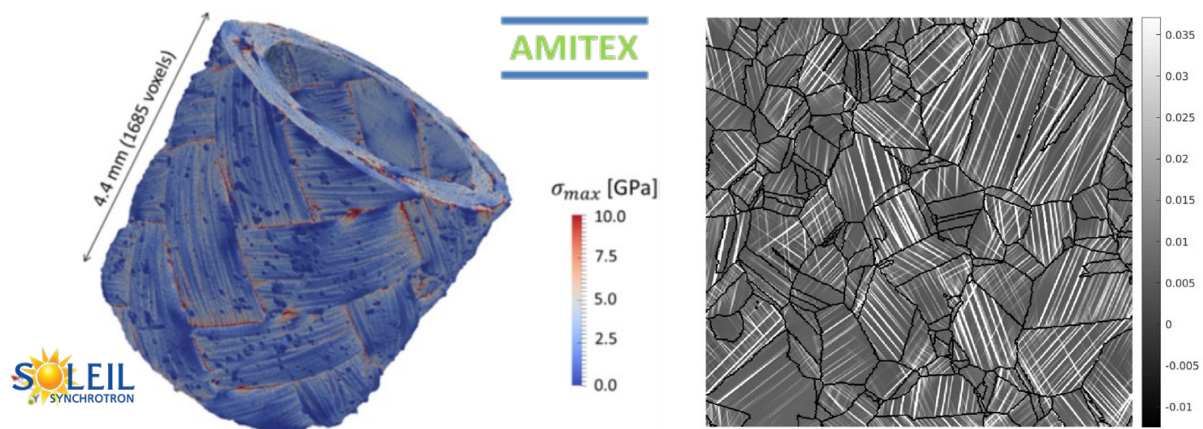


Figure 1 : (gauche) Simulation élastique directe sur un tube composite SiC/SiC, caractérisé par tomographie au synchrotron SOLEIL (résolution $\sim 2000^3$) ; (droite) Champ de déformation axiale en surface d'un agrégat caractérisé par EBSD-3D (image $\sim 500^3$), simulé en plasticité cristalline et sollicité en traction.

2. AMITEX[★]

2.1. Objectifs

A court-moyen terme, l'objectif du projet AMITEX[★] est d'étendre le champ d'application du code AMITEX à :

- des conditions aux limites non-périodiques sur les bords du volume élémentaire,
- des schémas de résolution spatiale (différences-finies/éléments-finis) plus riches,
- des couplages, thermo-mécanique et plus généralement multi-physiques, notamment par des modèles de champ de phases,

tout en conservant les avantages du code AMITEX :

- parallélisme en mémoire distribuée (MPI),
- implémentation de la partie mécanique en petites et grandes transformations,
- introduction aisée de lois de comportement via le formalisme UMAT, donnant accès au générateur de code MFRONT [6],
- la prise en compte de voxels composites afin de mieux représenter le comportement des voxels traversés par une interface,

A moyen-long terme, il est également envisagé d'introduire :

- une discrétisation non régulière du maillage permettant d'adapter la géométrie,
- des conditions de Dirichlet sur des points, lignes ou surfaces à l'intérieur du volume élémentaire,

2.2. Avancement

Afin d'introduire les conditions aux limites non périodiques, il était nécessaire de faire évoluer la librairie *2decomp&FFT* [7] dans le but de pouvoir utiliser les Transformées Trigonométriques Discrètes disponibles dans *fftw* [3]. Ce développement est réalisé, validé par différents tests, et utilisé dans un premier solveur mécanique d'AMITEX[★]. Cette évolution devrait prochainement, courant 2026, être intégrée à une version stable de la librairie *2decomp&FFT* [7]

Côté AMITEX[★], une restructuration quasi complète du code a été entreprise afin de pouvoir prendre en compte ces nouvelles conditions aux limites, mais aussi de pouvoir étendre les capacités du code à de nouveaux schémas de différences-finies/éléments-finis.

Actuellement, le développement du solveur permet d'imposer tous types de conditions aux limites par face et par composante (il n'est pas possible de mixer déplacement imposé et traction imposée sur des sous-domaines d'une même face). De plus, un nouveau schéma de différences finies « TETRA2 » [2] [5], s'apparentant à un élément fini hexaédrique linéaire à 2 points de Gauss, a été implémenté. En comparaison du schéma « HEX1 », équivalent à un élément fini hexaédrique linéaire à 1 point de Gauss, souffrant du phénomène de « hourglass », ce nouvel schéma présente des champs de contrainte/déformation exempts d'oscillations parasites et permet de mener des simulations, notamment en grandes transformations jusqu'à des chargements bien plus élevés.

La Figure 2 illustre cet état d'avancement par la simulation d'une poutre encastree d'un côté et sollicitée en flexion, en grandes transformations. Pour les faibles niveaux de déformation, les deux schémas reproduisent la réponse analytique donnée par la théorie des poutres (courbe noire). Comme attendu, pour des chargements plus élevés, la réponse s'éloigne de la réponse linéaire. En revanche, il

est important de noter que la simulation réalisée avec le schéma « HEX1 » est interrompue de manière précoce pour un problème de non-convergence tandis qu’avec le schéma « TETRA2 » la simulation se poursuit sans difficulté. Par ailleurs, on peut observer sur les déformées la présence d’oscillations parasites fortes pour le schéma « HEX1 » (probablement à l’origine du problème de convergence) et inexistantes pour le schéma « TETRA2 ».

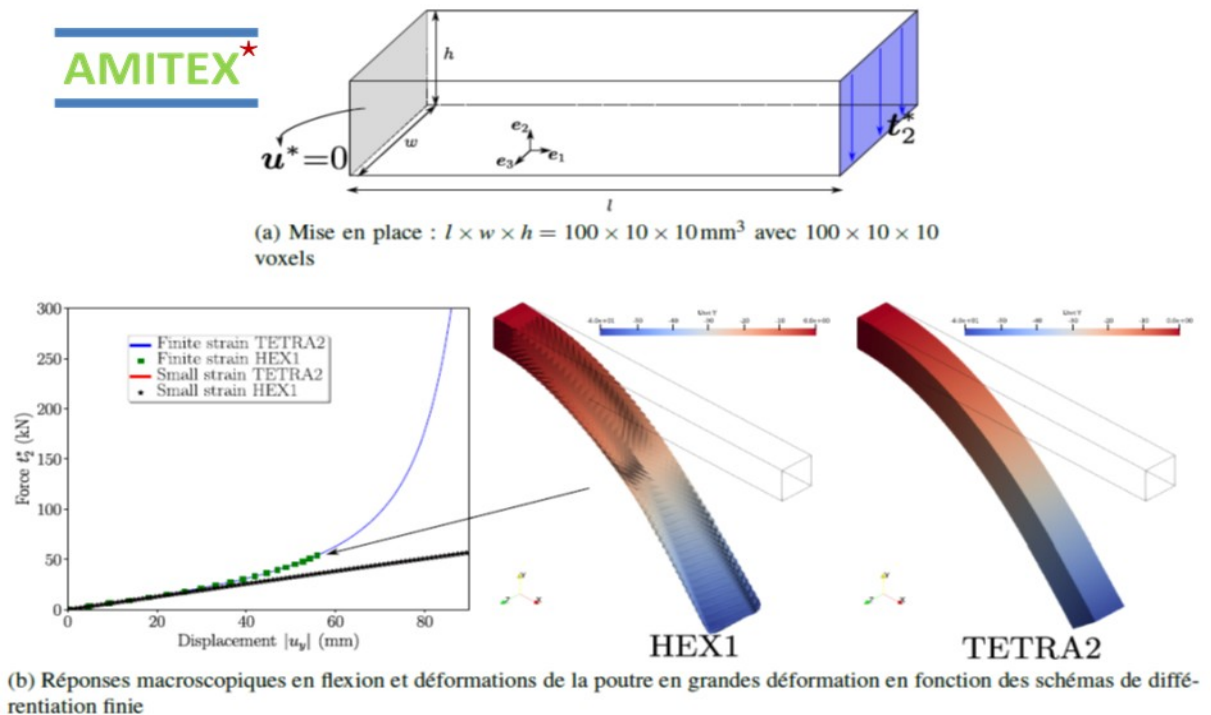


Figure 2 : Poutre encastée sollicitée en flexion, formalisme grandes transformations, avec deux schémas de différentiation (« HEX1 » et « TETRA2 »). La déformée est visualisée sans facteur d’amplification.

3. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

3.1. AMITEX

Si le code AMITEX, outil performant et efficace pour la simulation des matériaux hétérogènes, continuera à être maintenu et mis à disposition de la communauté, les efforts de développement devraient s’orienter vers AMITEX*.

Afin de faciliter l’usage du code à un public plus large, des versions pré-compilées du code seront prochainement mises en place et proposées en téléchargement. Ainsi, une version WINDOWS permettra aux utilisateurs de ce système d’exploitation de bénéficier du code AMITEX.

3.2. AMITEX*

Le cœur du solveur AMITEX* commence à prendre forme et permet d’ores et déjà de réaliser des simulations inédites pour un code FFT. Il reste encore un travail important :

- mise en place d’une interface utilisateur,
- mise en place du couplage thermo-mécanique,
- stabilisation du code,
- mise en place de cas-tests, documentation, site web

A court-moyen terme, AMITEX* sera, à l’instar d’AMITEX, mis à disposition de la communauté « mécanique et matériau » pour une utilisation « éducation & recherche ».

Références

- [1] Y. Chen, L. Gélébart, C. Chateau, M. Bornert, C. Sauder, and A. King. Analysis of the damage initiation in a sic/sic composite tube from a direct comparison between large-scale numerical simulation and synchrotron x-ray micro-computed tomography. *Int. J. Solids Struct.*, 161:111 – 126, 2019.
- [2] 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.
- [3] M. Frigo and S. G. Johnson. The design and implementation of fftw3. *Proceedings of the IEEE*, 93(2):216–231, 2005.
- [4] Lionel Gélébart. <https://amitexfftp.github.io/amitex/index.html>. 2022.
- [5] Lionel Gélébart. An accurate and robust fft-based solver for transient diffusion in heterogeneous materials. *Comptes Rendus. Mécanique*, 353:113–125, 2025.
- [6] Thomas Helfer, Maxence Wangermez, Salem Khellal, Yushan Wang, Raphaël Prat, Lionel Gélébart, and Guillaume Latu. New functionalities of versions 4.1 and 4.2 of thethfel/mfront project and version 2.0, 2.1 of the mgisproject. In *16ème Colloque National en Calcul de Structures, 13-27 may 2022, Giens, France, 2024*.
- [7] Stefano Rolfo, Cédric Flageul, Paul Bartholomew, Filippo Spiga, and Sylvain Laizet. The 2decomp&fft library: an update with new cpu/gpu capabilities. *Journal of Open Source Software*, 8(91):5813, 2023.