

# Optimisation de la méthode multi-échelle pilotée par les données pour les matériaux lattices : évaluation des incertitudes liées aux défauts de fabrication

C. Court<sup>1</sup>, E. Marenić<sup>1</sup>, J.C. Passieux<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut Clément Ader (ICA), Université de Toulouse, INSA-ISAE-Mines Albi-UPS-CNRS, Toulouse, France  
{ccourt,marenic,passieux}@insa-toulouse.fr

**Résumé** — Les matériaux lattices métalliques sont désormais à portée de la fabrication additive [1, 2, 3]. Pour simuler leur comportement, une méthode multi-échelle pilotée par les données est employée [4]. Les défauts inhérents à la fabrication par SLM conduisent à des incertitudes sur le comportement mécanique. Afin des les évaluer, des jumeaux numériques d'échantillons fabriqués servent de VER à l'échelle d'une cellule. Tenir compte de ces incertitudes dans la base de données matériau permet d'en évaluer une densité maximale pertinente, ce qui permettra de limiter les coûts de calcul sans perte de précision.

**Mots clés** — Lattices, méthodes multi-échelles, *Data-Driven*, Fabrication additive.

## 1 Introduction

### 1.1 Matériaux lattices fabriqués par fusion sélective par laser

Les matériaux lattices, une sous-catégorie de matériaux cellulaires [5], se présentent un rapport rigidité/masse important. Elles sont particulièrement intéressantes dans le domaine aérospatial pour cet avantage massique [2]. Avec l'avènement des techniques de fabrication additive, la réalisation de ces structures est désormais possible [3]. Dans ce travail, la méthode utilisée est un procédé à fusion sur lit de poudre, la fusion sélective par laser (SLM pour *Selective Laser Melting*) [6].

Cependant, la précision géométrique de l'échantillon est influencée par plusieurs paramètres du procédé, *i.e.* la vitesse de déplacement du laser, sa puissance, la taille du point focalisé, le matériau de la poudre, la taille des grains etc... Induisant des imperfections et une différence de volume relatif entre la configuration conçue et la géométrie obtenue. Dans [7], les auteurs mettent en évidence différents types de défauts (voir Figure 1) : des variations locales de section des travées, des ondulations des travées, des rugosités, des porosités voire des fissures.

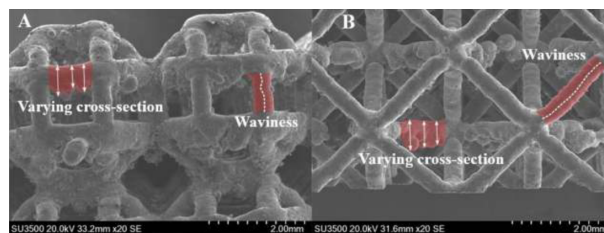


FIGURE 1 – Images de microscope électronique de portions de structures lattices fabriquées par SLM mettant en évidence des défauts identifiables [7]

Dans leur travail, les auteurs s'intéressent à l'influence de ces défauts sur le comportement mécanique d'échantillons de matériaux lattices. Pour cela, ils les classifient et introduisent une distribution statistique des ces défauts sur des modèles éléments finis de type poutre. Dans notre étude, nous souhaitons ne pas classifier les défauts, mais constituer des modèles éléments finis volumiques directement issus des géométries effectivement fabriquées. La création des ces modèles sera basée sur des géométries obtenues par imagerie tridimensionnelle grâce à la tomographie à rayons-X.

## 1.2 Méthode multi-échelle pilotée par les données

### 1.2.1 Méthodes multi-échelle

De manière générale, les matériaux cellulaires, avec leurs structures complexes et multi-échelle, présentent un défi pour la modélisation mécanique. La simulation numérique directe par éléments finis conduit à des coûts de calculs prohibitifs à l'échelle d'une structure lattice macroscopique si l'on souhaite fidèlement représenter la géométrie à l'échelle de ses motifs élémentaires. L'existence d'échelles distinctes de structures - les cellules individuelles à l'échelle mésoscopique et la structure globale à l'échelle macroscopique - requiert donc une approche de modélisation multi-échelle. Une de ces approches est la méthode des éléments finis généralisée, ou  $FE^2$ , proposée par Feyel [8], qui permet de résoudre simultanément le problème aux limites à l'échelle macroscopique et à l'échelle d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER). Elle revient à poser deux problèmes de mécanique distincts mais en interaction (comme illustré Figure 2). Contrairement aux approches classiques, le problème macroscopique n'est pas directement soumis à une loi de comportement matériau, mais à la résolution d'un problème aux limites sur le VER. Le comportement effectif du matériau à l'échelle macro est obtenu par homogénéisation du champ de contrainte  $\sigma(\mathbf{X})$  du VER soumis à une déformation  $\varepsilon$  homogène donnée.

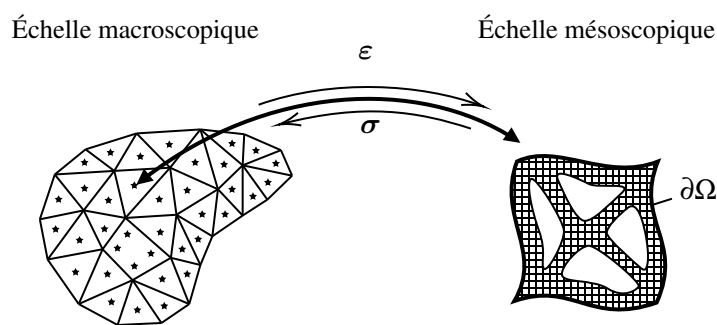


FIGURE 2 – Problème multi-échelle de mécanique

Bien que les problèmes sur le VER soient hautement parallélisables car indépendants, la méthode  $FE^2$  nécessite un nombre généralement trop important de simulations sur les VER. Pour chaque itération du schéma numérique (Newton-Raphson) à l'échelle macroscopique, il faut une simulation pour chaque point d'intégration du maillage macroscopique, enrichie de perturbations linéaires pour évaluer l'opérateur tangent. Il est possible de réduire drastiquement le nombre de calculs en réutilisant les solutions précédemment calculés avec différentes techniques de réduction de modèle ou de machine learning [9]. Dans la suite, nous étudions une technique alternative basée sur des simulations pilotée par les données.

### 1.2.2 Paradigme piloté par les données ou *Data-Driven*

En 2015, Kirchdoerfer et Ortiz [10] introduisent un nouveau paradigme de formulation du problème d'élasticité. La loi de comportement matériau est ici remplacée par des données brutes. Les simulations sont donc pilotées par les données et ce paradigme nommé *Data-Driven*. Les données qui encodent le comportement du matériau sont des couples de tenseurs de déformation et contraintes  $(\varepsilon, \sigma)$ . La résolution d'un problème aux limites piloté par les données se fait de façon itérative et converge vers un état mécanique admissible qui satisfait les conditions d'admissibilité cinématique (1), qui relie le champ de déplacements  $\mathbf{q}$  au champ de déformation  $\varepsilon$  et les conditions d'équilibre statique (2), qui relie le champ de contrainte  $\sigma$  aux efforts extérieurs  $\mathbf{f}_V$ .

$$\varepsilon = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{q} + (\nabla \mathbf{q})^T) \quad (1)$$

$$\text{div}(\sigma) + \mathbf{f}_V = \mathbf{0} \quad (2)$$

La connaissance du comportement du matériau est apportée par les données, et la solution apportée au problème aux limites est obtenue en minimisant une distance  $d$  dans l'espace des phases  $\mathcal{Z}$ , entre des états admissibles  $\mathcal{C}$  et des points de la base de données  $\mathcal{D}$ . Afin de comparer ces quantités, elles doivent

être judicieusement adimensionnalisées ou pondérées, pour cela on utilise un opérateur de type élasticité purement numérique noté  $\mathbb{C}$ . La distance  $d$  entre deux points  $(\varepsilon_c, \sigma_c) \in \mathcal{C}$  et  $(\varepsilon_d, \sigma_d) \in \mathcal{D}$  est alors définie par (3). Elle est homogène à une densité d'énergie.

$$d^2 = \frac{1}{2}((\varepsilon_c - \varepsilon_d) : \mathbb{C} : (\varepsilon_c - \varepsilon_d)) + \frac{1}{2}((\sigma_c - \sigma_d) : \mathbb{C}^{-1} : (\sigma_c - \sigma_d)) \quad (3)$$

La combinaison de la stratégie FE<sup>2</sup> avec le paradigme *Data-Driven* [4] conduit à une méthode qui remplace les simulations systématiques des VER par une recherche de plus proche voisin dans la base de données préalablement constituée. Il reste possible de construire la base de données au cours des simulations [11] s'il est jugé nécessaire de l'enrichir. L'approche *Data-Driven* est donc un candidat prometteur pour réduire les coûts de calculs de la méthode multi-échelle FE<sup>2</sup>.

Cependant, l'étape de recherche du plus proche voisin de l'algorithme *Data-Driven* se révèle coûteuse lorsque le nombre de points dans la base de donnée est grand. Dans la littérature des techniques de recherche efficaces sont proposées pour accélérer cette recherche [12], mais en général, aucun travail de préparation n'est opéré sur la base de donnée, sur sa dimension et son échantillonnage.

Comme évoqué plus haut, les imperfections et les variabilités géométriques intrinsèques au procédé peuvent induire une incertitude sur le comportement du VER. La résolution du problème multi-échelle avec une base de données trop riche compte tenu de cette incertitude peut conduire à des calculs excessifs. L'objectif de ce travail est d'exploiter la connaissance de cette variabilité pour adapter la base de donnée dans les simulations multi-échelles *Data-Driven*, dans l'idée de faire un calcul juste au juste coût.

## 2 Méthodologie

### 2.1 Fabrication et analyse tomographique d'échantillon

Avec une cellule élémentaire CFCC (pour Cubique Faces Centrées + Centre) de côté 4.069mm et d'un volume relatif de 16.81% (Figure 3a), la fabrication par SLM d'un échantillon parallélépipédique de lattice en aluminium (Figure 3b) a été réalisée. Son analyse par tomographie à rayon-X a permis - à partir des images tridimensionnelles - de reconstruire les surfaces du solide (Figure 3c).



FIGURE 3

### 2.2 VER à partir de jumeaux numériques

Les jumeaux numériques sont des modèles numériques basés sur des structures réelles. A partir des images volumiques de l'échantillon observé, les cellules unitaires sont extraites et traitées séparément. Pour pouvoir générer un maillage volumique en éléments finis, il est nécessaire d'appliquer un filtrage aux images afin de baisser artificiellement la rugosité des surfaces. Ce filtrage doit être le plus faible possible afin de ne pas trop modifier la géométrie. Une fois filtrées, les images sont utilisées comme entrée pour un algorithme de reconstruction de surfaces *marching cubes*. Le maillage surfacique ainsi obtenu est ensuite utilisé par un autre algorithme pour construire un maillage d'éléments finis volumiques. Le processus est illustré sur le Figure 4

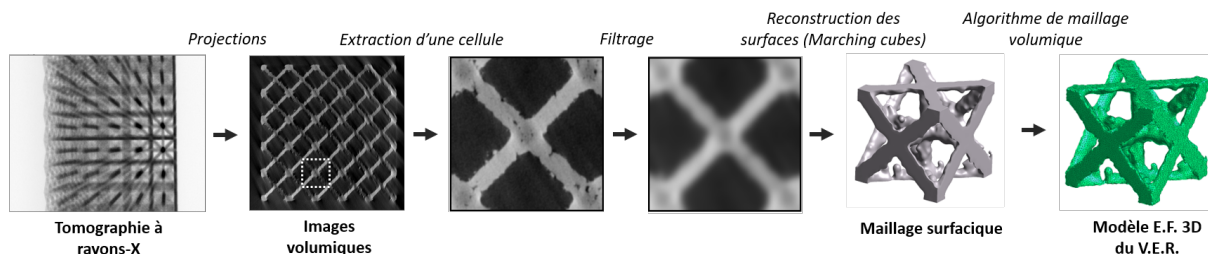


FIGURE 4 – Processus de création de jumeaux numériques de cellules unitaires

Dans ce travail, 6 VER (présentés Figure 5) ont été créés de cette façon, à partir de différentes cellules unitaires du même échantillon de lattice. Un VER issue de la configuration comme conçue a été utilisé pour comparaison. Les volumes relatifs des différents VER sont présentés Tableau 1.

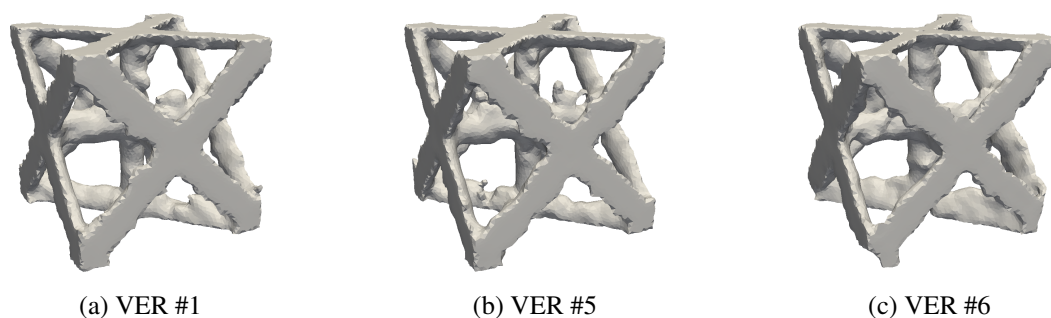


FIGURE 5 – Visualisation de 3 des 6 VER des configurations *comme-fabriqué*

TABLE 1 – Volume relatifs des RVE

VER	Volume relatif (%)
Comme-conçu	16.58
Comme-fabriqué #1	19.39
Comme-fabriqué #2	19.46
Comme-fabriqué #3	19.25
Comme-fabriqué #4	19.56
Comme-fabriqué #5	19.54
Comme-fabriqué #6	18.12
Comme-fabriqué moyenne	19.22

Les modèles Éléments Finis sont des modèles Abaqus d'éléments tétraédriques C3D4 avec environs  $1.6 \times 10^5$  éléments. La loi constitutive utilisée est une loi élastique-plastique représentant le comportement d'un aluminium standard.

D'autres méthodes pour résoudre le problème à l'échelle mésoscopique existent, telles que les approches par transformée de Fourier rapide (FFT) décrites par [13]. Ces méthodes peuvent se baser directement sur les images volumiques issues de la tomographie sans nécessiter de maillage. Elles peuvent être avantageuses pour les structures avec de grands espaces vides et rivalisent en efficacité numérique avec la méthode des éléments finis (FEM) pour simuler le comportement des matériaux lattices [14]. Bien que cette étude emploie la FEM, les méthodes FFT représentent une alternative pertinente.

### 2.2.1 Conditions aux limites appliquées aux VER

La localisation des déformations homogènes  $\epsilon$  sur le VER nécessite d'appliquer des conditions aux limites aux frontières du VER. Nous procédons ici avec des conditions aux limites cinématiquement

uniformes. Les déplacements  $\mathbf{q}_{\Gamma_D}$  des noeuds des surfaces extérieures  $\Gamma_D$  du VER sont pilotés pour appliquer un tenseur  $\varepsilon$  donné en fonction de leur position  $\mathbf{X}_{\Gamma_D}$

$$\mathbf{q}_{\Gamma_D} = \varepsilon \mathbf{X}_{\Gamma_D} \quad (4)$$

### 2.2.2 Homogénéisation des contraintes

L'homogénéisation est une méthode mathématique utilisée pour décrire les propriétés effectives des matériaux hétérogènes en termes de propriétés d'un matériau homogène fictif. Cette technique simplifie la modélisation en remplaçant les hétérogénéités du matériau réel par un matériau homogène dont le comportement est gouverné par des propriétés moyennes ou *homogénéisées* [15].

Dans ce contexte, les états de contraintes homogénéisés associés à un VER sont définis comme les moyennes volumiques des contraintes  $\sigma_m$  dans le VER :

$$\boldsymbol{\sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma}_m \rangle \quad \text{avec} \quad \langle \bullet \rangle = \frac{1}{V_m} \int_{\Omega_m} \bullet \, dV \quad (5)$$

Pour chaque état de déformation appliqué au VER, les contraintes homogénéisées sont extraites sur 20 incréments de chargement linéairement espacés réalisés par Abaqus avec un chargement monotone.

### 2.3 Plan d'expérience d'états de déformation

Dans l'optique de mesurer la dispersion des états de contraintes homogénéisés dans l'espace des déformations, il faut se munir d'un plan d'expérience dans l'espace de dimension 6 des déformations (en notation de Voigt). Des méthodes d'échantillonnage sont proposées et comparées par [16]. Pour limiter le nombre de points à évaluer mais pour tout de même explorer largement l'espace des déformations, nous choisissons d'échantillonner cet espace avec l'usage d'un hypercube dans 3 dimensions associées aux déformations principales  $\varepsilon_I, \varepsilon_{II}, \varepsilon_{III}$ . La population d'états de déformations ainsi générée comporte 13 423 points

## 3 Résultats

A l'heure actuelle, la base de donnée constituée comporte 5517 points de l'*espace des phases*  $\mathcal{Z}$  pour chacun des 7 VER (6 *comme-fabriqués* et 1 *comme-conçu*). Les calculs ont été réalisés séquentiellement sur un PC portable Intel(R) Core(TM) i7-10510U CPU @ 1.80GHz avec 32Go de RAM.

Des projections sur 2 dimensions de  $\mathcal{Z}$  permettent de mettre en évidence les différences de réponse mécanique des VER *comme-conçu* et *comme-fabriqués*. Les points résultants de cas de charge simples sont présentés Figure 6.

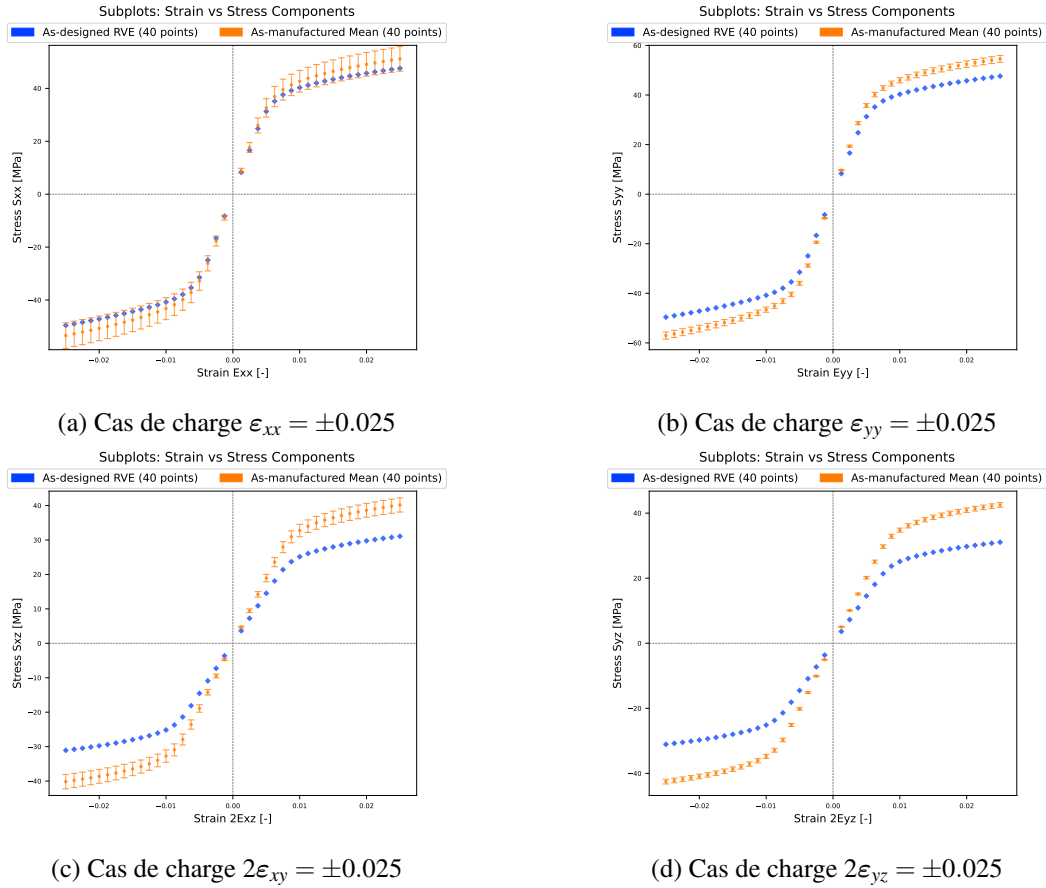


FIGURE 6 – Extraits de données résultantes des simulations des VER pour des cas de charge unidirectionnels. Sont affichées les valeurs des contraintes normales et l'écart-type des résultats des configurations *comme fabriquées* pour chaque incrément de chargement (20 incréments par cas de charge).

Il apparaît sur ces exemples que les différentes géométries des VER conduisent à de différentes réponses mécanique. La première différence observée est celle entre la configuration *comme-conçue* et la moyenne des configurations *comme-fabriquées*. Ce biais systématique est lié au procédé de fabrication et de création des jumeaux numériques. On observe que toutes les cellules d'une même lattice n'ont pas les mêmes défauts et donc pas le même comportement. Ainsi pour les VER *comme-fabriqués*, on observe une variabilité aléatoire des états de contraintes qui grandit avec l'amplitude du chargement.

## 4 Discussion

Le biais systématique de la réponse en contrainte peut en partie s'expliquer par la différence de volume relatif. Comme présenté Table 1, le volume relatif moyen des configurations *comme-fabriquées* est augmenté de 15.9% par rapport à celui de la configuration *comme-conçue*. Dans des travaux à venir, nous étudierons plus en profondeur l'influence du volume relatif en comparaison avec l'influence de la géométrie dans des cas à iso volume relatif. Le volume relatif des jumeaux numériques est influencé par des paramètres de la création de ses jumeaux tel que le seuil de l'algorithme *marching cubes*.

La variabilité des réponses des configurations *comme-fabriqués* nous conduira à présenter une méthode de nettoyage de base de données. Cette méthode prendra en compte le fait que la variabilité n'est pas identique dans toutes les directions de chargement et grandit avec l'amplitude de chargement.

## Références

- [1] Y. Huang, M. C. Leu, J. Mazumder, and A. Donmez, "Additive Manufacturing : Current State, Future Potential, Gaps and Needs, and Recommendations," *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, vol. 137, Feb. 2015.

- [2] B. Blakey-Milner, P. Gradl, G. Snedden, M. Brooks, J. Pitot, E. Lopez, M. Leary, F. Berto, and A. du Plessis, “Metal additive manufacturing in aerospace : A review,” *Materials & Design*, vol. 209, p. 110008, Nov. 2021.
- [3] M. K. Thompson, G. Moroni, T. Vaneker, G. Fadel, R. I. Campbell, I. Gibson, A. Bernard, J. Schulz, P. Graf, B. Ahuja, and F. Martina, “Design for Additive Manufacturing : Trends, opportunities, considerations, and constraints,” *CIRP Annals*, vol. 65, pp. 737–760, Jan. 2016.
- [4] R. Xu, J. Yang, W. Yan, Q. Huang, G. Giunta, S. Belouettar, H. Zahrouni, T. B. Zineb, and H. Hu, “Data-driven multiscale finite element method : From concurrence to separation,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 363, p. 112893, May 2020.
- [5] L. J. Gibson and M. F. Ashby, *Cellular Solids : Structure and Properties*. Cambridge University Press, 1997. Google-Books-ID : IySUr5sn4N8C.
- [6] L. Riva, P. S. Ginestra, and E. Ceretti, “Mechanical characterization and properties of laser-based powder bed-fused lattice structures : a review,” *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, vol. 113, pp. 649–671, Mar. 2021.
- [7] L. Liu, P. Kamm, F. García-Moreno, J. Banhart, and D. Pasini, “Elastic and failure response of imperfect three-dimensional metallic lattices : the role of geometric defects induced by Selective Laser Melting,” *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 107, pp. 160–184, Oct. 2017.
- [8] F. Feyel and J.-L. Chaboche, “FE2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 183, pp. 309–330, Mar. 2000.
- [9] B. Le, J. Yvonnet, and Q.-C. He, “Computational homogenization of nonlinear elastic materials using neural networks,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 104, no. 12, pp. 1061–1084, 2015. Publisher : Wiley.
- [10] T. Kirchdoerfer and M. Ortiz, “Data-driven computational mechanics,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 304, pp. 81–101, June 2016.
- [11] A. Platzer, A. Leygue, and L. Stainier, “Stratégie adaptative de calcul multiéchelle piloté par les données,” *15ème Colloque National en Calcul des Structures*, May 2022.
- [12] R. Eggersmann, L. Stainier, M. Ortiz, and S. Reese, “Model-free data-driven computational mechanics enhanced by tensor voting,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 373, p. 113499, Jan. 2021.
- [13] H. Moulinec and P. Suquet, “A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 157, pp. 69–94, Apr. 1998.
- [14] S. Lucarini, L. Cobian, A. Voitus, and J. Segurado, “Adaptation and validation of FFT methods for homogenization of lattice based materials,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 388, p. 114223, Jan. 2022.
- [15] E. Sanchez-Palencia, “HOMOGENIZATION IN MECHANICS A SURVEY OF SOLVED AND OPEN PROBLEMS,” *REND.SEM. MAT. UNIVERS. POLITECN. TORINO*, 1986.
- [16] M. Bessa, R. Bostanabad, Z. Liu, A. Hu, D. W. Apley, C. Brinson, W. Chen, and W. Liu, “A framework for data-driven analysis of materials under uncertainty : Countering the curse of dimensionality,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 320, pp. 633–667, June 2017.