

Méthodes d'homogénéisation numérique par FFT et prise en compte de la localisation

F. Willot^{1,2}

¹ Centre de morphologie mathématique, CMM, Mines Paris PSL, 35 rue S^t Honoré, 77300 Fontainebleau, francois.willot@minesparis.psl.eu

² Centre des Matériaux P. M. Fourn, MAT, Mines Paris PSL, 63-65 rue Henry Desbrières, BP 87 91003 Évry.

Résumé — On présente dans ce travail certains domaines d'application des méthodes dites "FFT", un outil d'homogénéisation numérique à champ complet qui s'applique directement aux images de microstructures. On s'intéresse en particulier aux schémas numériques et méthodes de discrétisation permettant de traiter des problèmes fortement non-linéaires présentant des phénomènes de localisation, en plasticité ou en endommagement.

Mots clés — Méthodes FFT ; Opérateur de Green ; Endommagement ; Plasticité parfaite

1 Méthodes numériques dites FFT

Les outils d'homogénéisation numériques "par FFT" [1] sont des méthodes à champ complet qui permettent de résoudre de nombreux problèmes issus de physique quasi-statique : propriétés de transport dans les milieux hétérogènes, diffusion, électrostatique [2], écoulement dans les poreux [3, 4], comportement mécanique de type (thermo-)élastique [5, 6, 7], plasticité et visco-plasticité [8, 9] ou encore visco-élasticité [10, 11], en petite et en grande déformation [12, 13]. Ces méthodes s'appliquent directement aux images de microstructures, qu'il s'agisse de micro-tomographies 3D [14], par exemple, ou encore aux images synthétiques obtenues à partir de modèles aléatoires [15, 16] ou de prédictions de méthodes d'apprentissage, et qui forment un volume élémentaire représentatif.

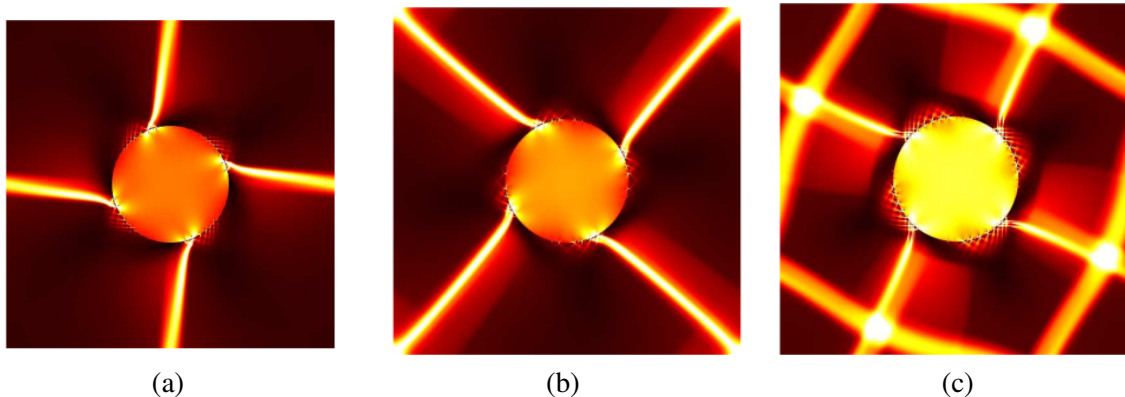


FIGURE 1 – Localisation de la déformation plastique dans un milieu périodique poreux parfaitement plastique en déformation plane, soumis à un chargement en cisaillement selon différentes directions (calculs FFT). (a) Proche d'un cisaillement simple, (b) d'un cisaillement pur, (c) cisaillement selon une direction intermédiaire.

2 Schémas numériques

Par principe, ces algorithmes reposent sur l'utilisation d'un opérateur de Green associé au problème physique considéré, qui permet d'imposer les relations d'admissibilité, d'équilibre ou de conservation des champs, dans le domaine de Fourier, tandis que la loi de comportement est prise en compte dans

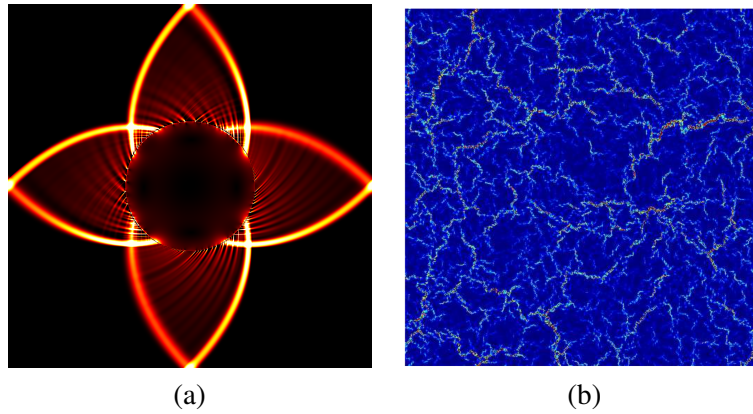


FIGURE 2 – Localisation de la déformation plastique dans un milieu poreux sous chargement hydrostatique. (a) Milieu périodique. (b) Milieu aléatoire.

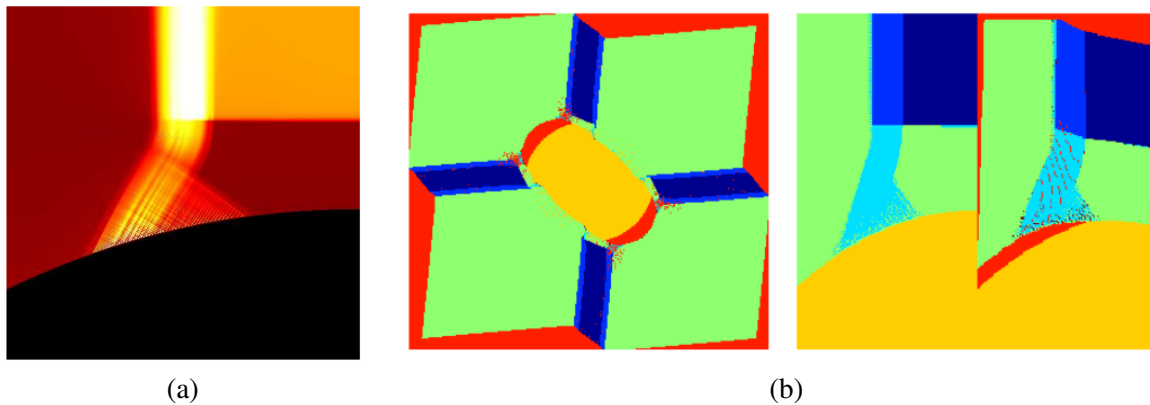


FIGURE 3 – (a) Bandes de localisation plastique autour d'un pore en déformation plane (agrandissement). (b) Déformation de la microstructure. Chargement appliqué en déformation plane et cisaillement simple pour un milieu rigide parfaitement plastique.

l'espace réel. Conçus à l'origine pour traiter des problèmes non-linéaires [17], les algorithmes FFT reposent sur deux choix principaux : l'algorithme numérique d'une part, et la méthode de discrétisation de l'opérateur de Green, qui détermine l'espace d'approximation des solutions. Beaucoup des algorithmes développés initialement afin de traiter le cas de forts contrastes [18, 19, 20, 21] ont été réinterprétés en terme de schémas numériques bien connus. Par exemple, le "schéma direct" [17] peut-être vu comme une méthode de descente de gradient projetée. Ces interprétations ont été fécondes car elles permettent de mieux choisir l'algorithme numérique en fonction d'une part de la linéarité ou de la non-linéarité de la loi de comportement, et d'autre part, pour les comportement non-linéaires, en fonction du coût en temps de calcul de la loi de comportement. D'une manière générale, les méthodes de type gradient conjugué [22, 23] sont parmi les plus rapides dans le cas de comportement linéaires, et les méthodes implicites de type polarisation [20] dans le cas de comportement non-linéaire à faible coût numérique.

3 Discrétisation de l'opérateur de Green

L'utilisation de transformées de Fourier discrètes conduit par défaut à supposer que l'inconnu principale, soit le champ de déformation en mécanique, est un polynôme trigonométrique. Ce choix n'est pas optimal, en particulier dans le cas de forts contrastes entre les phases, par exemple en présence de porosités, mais également dans le cas d'un module élastique tangent nul.

Une première solution consiste à utiliser une approche variationnelle [22, 25] dans laquelle on suppose, par exemple, que le champ de polarisation est uniforme dans chaque pixel, dans l'espace des fonctions continues. Une autre approche consiste à modifier le vecteur de Fourier [26] ou encore à utiliser un

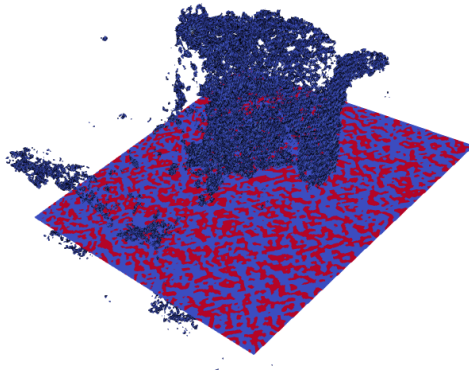


FIGURE 4 – Fissuration dans un milieu poreux (image tirée de [24]).

schéma aux différences finies [27, 28, 29]. On peut alors calculer un opérateur de Green cohérent avec la discrétisation choisie.

4 Applications

Nous présenterons dans ce travail quelques cas pratiques d'utilisation de ces méthodes numériques en particulier dans les cas présentant des phénomènes de localisation. On abordera tout d'abord le cas d'un comportement plastique parfait [30], comme illustré en Figs. (1), (2) et (3). Dans un second temps, on traitera des méthodes numériques FFT adaptées aux problèmes d'endommagement [31, 32, 24] par la méthode de champs de phase. Une illustration est représentée en figure (4).

Références

- [1] M. Schneider. A review of nonlinear fft-based computational homogenization methods. *Acta Mechanica*, 232(6) :2051–2100, 2021.
- [2] E. Couka, F. Willot, P. Callet, and D. Jeulin. Optical response of a hematite coating : ellipsometry data vs. Fourier-based computations. *Advanced Science, Engineering and Medicine*, 7(11) :925–931, 2015.
- [3] A. Wiegmann. Computation of the permeability of porous materials from their microstructure by FFF-Stokes, 2007. <http://kluedo.ub.uni-kl.de/files/1984/bericht129.pdf>, accessed 22 July 2015.
- [4] B. Abdallah, F. Willot, and D. Jeulin. Stokes flow through a Boolean model of spheres : Representative volume element. *Transport in Porous Media*, 109(3) :711–726, 2015.
- [5] J.-B. Gasnier, F. Willot, H. Trumel, D. Jeulin, and M. Biessy. Thermoelastic properties of microcracked polycrystals. Part II : The case of jointed polycrystalline TATB. *International Journal of Solids and Structures*, 155 :257–274, 2018.
- [6] F. Willot, L. Gillibert, and D. Jeulin. étude numérique par fft et analyse morphologique 3D des points chauds dans les milieux granulaires. In *20ème Congrès Français de Mécanique, 28 août/2 sept. 2011-25044 Besançon, France (FR)*, pages 574–579. Association française de mécanique, PUF de Franche-Comté, 2011. Online at <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00878998>.
- [7] F. Willot and D. Jeulin. The nonlinear response of boolean models : elasticity and conductivity. In S. Willot, F. & Forest, editor, *Physics & Mechanics of Random Media : from Morphology to Material Properties*, chapter 22, pages 181–186. Presses des Mines (ISBN 978-2-35671-529-6), Paris, 2018. Online at <https://people.cmm.minesparis.psl.eu/users/willot/publi2018c.pdf>.
- [8] R. A. Lebensohn. N-site modeling of a 3D viscoplastic polycrystal using fast Fourier transform. *Acta Materialia*, 49(14) :2723–2737, 2001.
- [9] H. Trumel, F. Willot, T. Peyres, M. Biessy, and F. Rabette. The irreversible thermal expansion of an energetic material. *Journal of Theoretical, Computational and Applied Mechanics*, 2021. Online at <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03110877>.
- [10] B. Figliuzzi, D. Jeulin, M. Faessel, F. Willot, M. Koishi, and N. Kowatari. Modelling the microstructure and the viscoelastic behaviour of carbon black filled rubber materials from 3D simulations. *Technische Mechanik*, 36(1–2) :22–46, 2016.

- [11] B. Burgarella, A. Maurel-Pantel, N. Lahellec, J.-L. Bouvard, N. Billon, H. Moulinec, and F. Lebon. Effective viscoelastic behavior of short fibers composites using virtual dma experiments. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 23 :337–360, 2019.
- [12] N. Lahellec, J.-C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet. Analysis of inhomogeneous materials at large strains using fast Fourier transforms. In *Proc. IUTAM Symposium on Computational Mechanics of Solid Materials at Large Strains*, pages 247–258. Kluwer Academic Publishers, 2003.
- [13] M. Kabel, T. Böhlke, and M. Schneider. Efficient fixed point and newton–krylov solvers for fft-based homogenization of elasticity at large deformations. *Computational Mechanics*, 54(6) :1497–1514, 2014.
- [14] J. Escoda, F. Willot, D. Jeulin, J. Sanahuja, and C. Toulemonde. Estimation of local stresses and elastic properties of a mortar sample by FFT computation of fields on a 3D image. *Cement and Concrete Research*, 41(5) :542–556, 2011.
- [15] D. Jeulin. *Modèles Morphologiques de Structures Aléatoires et de Changement d’Échelle*. PhD thesis, Université de Caen, 1991. Thèse de Doctorat d’État.
- [16] G. Matheron. *Théorie des ensembles aléatoires*. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1969.
- [17] H. Moulinec and P. Suquet. A fast numerical method for computing the linear and non linear mechanical properties of the composites. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences Série II*, 318 :1417–1423, 1994.
- [18] J.-C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet. A computational scheme for linear and non-linear composites with arbitrary phase contrast. *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 52(1–2) :139–160, 2001.
- [19] J.-C. Michel, H. Moulinec, and P. Suquet. A computational method based on augmented lagrangians and fast Fourier transforms for composites with high contrast. *Computer Modelling in Engineering & Sciences*, 1(2) :79–88, 2000.
- [20] D. J. Eyre and G. W. Milton. A fast numerical scheme for computing the response of composites using grid refinement. *The European Physical Journal Applied Physics*, 6(1) :41–47, 1999.
- [21] L. Gélébart and R. Mondon-Cancel. Non-linear extension of fft-based methods accelerated by conjugate gradients to evaluate the mechanical behavior of composite materials. *Computational Materials Science*, 77 :430–439, 2013.
- [22] S. Brisard and L. Dormieux. FFT-based methods for the mechanics of composites : A general variational framework. *Computational Materials Science*, 49(3) :663–671, 2010.
- [23] J. Zeman, J. Vondrejč, J. Novak, and I. Marek. Accelerating a FFT-based solver for numerical homogenization of a periodic media by conjugate gradients. *Journal of Computational Physics*, 229(21) :8065–8071, 2010.
- [24] S. Schäfer, F. Willot, M. N. Rad, S. T. Kelly, D. Enke, and J. Martins de Souza e Silva. Intermittent in-situ high-resolution x-ray microscopy of 400-nm porous glass under uniaxial compression : study of pore changes and crack formation. *arXiv preprint arXiv :2307.01611*, 2023.
- [25] F. Bignonnet and L. Dormieux. FFT-based bounds on the permeability of complex microstructures. *International Journal of Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 38(16) :1707–1723, 2014.
- [26] W. H. Müller. Mathematical vs. experimental stress analysis of inhomogeneities in solids. *Journal de Physique*, 6(C1) :139–148, 1996.
- [27] F. Willot, B. Abdallah, and Y.-P. Pellegrini. Fourier-based schemes with modified green operator for computing the electrical response of media with accurate local fields. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 98(7) :518–533, 2014.
- [28] F. Willot. Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields. *Comptes Rendus Mécanique*, 343(3) :232–245, 2015.
- [29] F. Willot. The effective conductivity of strongly nonlinear media : the dilute limit. *International Journal of Solids and Structures*, 184 :287–295, 2020.
- [30] F. Willot and Y.-P. Pellegrini. Fast Fourier transform computations and build-up of plastic deformation in 2D, elastic-perfectly plastic, pixelwise-disordered porous media. In *D. Jeulin, S. Forest (eds), “Continuum Models and Discrete Systems CMDS 11”*, pages 443–449, Paris, 2008. École des Mines. Online at <https://arxiv.org/abs/0802.2488>.
- [31] F. Rabette, H. Trumel, and F. Willot. Modélisation multiéchelle par champ de phase de la microfissuration d’un polycristal organique de forte anisotropie cristalline par fft. Presqu’île de Giens, 2019. Computational Structural Mechanics Association. Colloque National en Calcul des Structures, Giens, France, May 13-17, 2019. Online at <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02412743>.
- [32] Y. Chen, D. Vasiukov, L. Gélébart, and Chung H. Park. A fft solver for variational phase-field modeling of brittle fracture. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 349 :167–190, 2019.