

Stratégies de calcul haute-performance non-intrusives pour la simulation non-linéaire de microstructures hétérogènes obtenues par imagerie



Encadrement

Paul OUMAZIZ ICA GM, INSA-Toulouse paul.oumaziz@insa-toulouse.fr
 Robin BOUCLIER IMT & ICA GMM, INSA-Toulouse bouclier@insa-toulouse.fr

Mots clés : HPC, données massives, simulation pilotée par les données, modèle basé sur les images, calcul de structures, calcul parallèle, couplage non-intrusif, domaine fictif.

Contexte

La thèse se place dans le contexte de la révolution digitale initiée dans le domaine de la mécanique expérimentale. Celle-ci pourrait conduire à terme à redéfinir les procédures de certification dans l'industrie et ainsi réduire considérablement les temps de conception des structures. En particulier, l'utilisation des images s'est généralisée en mécanique des matériaux. Avec l'essor des techniques d'imagerie volumique (IRM, scanner, échographie, tomographie en cohérence optique, etc.), il devient possible aujourd'hui d'obtenir des images 3D d'un échantillon à l'échelle de sa microstructure (voir Fig. 1(gauche)). Ces images sont utilisées pour construire des modèles mécaniques numériques (*image-based models* [1,2,3] en anglais, voir Fig. 1 (milieu)) et ainsi conduire des analyses au plus proche des conditions expérimentales (simulations pilotées par les données ou *data driven simulations* en anglais). Avec de tels modèles, un retour vers l'expérimental devient aussi envisageable pour (i) régulariser la mesure de champ à partir de recalage d'images [4] et (ii) caractériser les propriétés mécaniques des matériaux à l'échelle de la microstructure [5] (on parle alors d'assimilation de données ou *data assimilation* en anglais). Il est à noter qu'une telle caractérisation constitue un challenge d'actualité non seulement en mécanique des matériaux mais aussi dans d'autres domaines de la physique tels que le biomédical ou le médical (voir Fig. 1(droite)).

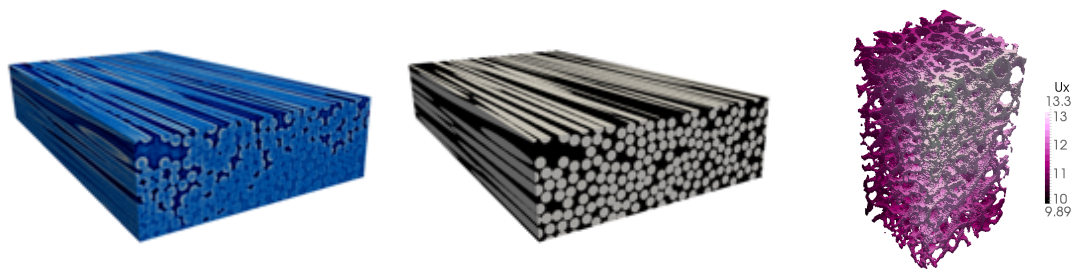


Fig. 1. Image tomographique d'un échantillon composite [6] (gauche), construction d'un modèle du composite à l'aide de splines (milieu) [6], et mesure de déplacement volumique à partir d'image IRM d'un os bovin en compression [7] (droite).

Problématique scientifique

Si les techniques de construction de modèles basés sur les images semblent à l'heure actuelle assez matures, le calcul des modèles qui en résultent apparaît encore hors de portée pour des applications mécaniques concrètes telles que la simulation 3D de composites tissés à l'échelle de la microstructure. En effet, ces modèles sont associés à des données massives [1,8] (les images tomographiques actuelles peuvent facilement atteindre $2000 \times 2000 \times 2000$ voxels) et font appel à des modélisations numériques complexes, telles que combinant des approches de type domaine fictif avec des fonctions de forme de degrés et régularités supérieurs [2,3]. Les opérateurs de rigidité qui en découlent sont par conséquent de grande dimension et mal conditionnés, ce qui rend leurs résolutions, même à l'aide des techniques de calcul intensif actuelles, extrêmement délicates. Quelques travaux tout récents se sont attaqués à la problématique dans le cadre de structures monophasiques linéaires [9,10] mais rien ne semble avoir été proposé à l'heure actuelle pour des structures hétérogènes non-linéaires, comme par exemple des composites fibres/matrice.

Objectif et méthodes envisagées

L'objectif général de la thèse est de répondre au défi scientifique ci-dessus afin de disposer d'un environnement numérique efficace pour simuler, en non-linéaire, des microstructures hétérogènes obtenues par imagerie. Pour se faire, il est proposé de se baser sur une approche de *couplage global/local non-intrusif* [11]. L'utilisation de ce concept est originale dans le domaine pour lequel des stratégies plus classiques de type décomposition de domaine sont plutôt envisagées [1,9,10]. Le couplage global/local non-intrusif permet de modifier localement un modèle global sans toucher à ses opérateurs éléments finis initiaux. L'intérêt de cet algorithme de calcul est clair dans notre contexte: par exemple pour les composites fibres/matrice, il permettra de simuler aisément et efficacement la présence de fibres locales dans la matrice globale. Toutefois, cet outil devra être fortement étendu pour répondre à la problématique du projet (couplage non-conforme [12], interface non-linéaire [13], structures hétérogènes [14], etc.). À terme, les algorithmes développés pourront être déployés sur le mésocentre de calcul de la région CALMIP.

Remarques

Le sujet de thèse proposé est fortement inter-disciplinaire (mécanique/mathématique/informatique) si bien que l'étudiant sera amené à évoluer dans un environnement riche regroupant au moins l'Institut de Mathématiques de Toulouse (IMT) et l'institut Clément Ader (ICA). Par ailleurs, il pourra être envisagé de collaborer avec des chercheurs/ingénieurs de EDF R&D et ONERA (Paris) que la problématique intéresse aussi. Enfin, cette thèse bénéficiera directement de l'expertise de la thèse en cours d'A. Rouwane [5] quant à la modélisation mécanique basée sur des images et permettra un retour vers l'expérimentale dans un projet futur.

Références

- [1] Liu, X., Réthoré, J., Baietto, M. C., Sainsot, P., and Lubrecht, A. A. An efficient strategy for large scale 3D simulation of heterogeneous materials to predict effective thermal conductivity. *Computational Materials Science*, 166 (2019). 265-275.
- [2] Lian, W.-D., Legrain, G. and Cartraud, P. Image-based computational homogenization and localization: comparison between X-FEM/levelset and voxel-based approaches. *Computational Mechanics*, 51 (2013) 279-293.
- [3] Verhoosel, C.-V., van Zwieten, G.-J., van Rietbergen, B., and de Borst, R. Image-based goal-oriented adaptive isogeometric analysis with application to the micro-mechanical modeling of trabecular bone. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 284 (2015) 138-164.
- [4] Rouwane, A. Propriétés mécaniques à partir de corrélation d'images volumiques éléments finis. PhD thesis, *Université de Toulouse*. (2018-2021)
- [5] Naylor, R. Prédiction des premiers endommagements des composites tissés par modélisation à l'échelle microscopique et validation multi-échelle. PhD thesis, *Université Paris-Saclay*. (2016-2019)
- [6] Chelaghma, S. Functionalization of Carbon/PEKK composites for aerospace applications: characterization, modeling and influence on the composite properties. PhD thesis. *Université de Toulouse*. (2015-2018)
- [7] L.A. Gomes Perini, J.-C. Passieux and J.-N. Périé. A multigrid PGD-based algorithm for volumetric displacement fields measurements. *Strain*, 50(4) (2014) 355-367.
- [8] J. Neggers, O. Allix, F. Hild, and S. Roux. Big data in experimental mechanics and model order reduction: today's challenges and tomorrow's opportunities. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 25 (2018) 143-164.
- [9] Badia, S. and Verdugo, F. Robust and scalable domain decomposition solvers for unfitted finite element methods. *J. Comp. Appl. Math*, 344 (2018) 740-759.
- [10] Jomo, J., de Prenter, F., Elhaddad, M. et al. Robust and parallel scalable iterative solutions for large-scale finite cell analyses. *Finite Elements in Analysis & Design*, 163 (2019) 14-30.
- [11] Duval, M., Passieux, J. C., Salati, M., and Guinard. S., Non-intrusive Coupling: Recent Advances and Scalable Nonlinear Domain Decomposition, *Archives of Computational Methods in Engineering*, 1 (2016) 17-38
- [12] Bouclier, R. and Passieux, J.-C. A Nitsche-based non-intrusive coupling strategy for global/local isogeometric structural analysis. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 340 (2018) 253-277.
- [13] Oumaziz, P., Gosselet, P., Boucard, P. A., and Guinard, S. A parallel non-invasive mixed domain decomposition - Implementation and applications to mechanical assemblies, *Finite Elements in Analysis & Design*, 156 (2019) 24-33
- [14] Bovet, C., Parret-Fréaud, A., Spillane, N. and Gosselet, P. Adaptive multipreconditioned FETI: Scalability results and robustness assessment, *Computers & Structures*, 193 (2017) 1-20

Non-invasive high-performance computing strategies for the non-linear simulation of heterogeneous microstructures obtained by tomography



Supervisors

Paul OUMAZIZ ICA GM, INSA-Toulouse paul.oumaziz@insa-toulouse.fr
 Robin BOUCLIER IMT & ICA GMM, INSA-Toulouse bouclier@insa-toulouse.fr

Keywords : HPC, massive data, data driven simulation, image-based model, structural mechanics, parallel computing, non-invasive coupling, fictitious domain.

Context

The thesis takes place in the context of the digital revolution initiated in the field of experimental mechanics. This one could eventually lead to redefine certification procedures in the industry and thus significantly reduce times of structural design. In particular, the use of images has become widespread in mechanics of materials. With the rise volume imaging techniques (MRI, scanner, ultrasound, optical coherence tomography, etc.), it is now possible to obtain 3D images of a sample at the scale of its microstructure (see Fig. 1 (left)). These images are used to build mechanical models (*image-based models* [1,2,3], see Fig. 1 (middle)) and thus conduct analyzes as close as possible to experimental conditions (*data-driven simulations*). With such models, a return to the experimental also becomes possible to (i) regularize field measurement from image registration [4] and (ii) characterize the mechanical properties of materials to the microstructure scale [5] (the general field is today referred to as *data assimilation*). It should be noted that such a characterization constitutes a current challenge not only in mechanics of materials but also in other fields physics such as biomedical or medical (see Fig. 1 (right)).

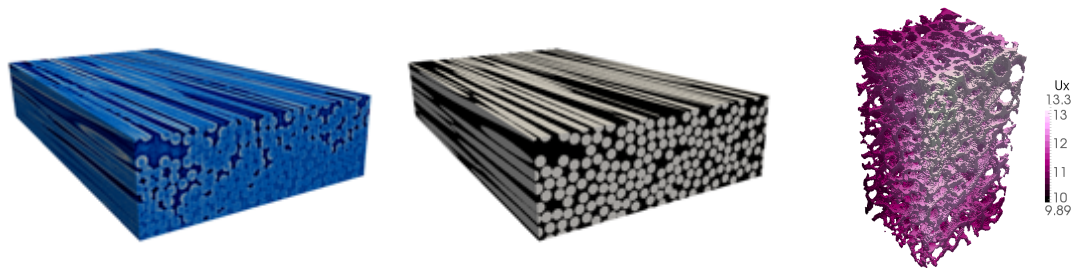


Fig. 1. Image tomographique d'un échantillon composite [6] (gauche), construction d'un modèle du composite à l'aide de splines (milieu) [6], et mesure de déplacement volumique à partir d'image IRM d'un os bovin en compression [7] (droite).

Scientific issues

While image-based model building techniques currently seem quite mature, the computation of resulting models still appear out of reach for actual mechanical applications such as 3D simulation of woven composites at the scale of microstructure. Indeed, these models are associated with massive data [1,8] (the images current tomography can easily reach $2000 \times 2000 \times 2000$ voxels) and use complex numerical modeling, such as combining fictitious domain type approaches with shape functions with higher degree and regularity [2,3]. The resulting stiffness operators are therefore large and poorly conditioned, which makes their resolutions, even using current intensive computing techniques, extremely delicate. Some very recent work have tackled the problem in the context of linear monophasic structures [9,10] but nothing seems to have been proposed at present for heterogeneous non-linear structures, such as for example fiber / matrix composites.

Objective and envisaged methods

The general objective of the thesis is to respond to the above scientific challenge in order to end up with an efficient a digital environment to simulate, in non-linear, heterogeneous microstructures obtained by imaging. To do so, it is proposed to use a *non-invasive global / local coupling* approach [11]. The use of this concept is original in the field for which of the more traditional strategies of the domain decomposition type are rather envisaged [1,9,10]. The non-invasive Global / local coupling makes it possible to locally modify a global model without altering its initial finite element operators. The interest of this calculation algorithm is clear in our context: for fiber / matrix composites, it will allow to easily and efficiently simulate the presence of local fibers in the global matrix. However, this tool will have to be greatly extended to respond to the project issue (non-conforming coupling [12], non-linear interface [13], heterogeneous structures [14], etc.). Ultimately, the algorithms developed could be deployed on the CALMIP region's data center.

Remarks

The proposed thesis subject is highly interdisciplinary (mechanical / mathematical / computer) so that the student will be brought

to evolve in a rich environment bringing together at least the Toulouse Mathematics Institute (IMT) and the institute Clément Ader (ICA). In addition, it could be envisaged to collaborate with researchers / engineers from EDF R&D and ONERA (Paris) that the problem also interests. Finally, this thesis will directly benefit from the expertise of the current thesis of A. Rouwane [5] regarding mechanical modeling based on images and will allow a return to the experimental in a project future.

References

- [1] Liu, X., Réthoré, J., Baietto, M. C., Sainsot, P., and Lubrecht, A. A. An efficient strategy for large scale 3D simulation of heterogeneous materials to predict effective thermal conductivity. *Computational Materials Science*, 166 (2019). 265-275.
- [2] Lian, W.-D., Legrain, G. and Cartraud, P. Image-based computational homogenization and localization: comparison between X-FEM/levelset and voxel-based approaches. *Computational Mechanics*, 51 (2013) 279-293.
- [3] Verhoosel, C.-V., van Zwieten, G.-J., van Rietbergen, B., and de Borst, R. Image-based goal-oriented adaptive isogeometric analysis with application to the micro-mechanical modeling of trabecular bone. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 284 (2015) 138-164.
- [4] Rouwane, A. Propriétés mécaniques à partir de corrélation d'images volumiques éléments finis. PhD thesis, *Université de Toulouse*. (2018-2021)
- [5] Naylor, R. Prédiction des premiers endommagements des composites tissés par modélisation à l'échelle microscopique et validation multi-échelle. PhD thesis, *Université Paris-Saclay*. (2016-2019)
- [6] Chelaghma, S. Functionalization of Carbon/PEKK composites for aerospace applications: characterization, modeling and influence on the composite properties. PhD thesis. *Université de Toulouse*. (2015-2018)
- [7] L.A. Gomes Perini, J.-C. Passieux and J.-N. Périé. A multigrid PGD-based algorithm for volumetric displacement fields measurements. *Strain*, 50(4) (2014) 355-367.
- [8] J. Neggers, O. Allix, F. Hild, and S. Roux. Big data in experimental mechanics and model order reduction: today's challenges and tomorrow's opportunities. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 25 (2018) 143-164.
- [9] Badia, S. and Verdugo, F. Robust and scalable domain decomposition solvers for unfitted finite element methods. *J. Comp. Appl. Math*, 344 (2018) 740-759.
- [10] Jomo, J., de Prenter, F., Elhaddad, M. et al. Robust and parallel scalable iterative solutions for large-scale finite cell analyses. *Finite Elements in Analysis & Design*, 163 (2019) 14-30.
- [11] Duval, M., Passieux, J. C., Salati, M., and Guinard. S., Non-intrusive Coupling: Recent Advances and Scalable Nonlinear Domain Decomposition, *Archives of Computational Methods in Engineering*, 1 (2016) 17-38
- [12] Bouclier, R. and Passieux, J.-C. A Nitsche-based non-intrusive coupling strategy for global/local isogeometric structural analysis. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 340 (2018) 253-277.
- [13] Oumaziz, P., Gosselet, P., Boucard, P. A., and Guinard, S. A parallel non-invasive mixed domain decomposition - Implementation and applications to mechanical assemblies, *Finite Elements in Analysis & Design*, 156 (2019) 24-33
- [14] Bovet, C., Parret-Fréaud, A., Spillane, N. and Gosselet, P. Adaptive multipreconditioned FETI: Scalability results and robustness assessment, *Computers & Structures*, 193 (2017) 1-20