

## Simulations FFT de matériaux hétérogènes avec conditions aux limites de type Dirichlet, Neumann et Périodiques, combinées et non uniformes

L. Gélébart<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherche en Matériaux et procédés Avancés, 91191, Gif-sur-Yvette, France  
lionel.gelebart@cea.fr

---

**Résumé** — Les méthodes FFT, très performantes pour la simulation numérique du comportement de matériaux hétérogènes, sont utilisées sous l'hypothèse de conditions aux limites périodiques. On se propose ici d'étendre ces méthodes à des chargements variés combinant sur chacune des faces des conditions de type Neumann, Dirichlet ou périodiques, uniformes ou non. On s'intéresse dans un premier temps aux problèmes de conduction, première étape vers les problèmes mécaniques. De plus amples détails seront disponibles prochainement dans un article récemment accepté [1].

**Mots clefs** — FFT, Neumann, Dirichlet.

---

### 1. Introduction

La résolution de problèmes mécaniques définis sur des cellules hétérogènes, soumises à des conditions aux limites (CL) périodiques, à l'aide d'un algorithme basé sur la FFT, a été proposée initialement par Moulinec et Suquet [2]. En raison de leur simplicité, de leur efficacité et de leur aptitude au parallélisme, ces méthodes sont devenues très populaires et diverses améliorations ont été proposées depuis la proposition initiale. Le lecteur est invité à lire l'article de Schneider [3] pour une vue d'ensemble de ces différentes avancées.

Une limitation importante des implémentations actuelles est leur restriction aux CL périodiques. Pour contourner ce problème, la cellule unitaire peut être entourée d'une zone tampon, ou buffer, dont les propriétés peuvent être ajustées pour simuler des CL de Neumann (voir par exemple [4] pour une simulation sur un tube), ou, avec une modification de l'algorithme, pour simuler des CL de Dirichlet [5]. Très récemment, la question a été abordée différemment pour les matériaux conducteurs par Monchiet [6] : au lieu d'utiliser un buffer, la cellule et son chargement sont symétrisés de manière cohérente avec le type de CL à appliquer (Neumann ou Dirichlet). L'inconvénient majeur de cette méthode est que la cellule unitaire, et donc la taille du problème est multipliée par 8 en 3D. En outre, leur proposition est limitée à des CL uniformes. Une autre approche a été proposée récemment par Grimm-Strele [7], pour des problèmes mécaniques, afin d'appliquer des CL orthogonales mixtes uniformes proposées par Pahr [8]. Cette approche étend les travaux antérieurs de Wiegmann [9] aux matériaux hétérogènes. Ici, les champs sont implicitement symétrisés par l'utilisation des transformées discrètes en sinus et en cosinus, de manière similaire à l'utilisation de la transformée de Fourier discrète. Cependant, la proposition de Grimm-Strele se limite à des chargements uniformes et à un nombre limité de cas de chargement. L'objectif est donc d'étendre cette approche afin de proposer une implémentation très flexible, permettant d'appliquer divers chargements uniformes ou non, en choisissant pour chacune des faces le type de CL à appliquer (périodiques, Neumann ou Dirichlet), mais également de choisir entre différents types de schémas de Différences Finies (deux types sont considérés ici). On se limite dans un premier temps aux problèmes de conduction.

La cellule unitaire est un parallélépipède délimité par 6 faces dénommées  $S_d^0$  et  $S_d^1$  ( $d = 1:3$ ): la face  $S_d^0$  avec une normale extérieure  $\mathbf{N}_d^0 = -\mathbf{e}_d$ , positionnée en ( $x_d = 0$ ), et la face  $S_d^1$  positionnée en  $x_d = L_d$  avec une normale  $\mathbf{N}_d^1 = \mathbf{e}_d$ . Les équations régissant le problème de conduction sont présentées ci-dessous :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\mathbf{q}) = 0 \\ \mathbf{q} = -\underline{K} \cdot \nabla \mathbf{T} \\ T = T^* + \tilde{T} \end{cases} \quad (1)$$

Avec  $\mathbf{q}$  le flux de chaleur,  $T$  la température et  $\underline{K}$  la conductivité thermique hétérogène. Notons qu'un champ, connu et arbitraire,  $T^*$  est introduit, de sorte que le champ inconnu est la fluctuation de température  $\tilde{T}$ . Différentes conditions aux limites CL peuvent être associées à chaque face (ou couple de faces). Pour les conditions aux limites périodiques sur les faces  $S_d^0$  et  $S_d^1$ ,  $\tilde{T}$  et  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_d$  doivent être  $L_d$ -périodiques (même valeur en des points opposés). Pour les CL de Dirichlet sur une surface donnée  $S_d^j$ , la fluctuation  $\tilde{T}$  est nulle sur  $S_d^j$  (de sorte que la valeur de  $T$  correspond à  $T^*$ ). Pour les conditions de Neumann sur une surface donnée  $S_d^j$ , le flux thermique normal  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{N}_d^j$  doit être égal au flux imposé  $Q_d^*$ . L'implémentation standard des méthodes FFT pour la simulation de matériaux hétérogènes ne prend en compte que les CL périodiques sur les 3 couples de faces opposées. L'implémentation proposée ici permet toutes les combinaisons de CL sur chacune des 6 faces. Avec 5 combinaisons par couple de faces opposées (périodique, Dirichlet/Dirichlet, Dirichlet/Neumann, Neumann/Dirichlet et Neumann/Neumann), l'implémentation doit être suffisamment flexible pour prendre en compte les 125 combinaisons possibles (250 en fait puisque deux schémas de discrétisation seront considérés). Cette flexibilité vient du fait que toutes ces conditions aux limites peuvent se ramener à l'utilisation de CL périodiques sur des cellules unitaires 2 ou 4 fois plus grandes en utilisant les symétries appropriées. Au cœur de la proposition, l'algorithme FFT standard, dédié aux CL périodiques est brièvement résumé ci-dessous.

La résolution du problème (1) avec des conditions aux limites périodiques, en utilisant une discrétisation spatiale régulière, peut être effectuée à l'aide de transformées de Fourier discrètes (avec la notation  $DFT(f) = \hat{f}^{DFT}$  ou simplement  $\hat{f}$ ) comme suit.

$$\begin{cases} \mathbf{q} = -\underline{K} \cdot (\nabla_D T^* + \nabla_D \tilde{T}) \\ p = \operatorname{div}_D(\mathbf{q} - k_0 \nabla_D \tilde{T}) \\ \operatorname{div}_D(\nabla_D \tilde{T}) = -\frac{p}{k_0} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \mathbf{q} = -\underline{K} \cdot (\nabla_D T^* + \nabla_D \tilde{T}) \\ p = \operatorname{div}_D(\mathbf{q} - k_0 \nabla_D \tilde{T}) \\ \hat{\tilde{T}} = \frac{\hat{p}}{k_0 \|\boldsymbol{\xi}_D\|^2} (\doteq \hat{G}_D(\hat{p})) \end{cases} \quad (2)$$

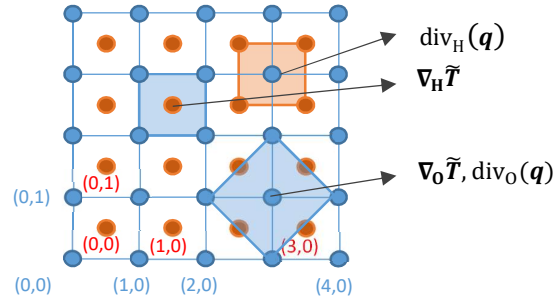
Dans cette formulation (2), toutes les variables sont des champs discrets et  $\operatorname{div}_D$  et  $\nabla_D$  sont les opérateurs discrets, divergence et gradient, associés au choix d'une discrétisation finie  $D$ . Ce choix s'accompagne de la définition de vecteurs d'onde modifiés  $\boldsymbol{\xi}_D$ , de sorte que  $\widehat{\operatorname{div}_D(\mathbf{q})} = i\hat{\mathbf{q}} \cdot \boldsymbol{\xi}_D$  and  $\widehat{\nabla_D T} = i\hat{T} \boldsymbol{\xi}_D$ . Leurs expressions peuvent être trouvées dans [10] ou [3] pour différents schémas de différences finies (DF). La formulation (2) permet de définir un algorithme de point fixe : 1/ étant donné  $\tilde{T}$ , évaluer  $p$  dans l'espace réel, 2/ appliquer l'opérateur de Green discret  $G_D$  (c'est-à-dire évaluer  $\tilde{T}$  à partir d'un aller-retour dans l'espace de Fourier), retour à 1/. Si le choix du paramètre numérique  $k_0$  influence fortement la convergence de l'algorithme de point fixe [2], l'utilisation d'une procédure d'accélération de convergence (l'accélération d'Anderson telle que proposée dans [4] et implémentée dans [11]) améliore fortement la convergence et réduit la sensibilité à  $k_0$ .

## 2. Discrétisation de la cellule et schémas de différences finis

La figure 1 illustre les définitions utilisées pour la discrétisation de la cellule : la grille de nœuds inclut les bords de la cellule, tandis que la grille de centres, translattée d'un demi-voxel, ne touche pas les bords de la cellule. La taille de la grille de centres est de  $n_1 n_2 n_3$  associée au domaine  $[0: n_d - 1]_{d=1:3}$ , et la taille de la grille de nœuds est de  $(n_1 + 1)(n_2 + 1)(n_3 + 1)$  associée au domaine  $[0: n_d]_{d=1:3}$  (avec la notation  $[0: n_d]_{d=1:3} = [0: n_1] \times [0: n_2] \times [0: n_3]$  et  $0: n = \{0, 1, 2, \dots, n\}$ ).

Deux schémas de différences finies (DF) sont utilisés : le schéma octaédrique centré, avec la notation O remplaçant D dans (2), et le schéma hexaédrique, strictement équivalent aux éléments finis hexaédriques avec intégration réduite [12], avec la notation H. Ces différents schémas sont représentés sur la figure 1.

- Grille de **noeuds** (support de  $\tilde{T}$  et  $p$ , et de  $\nabla_0 \tilde{T}$  et  $q$  pour le schéma O)
- Grille de **centres** (support de  $\nabla_H \tilde{T}$  et  $q$  pour le schéma H)



Définitions pour ces deux grilles 2D :

- Dimensions :  $n_1 = n_2 = 4$
- Etendue de la grille de **noeuds** :  $[0: n_1, 0: n_2]$
- Etendue de la grille de **centres** :  $[0: n_1 - 1, 0: n_2 - 1]$

Figure 1 : Illustration de la discrétisation de la cellule élémentaire: définition des étendues des grilles de noeuds et de centres, localisation des différents quantités en fonction du schéma de différences finies (O or H), et illustration des deux schémas O and H.

## 3. Application de l'opérateur de Green avec conditions de symétrie

La définition de la transformée de Fourier discrète (DFT) associée à la définition du nombre d'onde (ou vecteur d'onde en 3D) est :

$$\hat{F}_k = \sum_{j=0}^{n-1} f_j \exp(-ik\xi_j), \quad \xi_j = \frac{2\pi j}{n}, \quad k \in [0: n - 1] \quad (3)$$

L'intérêt majeur de cette transformée est de transformer une opération de dérivation, dans l'espace réel, en une simple multiplication par le vecteur d'onde, dans l'espace de Fourier. Pour les opérateurs de différences finies présentés ci-dessus, on peut définir des vecteurs d'onde modifiés  $\xi_D$ , de sorte que  $\widehat{\text{div}_D(q)} = i\hat{q} \cdot \xi_D$  and  $\widehat{\nabla_D T} = i\hat{T} \xi_D$ . L'utilisation de ces formules de dérivation suppose implicitement la périodicité du champ à dériver.

On utilisera par la suite la notation  $\hat{F}_M$  pour un champ défini sur un domaine  $[0: Mn - 1]$ ,  $M$  fois plus étendu :

$$\hat{F}_{M,k} = \sum_{j=0}^{Mn-1} f_j \exp(-ik\xi_{M,j}), \quad \xi_{M,j} = \frac{2\pi j}{Mn}, \quad k \in [0: Mn - 1] \quad (4)$$

Si la définition de la DFT suppose le champ périodique, la définition des transformées discrètes sinus et cosinus dépend des symétries du champ. Ainsi, la transformée DCT1 est associée à un champ symétrique à droite et à gauche (i.e. sur les bords de chaque côté du domaine), la transformée DST1 à un champ anti-symétrique à droite et à gauche, la transformée DST3 à un champ anti-symétrique à gauche et symétrique à droite, et enfin la transformée DCT3 à un champ symétrique à gauche et anti-symétrique à droite. On notera que le champ en question ici est la fluctuation de température  $\tilde{T}$  et que chacun de ces choix correspond à un type de conditions aux limites : le choix anti-symétrique suppose  $\tilde{T}$  nul au bord (condition de type Dirichlet), tandis que le choix symétrique suppose un gradient nul dans la direction normale au bord (condition de type Neumann). On peut montrer que ces différentes conditions de symétries peuvent permettre de construire des champs périodiques, ayant une période 2 ou 4 fois plus étendue que celle du champ d'intérêt. Ainsi, les DCT1 et DST1 sont reliées à la DFT sur des champs deux fois plus étendus, et les DCT3 et DST3 sont reliés à la DFT sur des champs quatre fois plus étendus. On notera qu'on suppose ici que le champ  $\tilde{T}$  est défini aux nœuds (la définition de  $\tilde{T}$  sur la grille de centres aurait conduit à l'utilisation d'autres types de transformée discrète sinus et cosinus : DCT2, DST2, DST4 et DCT4). Ces relations sont données ci-dessous (rappelant au passage la définition des différentes DST/DCT) :

$$\hat{F}_{2,k} = f_0 + f_{N-1}(-1)^k + 2 \sum_{j=1}^{N-2} f_j \cos\left(\frac{k\pi j}{N-1}\right) = \hat{F}_k^{DCT1}, \quad k \in [0: n], \quad (5)$$

$$\hat{F}_{2,k} = -i \cdot 2 \sum_{j=0}^{N-1} f_j^* \sin\left(\frac{k\pi(j+1)}{N+1}\right) = -i \hat{F}_{k-1}^{DST1}, \quad k \in [1: n-1], \quad (6)$$

$$\hat{F}_{4,2k+1} = 2 \left( f_0 + \sum_{j=1}^{n-1} f_j \cos\left(\frac{\pi(k+1/2)j}{n}\right) \right) = 2 \hat{F}_k^{DCT3}, \quad k \in [0: n-1], \quad (7)$$

$$\hat{F}_{4,2k+1} = -2i \left( f_{n-1}^*(-1)^k + 2 \sum_{j=0}^{n-2} f_j^* \sin\left(\frac{\pi(j+1)(k+1/2)}{n}\right) \right) = -2i \hat{F}_k^{DST3}, \quad k \in [0: n-1] \quad (8)$$

Chacune de ces définitions est associée à une sélection des points dans l'espace réel et dans l'espace de Fourier. Dans l'espace réel, la valeur du champ, supposée nulle en bord de domaine dans le cas d'une transformation sinus, n'est pas considérée. Dans l'espace de Fourier, les sélections de fréquences données dans les équations (5) à (8) pour des champs périodiques de période égale à 2 ou 4 fois l'étendue du champ de base, sont ramenées à une sélection de fréquences pour des champs de période égale à 4 fois l'étendue de base. Ces sélections sont regroupées au sein du tableau 1 ci-dessous.

Transformée Discrète	$S_R$ : sélection dans $[0:n]$ (Espace réel)	$S_F$ : sélection dans $[0,4n-1]$ (Espace de Fourier)	$N$ : nombre de points sélectionnés
WSWS / DCT1	$[0:n]$	$2 \times [0:n]$ (0,2,4 ..., 2n)	$n+1$
WSWA / DCT3	$[0:n-1]$	$2 \times [0:n-1] + 1$ (1,3,5 ..., 2n-1)	$n$
WAWA / DST1	$[1:n-1]$	$2 \times [1:n-1]$ (2,4,6 ..., 2n-2)	$n-1$
WAWA / DST3	$[1:n]$	$2 \times [0:n-1] + 1$ (1,3,5 ..., 2n-1)	$n$
P / DFT	$[0:n-1]$	$4 \times [0:n-1]$ (0,4,8 ..., 4n-4)	$n$

Tableau 1 : Sélection de points dans l'espace réel ( $S_R$ ) et dans l'espace de Fourier ( $S_{4F}$ ) pour différentes Transformées Discrètes

L'application de l'opérateur de Green prenant en compte une symétrie particulière (et donc un type de conditions aux limites) est réalisée à partir des équations (9) à (11). La première étape, équations (9), consiste à sélectionner les points dans l'espace réel (opérateur  $S_R$ , voir Tableau 1), à appliquer la transformée discrète (DT) afin d'en déduire les composantes sélectionnées dans l'espace de Fourier par l'opérateur  $S_{4F}$  (voir Tableau 1). L'application de l'opérateur de Green périodique sur un domaine de dimension 4 est ensuite réalisée pour cette sélection de fréquences, équation (10). Enfin, l'équation (11) (inverse de l'équation (9)) est utilisée pour déduire  $\tilde{T}$  sur les points sélectionnés dans l'espace réel, par inversion de la transformée discrète (sinus ou cosinus) du champ sélectionné dans l'espace de Fourier.

$$S_{4F}(\hat{p}_4^{DFT}) = \alpha \widehat{S_R(p)}^{DT} \quad (9)$$

$$S_{4F}(\hat{\tilde{T}}_4^{DFT}) = S_{4F}(\hat{G}_{D4} \hat{p}_4^{DFT}) = S_{4F}(\hat{G}_{D4}) S_{4F}(\hat{p}_4^{DFT}) = \frac{S_{4F}(\hat{p}_4^{DFT})}{k_0 \|S_{4F}(\xi_{D4})\|^2} \quad (10)$$

$$\widehat{S_R(\tilde{T})}^{DT} = \frac{S_{4F}(\hat{\tilde{T}}_4^{DFT})}{\alpha} \quad (11)$$

### **Remarques :**

1 – Par souci de concision, la présentation ci-dessous ne considère que des champs 1D. L'extension à des champs 3D est directe puisqu'elle implique une succession de transformées 1D dans chacune des directions.

2 – En corolaire à la remarque précédente, on remarque que chaque face de la cellule unitaire peut donc être soumise à un type de condition aux limites différent (Dirichlet, Neumann ou périodique). Ainsi pour chaque couple de faces opposées on a 5 choix possibles (Neumann/Neumann, Neumann/Dirichlet, Dirichlet/Neumann, Dirichlet/Dirichlet, périodique, et donc  $5 \times 5 \times 5 = 125$  combinaisons possibles). L'algorithme proposé ici est suffisamment flexible pour s'adapter à chacun de ces choix.

3 – Pour des conditions aux limites de type Dirichlet, on voit aisément que les températures imposées aux bords sont données par les valeurs au bord du champ  $T^*$  imposé. Pour les conditions de Neumann, avec des conditions autres qu'un flux nul, il est nécessaire d'introduire des termes sources sur les bords du domaine. On se référera à [1] pour plus de détails.

4 – Pour ce résumé étendu, l'attention s'est focalisée sur l'application de l'opérateur de Green (étape 2/ de l'algorithme de point fixe décrit en fin section 1). L'étape 1/ consiste à évaluer le champ  $p$  à partir

d'opérations de dérivation dans l'espace réel, nécessitant, pour les points situés aux bords du domaine, d'étendre le champ à l'extérieur du domaine considéré en prenant soin d'utiliser les conditions de symétries choisies. Le lecteur trouvera de plus amples détails dans [1].

## 4. Validation

Le schéma de différences finies de type  $H$  (voir figure 1) étant strictement équivalent à l'utilisation d'éléments finis linéaires hexaédriques à intégration réduite (Hex8R), une validation rigoureuse de l'implémentation proposée a pu être réalisée par comparaisons directes avec des simulations EF menées à l'aide du code CAST3M [13]. La cellule élémentaire est un cube de dimension  $1 \times 1 \times 1$ , avec une inclusion de rayon 0.3 centrée en (0.15,0.4,0.6). On remarque que, afin de traiter le cas plus délicat d'une interface située sur les bords du domaine, l'inclusion traverse la face ( $x = 0$ ). Afin d'introduire de fortes hétérogénéités, un fort contraste de conductivité thermique est utilisé (matrice 1, inclusion  $10^{-3}$ ).

Etant données les 125 combinaisons possibles de chargement, seule une sélection a été proposée pour la validation : les conditions aux limites uniformes (périodiques, Dirichlet et Neumann), des conditions aux limites uniformes combinées (conditions différentes sur les différentes faces), et enfin des conditions aux limites combinées et non-uniformes. Pour les CL uniformes on utilise  $T(\mathbf{x}) = \mathbf{G}^* \cdot \mathbf{x} + \tilde{T}(\mathbf{x})$ ,  $\tilde{T}$  soumis à des conditions de Dirichlet nulles ou à des CL périodiques, ou  $\mathbf{q}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{N}(\mathbf{x}) = \mathbf{Q}^* \cdot \mathbf{N}(\mathbf{x})$  pour des CL de Neumann. Ces trois types de CL sont largement utilisés dans le cadre de l'homogénéisation numérique (les CL de Neumann, Dirichlet et périodiques fournissant respectivement une borne inférieure, supérieure et une estimation du comportement effectif). Pour cette validation, on utilise  $G_1^* = G_2^* = G_3^* = Q_1^* = Q_2^* = Q_3^* = 1$ . Le même type de chargement est utilisé pour définir des chargements combinés, avec trois exemples : périodique/Dirichlet/Neumann, ou Neumann-Dirichlet/Dirichlet/Neumann, Dirichlet-Neumann/Dirichlet/Neumann. Le 1er exemple montre la possibilité de combiner trois types de chargement sur chaque direction, les deux suivants montrent la possibilité d'appliquer des conditions de Dirichlet sur une face et de Neumann sur la face opposée. Enfin, un chargement combiné et non-uniforme est testé : les faces perpendiculaires aux directions 2 et 3 sont soumises à un flux nul. La face ( $x_1 = 0$ ) est soumise à une température imposée hétérogène  $T(\mathbf{x}) = T^*(\mathbf{x}) = T_0 \left( 1 - \left( \frac{x_2 - 1/2}{1/2} \right)^2 \left( \frac{x_3 - 1/2}{1/2} \right)^2 \right)$  et la face ( $x_1 = 1$ ) est soumise à un flux normal hétérogène (égal à  $Q^*$  sur un carré de taille  $0.5 \times 0.5$  centré sur la face et nul sur le reste de la face).

Les résultats obtenus, sous forme de grandeurs moyennes, sont regroupés dans le tableau ci-dessous. On peut remarquer un excellent accord entre les résultats FFT et CAST3M sur les différentes simulations. L'erreur relative est généralement inférieure à  $10^{-7}$ , en rapport avec la précision demandée pour l'algorithme itératif FFT (le solveur direct de CAST3M donnant accès la solution exacte du problème discret)

Pour le chargement non-uniforme, le champ de flux axial est représenté à la figure 2. On y observe clairement, sous deux angles différents, le flux imposé (nul sauf sur un carré de taille  $0.5 \times 0.5$ ) ainsi que la conséquence du champ de température imposé.

	It.	Factor	$\bar{\nabla T}_1$	$\bar{\nabla T}_2$	$\bar{\nabla T}_3$	$\bar{q}_1$	$\bar{q}_2$	$\bar{q}_3$
Periodique	47		1.000	1.000	1.000	-0.8430	-0.8669	-0.8661
<i>Erreur rel.</i>		$10^{-11}$	0.00	0.00	0.00	0.12	0.02	0.86
Dirichlet	46		1.000	1.000	1.000	-0.8772	-0.8732	-0.8760
<i>Erreur rel.</i>		$10^{-10}$	0.00	0.00	0.00	0.50	0.29	0.24
Neumann	152		-20.72	-1.192	-1.183	1.000	1.000	1.000
<i>Erreur rel.</i>		$10^{-8}$	0.76	0.01	0.01	0.00	0.02	0.02
Per/Dir/Neu	49		1.000	1.000	-0.0037	-0.8444	-0.8779	0.0022
<i>Erreur rel.</i>		$10^{-7}$	0.	0.	0.28	0.00	0.00	0.50
Neu-Dir/Dir/Neu	117		-19.17	1.000	0.1773	-0.4170	-0.8206	-0.1706
<i>Erreur rel.</i>		$10^{-7}$	0.15	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
Dir-Neu/Dir/Neu	48		0.4700	1.000	0.1833	-0.3969	-0.8828	-0.1209
<i>Erreur rel.</i>		$10^{-10}$	0.13	0.00	0.93	0.05	0.01	0.80
Non-uniforme	75		-0.3240	0.0170	-0.0170	0.2500	-0.0071	0.0071
<i>Erreur rel.</i>		$10^{-9}$	0.05	0.10	0.10	0.02	0.42	0.42

Tableau 2 : Gradient de température et flux moyens évalués par le code EF CAST3M pour différents chargements, et erreur relative entre simulations EF et FFT (avec un critère de convergence de  $\varepsilon^0 = 10^{-8}$  pour l'algorithme itératif FFT)

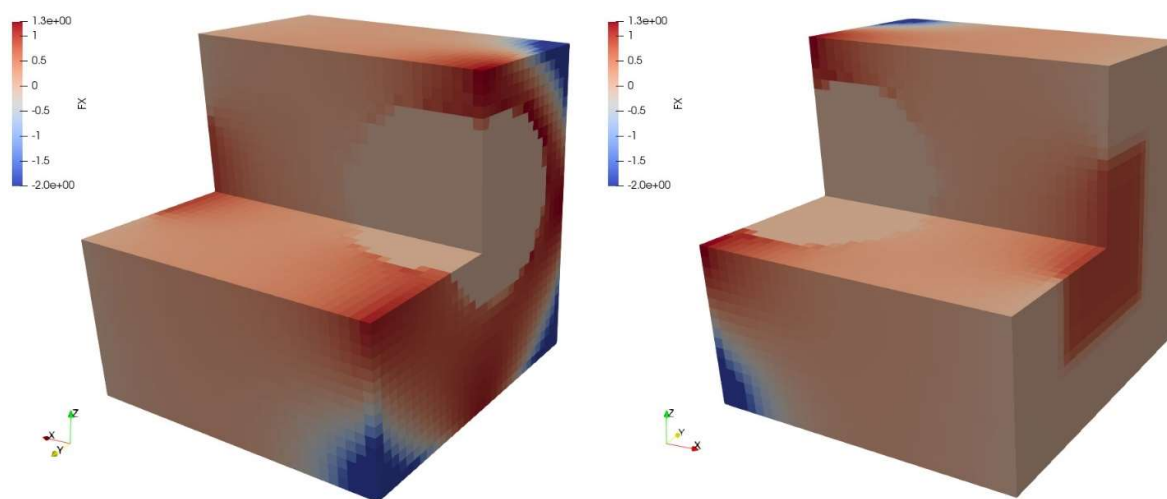


Figure 2 : Flux de chaleur  $q_1$  pour le chargement non-uniforme

## Remerciements

L'auteur tient à remercier Marc Josien (CEA Cadarache) pour les discussions autour de ce sujet et Olivier Fandeur (CEA Saclay) pour l'introduction dans CAST3M des éléments finis hexaédriques linéaires à intégration réduite pour les problèmes de thermique (nécessaires ici pour une validation rigoureuse de l'implémentation FFT proposée).

## Références

- [1] L. Gélébart, "Fft-based simulations of heterogeneous conducting materials with combined nonuniform neumann, periodic and dirichlet boundary conditions," *Eur. Jour. Mech. / A solids*, 2024 (accepted 19th January).
- [2] 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, no. 1-2, pp. 69–94, Apr. 1998.
- [3] M. Schneider, "A review of nonlinear fft-based computational homogenization methods," *Acta Mechanica*, vol. 232, no. 6, pp. 2051–2100, 2021. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1007/s00707-021-02962-1>
- [4] 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.*, vol. 161, pp. 111 – 126, 2019. [Online]. Available: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020768318304554>
- [5] L. Gélébart, "A modified fft-based solver for the mechanical simulation of heterogeneous materials with dirichlet boundary conditions," *enComptes Rendus. Mécanique*, vol. 348, no. 8-9, pp. 693–704, 2020. [Online]. Available: [comptes-rendus.academie-sciences.fr/mecanique/item/CRMECA\\_2020\\_\\_348\\_8-9\\_693\\_0/](https://comptes-rendus.academie-sciences.fr/mecanique/item/CRMECA_2020__348_8-9_693_0/)
- [6] V. Monchiet and G. Bonnet, "Fft based iterative schemes for composite conductors with uniform boundary conditions," *European Journal of Mechanics - A/Solids*, vol. 103, p. 105146, 2024. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0997753823002383>
- [7] H. Grimm-Strele and M. Kabel, "Fft-based homogenization with mixed uniform boundary conditions," *Int J Numer Methods Eng*, vol. 122, no. 23, pp. 7241–7265, Dec. 2021. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1002/nme.6830>
- [8] D. Pahr and P. Zysset, "Influence of boundary conditions on computed apparent elastic properties of cancellous bone," *EnglishBiomechanics and Modeling in Mechanobiology*, vol. 7, no. 6, pp. 463–476, 2008. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1007/s10237-007-0109-7>
- [9] W. A., "Fast poisson, fast helmholtz and fast linear elastostatic solvers on rectangular parallelepipeds," Lawrence Berkeley National Lab. (LBNL), Berkeley, CA (United States), Tech. Rep., 1999. [Online]. Available: <https://www.osti.gov/biblio/982430>
- [10] F. Willot, "Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields," *Comptes Rendus Mécanique*, vol. 343, no. 3, pp. 232 – 245, 2015. [Online]. Available: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1631072114002149>
- [11] L. Gélébart, "<https://amitexfft.github.io/amitex/index.html>," 2022.
- [12] M. Schneider, D. Merkert, and M. Kabel, "Fft-based homogenization for microstructures discretized by linear hexahedral elements," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 109, no. 10, pp. 1461–1489, 2017. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.1002/nme.5336>
- [13] "Cast3m, ww-cast3m.cea.fr."