

# THESE DE DOCTORAT DE

L'ÉCOLE CENTRALE DE NANTES  
COMUE UNIVERSITE BRETAGNE LOIRE

ECOLE DOCTORALE N° 602  
*Sciences pour l'Ingénieur*

Spécialité : « *Mécanique des Solides, des Matériaux, des structures et des surfaces* »

Par

« **Xiaodong LIU** »

« **A massively parallel matrix free finite element based multigrid method for simulations of heterogeneous materials using tomographic images** »

Unité de recherche : Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique (GeM)

## Rapporteurs avant soutenance :

Jean-Charles PASSIEUX  
Cornelis H. VENNER

Professeur des Universités  
Professeur

INSA Toulouse  
University of Twent

## Composition du Jury :

Examineurs : Luisa SILVA  
Katia MOCELLIN  
Antonius A. LUBRECHT  
Dir. de thèse : Julien RETHORE

Chargée de Recherche, HDR  
Professeur  
Professeur des Universités  
Directeur de Recherche CNRS

Centrale Nantes  
MINES ParisTech  
INSA Lyon  
Centrale Nantes

## Invité

Alain COMBESCURE

Professeur des Universités

---

**Titre : Une méthode multigrille massivement parallèle à base d'éléments finis sans matrice pour la simulation des matériaux hétérogènes à partir d'images de tomographie**

**Mots clés :** CT simulations, Multigrille, Calcul parallèle, Hétérogène, Homogénéisation

**Résumé :** Les simulations numériques à partir d'images de tomographie sont de plus en plus courantes depuis les vingt dernières années. Les simulations à l'échelle microscopique à partir d'images réelles de matériaux permettent aux chercheurs de connaître ses comportements thermiques et mécaniques, et d'améliorer leurs performances. Les difficultés de faire la simulation à partir d'images viennent de leur complexité et leur taille. La génération de maillages pour la microstructure complexe nécessite une intervention humaine pour l'utilisation de la méthode des éléments finis. Ces simulations à partir d'images de tomographie haute résolution demandent beaucoup de temps et de mémoire.

L'objectif de ce travail est de surmonter ces difficultés pour effectuer automatiquement des simulations numériques à partir d'images réelles des matériaux hétérogènes. Une méthode éléments finis sans matrice (MF-FEM) est utilisée pour diminuer les besoins en mémoire. Les méthodes de multigrille sont intégrées pour améliorer la convergence de la MF-FEM. Une technique efficace à la base d'homogénéisation est proposée pour traiter la mauvaise convergence de multigrille pour les problèmes avec grandes variations des propriétés des matériaux. Le calcul en parallèle hybride est aussi appliqué. Des simulations avec des milliards de degrés de liberté sont effectuées sur des problèmes thermiques et mécaniques.

---

**Title: A massively parallel matrix free finite element based MultiGrid method for simulations of heterogeneous materials using tomography images**

**Keywords:** CT simulations, MultiGrid, Parallel computing, Heterogeneous, Homogenization

**Abstract:** Numerical simulations using X-ray based Computed Tomography (CT) images became more and more common in the last two decades. CT images give researchers ample information about material microstructures. Performing numerical simulation at the microscopical scale permits researchers to understand the thermal and mechanical behavior of materials, and to improve material performance. The difficulties of performing simulations come from the complexity and the dimension of images. The meshing generation for the complex microstructure requires human intervention when using the finite element method. Simulations using large scale CT images are memory and time consuming.

The objective is to overcome these difficulties and to perform automatically numerical simulations directly from CT images. The matrix free finite element method (MF-FEM) is applied to diminish the memory requirements. A MultiGrid (MG) method is used to improve the convergence of the MF-FEM. An efficient homogenization method to compute the coarse grid operator of MG methods is proposed to insure the convergence of MG methods for problems with large material property variations. Massively parallel computing is applied to deal with time consumption problem. Numerical simulations directly from CT images with billions of degrees of freedom are finally performed on the thermal and mechanical problems.