Optimisation de structures par homogénéisation pour des fonctions-coût générales. Application à l'optimisation de mécanismes

Grégoire ALLAIRE[1], **François JOUVE**[2]

[1] Centre de Mathématiques Appliquées (UMR 7641), École Polytechnique 91128 Palaiseau
Gregoire.Allaire@polytechnique.fr, Francois.Jouve@polytechnique.fr

Résumé

La conception optimale de mécanismes, destinés par exemple à la fabrication de micro-mécanismes peut-être envisagée comme un problème d'optimisation de formes avec une fonction-coût particulière. Nous présentons ici une relaxation partielle du problème permettant le développement de méthodes numériques efficaces.

1 Introduction

L'utilisation de techniques d'homogénéisation en optimisation topologique de structures a permis l'émergence de nouvelles méthodes et la construction d'algorithmes performants (cf. par exemple [2][4][5][7]). Toutefois, les résultats théoriques demeurent restreints à l'optimisation de la compliance – pour un ou plusieurs chargements – ou des premières fréquences propres de la structure. Pour ces seuls cas, on connaît des microstructures particulières qui sont optimales et on peut même les caractériser de façon explicite dans le cas d'un chargement ou d'une seule fréquence propre. Bien entendu, de nombreuses extensions, purement numériques, sont apparues. Elle reposent souvent sur l'utilisation de matériaux fictifs (par exemple les matériaux dits "à loi de puissance" [14]) ou de composites sous-optimaux (obtenus, par exemple, par homogénéisation périodique d'une cellule perforée). L'utilisation d'une sous-classe particulière de composites mène à une relaxation partielle du problème. Cette sous-classe doit être assez riche pour pouvoir espérer approcher aussi bien que possible les composites optimaux, et ainsi entraîner de bonnes propriétés de stabilité et de convergence pour les algorithmes numériques ; elle doit également permettre une description assez simple et explicite de ses membres afin de préserver l'efficacité des méthodes numériques.

La classe des matériaux laminés séquentiel, de rang arbitraire, satisfait ces critères : leur description nécessite un petit nombre de paramètres, et leurs propriétés macroscopiques sont données par des formules explicites. De plus, ils sont optimaux pour les cas particuliers de la compliance et des fréquences propres ([2][4][5]). La relaxation partielle d'un problème d'optimisation de formes grâce à la classe des laminés séquentiels a été abordée dans [1]. Une méthode numérique de type "gradient projeté" a été introduite. Elle nécessite la résolution du problème adjoint et le calcul des gradients de la fonction-coût par rapport aux variables de forme, i.e. les paramètres décrivant les composites en chaque point du domaine. Nous proposons ici une approche similaire mais adaptée à la résolution de problèmes d'optimisation de mécanismes (cf. [15]). De telles structures sont utiles pour la conception de micro-mécanismes, sculptés dans la masse, pour lesquels il est difficile d'utiliser des jonctions classiques (rotules, articulations, ressorts...). Ils doivent uniquement tirer parti de leur forme pour s'acquitter de leur tâche.

2 Position du problème

On considère un domaine borné $\Omega \in \mathbb{R}^N$ $(N = 2, 3)$, rempli de deux matériaux élastiques linéaires caractérisés par leurs lois de Hooke A et B et les constantes de Lamé associées (λ_A, μ_A) et (λ_B, μ_B). On suppose que l'on a les relations suivantes entre les coefficients : $0 < \mu_B < \mu_A, \;\; 0 < \lambda_B + \frac{2\mu_B}{N} < \lambda_A + \frac{2\mu_A}{N}$. Dans le cadre de l'optimisation de formes et de mécanismes, le matériau B est destiné à "tendre" vers le vide (i.e. $(\lambda_B, \mu_B) \to (0, 0)$) afin d'obtenir des formes constituées d'une seule phase. Dans la suite, les deux phases sont considérées comme non-dégénérées. On trouvera une justification du passage à la limite dans le cas de l'optimisation de la compliance dans [4]. Remarquons que pour les calculs numériques, la phase "molle" n'est jamais totalement dégénérée pour simplifier l'implémentation.

Soit $\chi \in L^\infty(\Omega; \{0, 1\})$ la fonction caractéristique de la phase A. Nous pouvons définir une loi de Hooke sur tout le domaine Ω par $A_\chi = \chi A + (1 - \chi)B$. Le champ de déplacement u_χ de la structure est alors l'unique solution dans $H_0^1(\Omega)^N$ de

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(A_\chi e(u_\chi)) &= f \quad \text{dans } \Omega \\ u_\chi &= 0 \quad \text{sur } \partial\Omega, \end{cases}$$

où $e(u_\chi) = (\nabla u + \nabla^t u)/2$ désigne le tenseur des déformations et f est une force de volume donnée dans $L^2(\Omega)^N$. Pour des raisons de simplicité d'écriture nous présentons un problème avec des conditions de Dirichlet homogènes, mais des conditions aux limites et des chargements plus généraux sont envisageables. Considérons le problème d'optimisation de formes à deux phases suivant :

$$\inf_{\chi \in L^\infty(\Omega;\{0,1\})} J(\chi), \tag{1}$$

avec la fonction-coût J définie par

$$J(\chi) = \left(\int_\Omega \chi(x) C(x) |u(x) - u_0(x)|^\alpha dx \right)^{\frac{1}{\alpha}} + \ell \int_\Omega \chi(x) dx,$$

où ℓ désigne un multiplicateur de Lagrange associé à une contrainte de volume sur la phase A, $1 \leq \alpha < 2N/(N-2)$, $C \in L^\infty(\Omega)$ et $u_0 \in H^1(\Omega)^N$ données. Pour un chargement extérieur donné, cette fonction revient à chercher une structure ou mécanisme réalisant un certain déplacement donné u_0.

Il est connu que (1) est mal posé. Après relaxation on peut montrer qu'il existe des solutions généralisées de ce type de problème (cf. par exemple [11][13]) Ces formes généralisées sont définies par une distribution de matériau composite dans tout le domaine. Les matériaux composites admissibles sont obtenus en mélangeant au niveau microscopique les deux phases A et B. Ils sont caractérisés par la densité $\theta(x) \in [0,1]$ de matériau A et la microstructure qui représente l'arrangement microscopique entre les deux phases en chaque point $x \in \Omega$. Ces paramètres déterminent une loi de Hooke effective $A^*(x)$ en chaque point. Par la théorie de l'homogénéisation, la formulation relaxée de (1) s'écrit :

$$\min_{(\theta,A^*)\in\mathcal{CD}} J^*(\theta, A^*), \tag{2}$$

avec la fonction-coût généralisée

$$J^*(\theta, A^*) = \left(\int_\Omega \theta(x)C(x)|u(x)-u_0(x)|^\alpha dx\right)^{\frac{1}{\alpha}} + \ell\int_\Omega \theta\, dx, \tag{3}$$

où $u(x)$ est l'unique solution dans $H_0^1(\Omega)^N$ du problème homogénéisé

$$\left\{\begin{array}{rcll} -\operatorname{div}(A^*e(u)) & = & f & \text{dans } \Omega, \\ u & = & 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{array}\right. \tag{4}$$

et $\mathcal{CD}$ est l'ensemble des formes généralisées ou composites

$$\mathcal{CD} = \left\{\theta \in L^\infty(\Omega;[0,1]),\ A^*(x) \in G_{\theta(x)},\ \forall x \in \Omega\right\}, \tag{5}$$

où, pour chaque valeur donnée $\theta(x) \in [0,1]$, G_θ est l'ensemble de toutes les lois de Hooke homogénéisées obtenues en mélangeant les phases A et B en proportions θ et $(1-\theta)$.

Les avantages de la formulation relaxée (2) sont nombreux et ont été abondamment décrits par exemple dans [5][11][12][13]. Elle admet toujours une solution car toute structure composite peut être obtenue comme limite d'une suite de structures classiques. Cela signifie que la relaxation ne change pas la nature du problème mais le rend simplement bien posé. On peut également en déduire que des formes classiques quasi-optimales peuvent facilement être obtenues à partir d'une forme composite optimale en utilisant une procédure de pénalisation appropriée. De nombreux algorithmes numériques basés sur cette approche ont été proposés (cf. e.g. [4][5][6][7][9][10]).

Toutefois, la formulation relaxée (2) n'est en général pas utilisable telle quelle car l'ensemble G_θ de tous les matériaux composites est inconnu. Dans un petit nombre de cas particuliers, mais très importants du point de vue des applications, les conditions d'optimalité permettent de remplacer G_θ par un de ses sous-ensembles connu explicitement : l'ensemble des laminés séquentiels. C'est le cas lorsque la fonction-coût J et la fonction-coût relaxée J^* sont la compliance ou la première des fréquences propres de la structure, ou bien une somme pondérée de compliances associées à plusieurs chargements et des premières fréquences propres ([2][3]). Alors, (2) est utilisable et mène à une formulation explicite du problème relaxé. En revanche, dans tous les autres cas cette formulation relaxée ne peut servir pour les applications car nous ne savons pas décrire complètement G_θ. Par opposition avec ce qui va suivre, nous qualifierons la formulation relaxée (2) de “relaxation totale”.

3 Relaxation partielle

Afin d'obtenir une formulation exploitable, nous restreignons G_θ au sous-ensemble L_θ des laminé séquentiels (de tous ordres) obtenus par laminations de A et de B en proportions respectives θ et $(1-\theta)$. Pour un nombre q de laminations donné, des directions de lamination $(e_i)_{1\leq i\leq q}$ et des proportions de lamination pour chacune des directions $(m_i)_{1\leq i\leq q}$ vérifiant $m_i \geq 0$ et $\sum_{i=1}^{q} m_i = 1$, la loi de Hooke associée A^* d'un laminé séquentiel de matrice A et d'inclusion B s'écrit :

$$(1-\theta)\left(A-A^*\right)^{-1} = \left(A-B\right)^{-1} - \theta \sum_{i=1}^{q} m_i f_A(e_i), \tag{6}$$

avec $\forall e \in \mathbb{R}^N,\ |e| = 1,\ \forall\xi$ matrice symétrique

$$f_A(e)\xi : \xi = \frac{1}{\mu_A}\left(|\xi e|^2 - (\xi e\cdot e)^2\right) + \frac{1}{\lambda_A + 2\mu_A}(\xi e\cdot e)^2. \tag{7}$$

Nous introduisons l'ensemble $\mathcal{LD}$ des formes définies par une distribution de laminés séquentiels

$$\mathcal{LD} = \left\{\theta \in L^\infty\left(\Omega;[0,1]\right),\ A^*(x) \in L_{\theta(x)}\,\forall x\in\Omega\right\}. \tag{8}$$

La relaxation partielle s'écrit alors

$$\inf_{(\theta,A^*)\in\mathcal{LD}} J^*(\theta, A^*), \tag{9}$$

avec la fonction-coût J^* définie par (3). A priori, l'existence d'un minimiseur de la relaxation partielle (9) n'est pas assurée, alors qu'elle l'est pour la relaxation totale (2). Il semble donc que nous ayons gagné peu de choses en remplaçant un problème mal posé (1) par un autre problème mal posé (9). Pourtant, le pari qui est fait ici consiste à espérer que le nouveau problème est “moins” mal-posé que le problème initial car son intégrande a été lissée ou moyennée, entraînant de meilleures propriétés de convexité. Pour évaluer quantitativement de combien cette approche utilisant la relaxation partielle permet d'améliorer la qualité des solutions obtenues par rapport à la formulation initiale, il faudrait pouvoir mesurer l'écart entre les microstructures optimales et leur approximation dans L_θ. C'est pour le moment impossible dans le cas général, mais on peut se convaincre de la validité de la démarche en remarquant que dans le cas de l'optimisation de la compliance ou des premières fréquences propres, la relaxation partielle coïncide avec la relaxation totale.

Un avantage supplémentaire de l'utilisation de formes généralisées appartenant à $\mathcal{LD}$ plutôt qu'à $\mathcal{CD}$ tient au fait que les composites de L_θ sont décrits par un petit nombre de paramètres. On peut ainsi trouver des conditions d'optimalité qui reviennent au calcul des dérivées de la fonction-coût par rapport à ces paramètres, et développer des algorithmes numériques de type gradient.

Pour écrire une méthode numérique nous devons donc d'abord discrétiser en espace les variables de design $(\theta(x), A^*(x))$ ($\theta(x)$ désigne la proportion totale de matériau A au point x, et $A^*(x)$ est calculé en prenant en compte la microstructure sous-jacente). Si la résolution de (9) s'effectue par éléments finis, on choisira par exemple de prendre des variables de forme constantes sur chaque élément. Ensuite, pour une valeur de θ donnée, un composite $A^* \in L_\theta$ est décrit par la formule (6). De la même façon que l'espace est discrétisé, on discrétise les directions de lamination en fixant leur nombre q et les vecteurs $(e_j)_{1\leq j\leq q}$. Seules les proportions $(m_i)_{1\leq i\leq q}$ (chaque m_i est la proportion de matériau dans la direction e_i) varient en chaque point x dans l'ensemble convexe défini par les contraintes $m_i \geq 0$ et $\sum_{i=1}^q m_i = 1$. Désormais, on note $J^*(\theta, m)$ la fonction objectif avec $m = (m_i)_{1\leq i\leq q}$.

On peut alors calculer les dérivées partielles de J^* en introduisant un état adjoint p qui est la solution de

$$\left\{ \begin{array}{rcll} -\operatorname{div}(A^* e(p)) & = & c_\alpha \theta(x) C(x) |u(x) - u_0(x)|^{\alpha-2}(u(x) - u_0(x)) & \text{dans } \Omega \\ p & = & 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{array} \right. \tag{10}$$

où $c_\alpha = \left(\int_\Omega \theta(x) C(x) |u(x) - u_0(x)|^\alpha dx \right)^{\frac{1-\alpha}{\alpha}}$.
La fonction objectif $J^*(\theta, m)$ est différentiable, et si $\delta\theta(x)$ et $\delta m_i(x)$ sont des incréments admissibles, sa dérivée directionnelle est

$$\delta J^*(\theta, m) = \int_\Omega \nabla_\theta J^* \delta\theta \, dx + \sum_{i=1}^q \int_\Omega \nabla_{m_i} J^* \delta m_i \, dx, \tag{11}$$

avec les dérivées partielles

$$\begin{array}{rcl} \nabla_\theta J^*(x) & = & \dfrac{c_\alpha}{\alpha} C(x) |u(x) - u_0(x)|^\alpha + \ell + \dfrac{\partial A^*}{\partial \theta} e(u) : e(p), \\ \nabla_{m_i} J^*(x) & = & \dfrac{\partial A^*}{\partial m_i}(x) e(u) : e(p), \end{array}$$

et

$$\begin{array}{rcl} \dfrac{\partial A^*}{\partial \theta}(x) & = & T^{-1} \left((A - B)^{-1} - \displaystyle\sum_{i=1}^q m_i f_A(e_i) \right) T^{-1}, \\ \dfrac{\partial A^*}{\partial m_i}(x) & = & -\theta(1-\theta) T^{-1} f_A(e_i) T^{-1}, \\ T & = & (A - B)^{-1} - \theta \displaystyle\sum_{i=1}^q m_i f_A(e_i) \, . \end{array}$$

On a ainsi obtenu les bases pour construire une méthode numérique de type gradient projeté (pour satisfaire les contraintes sur θ et m_i) qui est décrite dans la section suivante. Par souci de simplicité, nous n'avons considéré que le cas d'un seul chargement mécanique. Bien sûr, il n'y a pas de difficulté à étendre notre analyse au cas de plusieurs chargements.

4 Algorithme numérique

Nous proposons un simple algorithme de gradient projeté à pas variable (mais non optimal) qui est suffisant pour nos applications. On peut envisager des algorithmes plus efficaces – mais plus longs à implémenter – comme le gradient conjugué.

1. Initialisation des paramètres de forme $\theta_0, m_{i,0}$ (par exemple, des constantes satisfaisant les contraintes).
2. Itérations jusqu'à convergence, pour $k \geq 0$:
   (a) Calcul de l'état u_k et de l'état adjoint p_k, solutions respectives (4) et (10), à l'aide des précédents paramètres de forme $\theta_k, m_{i,k}$.
   (b) Mise à jour des paramètres de forme :

$$\begin{array}{rcl} \theta_{k+1} & = & \max\left(0, \min\left(1, \theta_k - t_k \nabla_\theta J_k^*\right)\right), \\ m_{i,k+1} & = & \max\left(0, m_{i,k} - t_k \nabla_{m_i} J_k^* + \ell_k\right), \end{array}$$

où ℓ_k est un multiplicateur de Lagrange pour la contrainte $\sum_{i=1}^q m_{i,k} = 1$, ajusté itérativement, et $t_k > 0$ est un pas de descente tel que $J^*(\theta_{k+1}, m_{k+1}) < J^*(\theta_k, m_k)$.

Un pas de descente optimal t_k peut se calculer par un algorithme de type “line search”, mais le coût en temps de calcul est rédhibitoire car chaque évaluation requiert un calcul par éléments finis de l'état et de l'état adjoint. En pratique, on se contente d'une seule évaluation par itération si $J_{k+1}^* \leq J_k^*$: on augmente alors le pas t_k d'un facteur 1.2 pour les itérations suivantes ; sinon on recommence en divisant t_k par 2. Le gradient $\nabla_\theta J_k^*$ est projeté de façon convenable de sorte que le poids total $\int_\Omega \theta(x)dx$ soit conservé au cours des itérations. Remarquons que l'essentiel du coût de calcul sert au calcul des solutions des problèmes d'élasticité linéaire successifs. Si la résolution des systèmes linéaires s'effectue grâce à une méthode directe de type factorisation de Crout, le surcoût engendré par le calcul de l'état adjoint est très faible : il suffit de calculer un nouveau second membre, en utilisant la solution du problème direct, et de résoudre le système linéaire avec ce nouveau second membre, la matrice de rigidité (déjà factorisée) étant inchangée.

Pour les calculs 2-D un bon compromis entre précision et temps de calcul pour le nombre de directions de laminations est $q = 12$. On pourrait prendre moins de directions, quitte à introduire une rotation globale de la microstructure (afin de suivre au mieux l'orientation du champ de contraintes). Cette approche a été explorée dans [1] mais elle induit des problèmes de stabilité (une trop forte rotation permute les rôles des paramètres m_i et freine la convergence).

Comme on s'en doute, les résultats numériques de cette méthode de relaxation partielle sont souvent de type composite, c'est-à-dire que de larges régions de la structure optimale possèdent des densités de matériau intermédiaires entre 0 et 1. D'un point de vue pratique, c'est un inconvénient si on cherche des formes classiques (i.e. de vraies formes, non relaxées), mais du point de vue théorique c'est bon signe car cela veut dire que la relaxation partielle proposée est efficace et proche de la relaxation totale. Pour retrouver des formes classiques, on applique un procédé de pénalisation (assez usuel désormais, voir à ce sujet [4][6][14]) qui force la densité θ vers les valeurs extrêmes 0 (vide) ou 1 (matériau pur). Après convergence vers une solution composite optimale, on effectue encore quelques itérations de l'algorithme ci-dessus en remplaçant la formule (6) qui donne le tenseur homogénéisé A^* par une formule pénalisée

$$(1 - \theta^n)\,(A - A^*)^{-1} \;=\; (A - B)^{-1} - \theta^n \sum_{i=1}^{q} m_i f_A(e_i), \tag{12}$$

où typiquement $n \in [3, 5]$. Le matériau "fictif" produit par (12) est plus "mou" que le vrai matériau laminé si $0 < \theta < 1$ car $\theta^n < \theta$. Par conséquent, il n'est pas avantageux d'utiliser un tel matériau dans la forme optimale. On se débarrasse ainsi des zones de densité intermédiaire au cours des itérations. La formule (12) est très efficace : les zones grises sont presque totalement absentes sur les figures des structures pénalisées ci-dessous.

4.1 Résultats numériques

Nous présentons deux exemples d'application. Le domaine de calcul est un carré avec des conditions d'encastrement sur les deux coins de gauche. La fonction $C(x)$ est définie comme indiqué sur la figure (1), $\alpha = 2$ et $u_0(x) = (-U, 0)$ avec $U > 0$ assez grand. En minimisant la fonction-coût (3) on maximise ainsi la composante horizontale du déplacement vers les x négatifs sur la petite zone où $C(x) = 1$. Une force est appliquée sur le côté opposé du domaine. Suivant la direction de cette force, on obtient un *inverseur d'effort* (qui provoque un déplacement opposé à la direction de la force), ou un *multiplicateur d'effort* (qui génère un déplacement amplifié dans la direction des efforts).

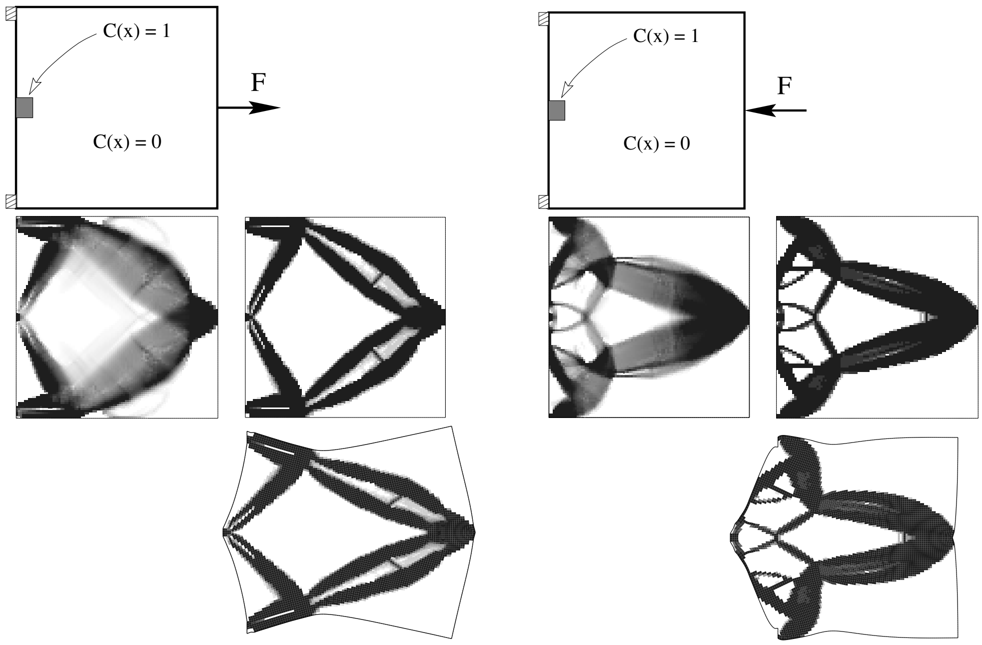

FIG. 1 – *Inverseur d'effort (à gauche) et multiplicateur d'effort (à droite). En haut : définition du problème ; au milieu : structures au repos (solution composite à gauche et pénalisée à droite) ; en bas : structure déformée.*

Références

[1] Allaire G., Aubry S., Jouve F. (2000) Shape optimization with general objective functions using partial relaxation, à paraître dans les actes du colloque NATO ARW "Topology optimization of structures and composite continua", Budapest, Mai 2000.

[2] Allaire G., Aubry S., Jouve F. (2000) Eigenfrequency optimization in optimal design, à paraître dans *Comp. Meth. App. Mech. Engrg.*

[3] Allaire G., Belhachmi Z., Jouve F. (1996) The homogenization method for topology and shape optimization. Single and multiple loads case, *Revue Européenne des Eléments Finis* **5**, 649-672.

[4] Allaire G., Bonnetier E., Francfort G., Jouve F. (1997) Shape optimization by the homogenization method, *Nümerische Mathematik* **76**, 27-68.

[5] Allaire G., Kohn R.V. (1993) Optimal design for minimum weight and compliance in plane stress using extremal microstructures, *Europ. J. Mech. A/Solids* **12**, 6, 839-878.

[6] Bendsoe M. (1995) *Methods for optimization of structural topology, shape and material,* Springer Verlag, New York.

[7] Bendsoe M., Kikuchi N. (1988) Generating Optimal Topologies in Structural Design Using a Homogenization Method, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* **71**, 197-224.

[8] Cherkaev A., Kohn R.V., Editors, *Topics in the mathematical modeling of composite materials,* Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications, 31, Birkhaüser, Boston (1997).

[9] Diaz A., Bendsoe M. (1992) Shape optimization of structures for multiple loading conditions using a homogenization method, *Struct. Optim.* **4**, 17-22.

[10] Diaz A., Kikuchi N. (1992) Solutions to shape and topology eigenvalue optimization problems using a homogenization method, *Int. J. Num. Meth. Engng.* **35**, 1487-1502.

[11] Kohn R.V., Strang G. (1986) Optimal Design and Relaxation of Variational Problems I-II-III, *Comm. Pure Appl. Math.* **39**, 113-137, 139-182, 353-377.

[12] Lurie K., Cherkaev A. (1986) Effective characteristics of composite materials and the optimal design of structural elements, *Uspekhi Mekhaniki* **9**, 3-81. English translation in [8].

[13] Murat F., Tartar L. (1985) Calcul des Variations et Homogénéisation, in D. Bergman et. al. (eds.), *Les Méthodes de l'Homogénéisation Théorie et Applications en Physique*, Coll. Dir. Etudes et Recherches EDF, **57**, Eyrolles, Paris, pp.319-369. English translation in [8].

[14] Rozvany G., Bendsoe M., Kirsch U. (1995) Layout optimization of structures, *Appl. Mech. Reviews* **48**, 41-118.

[15] Sigmund O. (1997) On the design of compliant mechanisms using topology optimization, *Mech. Struct. Mach.* **25**, 493-524.