



Vers des stratégies de calcul performantes pour les problèmes multiphysiques et le passage par le multiéchelle

David Dureisseix

► To cite this version:

David Dureisseix. Vers des stratégies de calcul performantes pour les problèmes multiphysiques et le passage par le multiéchelle. Mécanique [physics.med-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2001. tel-00083731

HAL Id: tel-00083731

<https://theses.hal.science/tel-00083731>

Submitted on 3 Jul 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**MÉMOIRE D'HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES
DE L'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE (PARIS 6)**

**Vers des stratégies de calcul performantes
pour les problèmes multiphysiques
et le passage par le multiéchelle**

par

David DUREISSEIX

Table des matières

Introduction	2
1^{re} partie : méthodes multiéchelles de décomposition de domaine	6
1 Décomposition de domaine et extensibilité	6
Le problème d'interface et l'extensibilité	7
Méthode mixte LATIN multiéchelle et hiérarchique . .	9
<i>Preprint</i> concernant l'approche hiérarchique	11
D'autres utilisations d'une échelle macro	19
Bilan.	20
2 Une démarche d'homogénéisation	21
Séparation des échelles : la structure et la cellule.	22
Description micro-macro.	23
<i>Preprint</i> concernant l'approche micro-macro	25
Principaux résultats obtenus, et perspectives.	44
Reconstruction de champs intérieurs macroscopiques.	46
Quelques autres démarches de la littérature.	48
Quelques questions en suspend sur ce thème.	49
3 Exemple de non-linéarité d'interface : le cas du contact	49
Cas de l'approche mixte micro-macro	50
Cas de l'approche duale.	51
<i>Preprint</i> concernant l'approche FETI-C	52
Bilan et perspectives.	77
2^e partie : vers le multiphysique	78
4 Couplage vitesse-pression avec la méthode FETI	78
Formulation mixte couplée.	79
Résultats obtenus.	80
Perspectives.	80
5 Stratégie de calcul multiphysique avec la méthode LATIN	81
Principes.	82
Choix des directions de recherche.	82
Représentation des inconnues.	84
<i>Preprint</i> concernant l'approche multiphysique	85
Principaux résultats et perspectives.	105
Conclusion	107

Introduction

En *calcul de structures*, la simulation de la réponse de structures complexes, et dans une encore plus grande mesure, l'optimisation vis à vis de paramètres de plus en plus nombreux dans l'optique de la conception, conduisent à des problèmes de grande taille. Plus récemment, l'émergence des modélisations multiphysiques des systèmes ou des composants requiert des capacités de traitement d'autant plus grandes. Dans ces approches, plusieurs phénomènes de natures physiques différentes sont couplés (thermique, piézoélectricité, fluide-structure, magnétisme, diffusion et changement de phase, chimie ...).

La première conséquence, encore amplifiée par la souplesse de mise en œuvre des techniques de discréttisation comme la méthode des éléments finis, est l'accroissement rapide de la taille des problèmes à résoudre. L'utilisation du *parallelisme* est donc un outil important pour pouvoir aborder la simulation de ces modèles.

La deuxième conséquence concerne quant à elle le caractère *multiéchelle* marqué, à la fois en temps et en espace, du problème couplé. Les différentes échelles de temps des phénomènes physiques qui interagissent, la présence d'hétérogénéités et de brutaux changements de nature du domaine (fluide, structure, magnétique, amagnétique ...) en sont les principales causes. Il est alors nécessaire qu'une stratégie de résolution de tels problèmes s'appuie sur ces propriétés particulières, et en tire parti, pour pouvoir être performante.

Enfin, la fiabilité et la *robustesse* d'une telle approche demande un certain nombre d'outils comme le contrôle des paramètres de l'algorithme et de la précision de la solution qu'il construit. À ce niveau, le contrôle de la qualité et l'adaptivité (des paramètres du calcul, de la discréttisation et de l'approximation de la solution) sont des thèmes de premier plan.

La *mise en œuvre* informatique et numérique d'une telle démarche n'est pas non plus un objectif trivial à maîtriser, que ce soit au niveau des outils utilisés (code existants, couplage de codes ...) ou à celui de la discréttisation spatiale et temporelle du modèle.

Ces thèmes ne sont bien sûr pas tous traités dans ce mémoire, et encore moins résolus, mais ils constituent bien les lignes directrices qui doivent manifestement être explorées. Ce mémoire reprend ainsi les grands traits des travaux réalisés, un bref état de l'art dans le même domaine d'expertise—certes pas exhaustif—pour les replacer dans leur contexte, et bien entendu tente de dégager les perspectives et lignes directrices pour de futurs travaux.

Les architectures des calculateurs évoluent. Les plus puissants actuellement (rapidité, taille mémoire ...) sont tous à architecture parallèle [Meuer *et al.* 01, Noor 97]. Les algorithmes de résolution et les formulations adaptées des problèmes concernés évoluent aussi, en particulier pour pouvoir s'adapter à ce type d'ordinateur.

Plusieurs techniques sont disponibles : tout d'abord, la parallélisation plus ou moins automatique des codes de calcul (parallélisme “informatique”) par les capacités d’analyse des compilateurs ; ensuite, le développement d’outils algorithmiques assez généralistes (parallélisme “numérique”) comme, par exemple, la factorisation en parallèle de grands systèmes linéaires creux ; enfin, le développement de formulations et d’algorithmes adaptés au problème à traiter (parallélisme “mécanique”), comme les méthodes de décomposition de domaine, le pendant de ces méthodes pour les problèmes couplés étant les méthodes de partitionnement.

Ces techniques, dans l’ordre de la plus généraliste à la plus dédiée, permettent d’atteindre de plus ou moins grandes performances suivant le nombre de processeurs utilisés. Il est normal d’attendre plus de performances d’un algorithme lorsqu’il utilise plus d’information sur le problème à traiter ; les méthodes de décomposition de domaine sont effectivement apparues comme bien adaptées aux architectures parallèles et permettent d’utiliser efficacement un assez grand nombre de processeurs (d’un ordre de plus de 10 fois supérieur à celui de la première technique mentionnée). Cependant, dans une simulation, plusieurs types de problèmes sont requis (de grands systèmes linéaires, de petits systèmes différentiels, des calculs locaux ...) et les différentes techniques précédentes de parallélisation peuvent être sélectionnées suivant leur domaine d’emploi de prédilection. Une discussion plus détaillé pourra être trouvée dans un article de synthèse de l’état de l’art [Dureisseix et Champaney 00].

Un outil ou une méthode ? Concernant les problèmes de développement et d’évolution des grands codes de calcul, les techniques qui ne nécessitent pas de remise en cause de l’architecture du code sont *a priori* les plus aisées à intégrer. C’est donc une importante motivation pour le développement des méthodes généralistes : la parallélisation automatique par le compilateur ne nécessite dans l’idéal que peu de modification du code et de la structure de données. En pratique, il est souvent nécessaire d’intervenir pour obtenir des performances intéressantes. La parallélisation “numérique” s’appuie sur la possibilité d’emploi en boîte noire, comme l’appel d’une routine de factorisation au travers d’une librairie parallèle. Les méthodes de décomposition de domaine adoptent encore un autre point de vue : elles nécessitent souvent une réécriture de l’algorithmique mais utilisent les routines de haut niveau habituelles du code existant, comme une boîte à outils. Cette réécriture de l’algorithmique est aussi utilisée pour augmenter les performances, en s’adaptant au problème traité (un exemple simple : la réutilisation des directions de descente au pas précédent pour accélérer le pas suivant en non-linéaire).

Dans tous les cas de figure, la modularité d’écriture du code et sa flexibilité sont des atouts pour son évolution, d’autant plus qu’aujourd’hui, la “durée de vie” des ordinateurs est plus courte que celle des grands codes généralistes. La réponse à cet enjeu se trouve en partie dans la standardisation des outils et des librairies (OpenMP, multi-threads, MPI, ScaLAPACK ...).

Les points abordés dans ce mémoire. Les premiers travaux réalisés concernent dans un premier temps l'aspect multiéchelle en espace. Il est discuté tout d'abord d'un point de vue assez numérique dans une méthode de décomposition de domaine mixte, basée sur la méthode LATIN, et développée pendant mes travaux de thèse. La voie adoptée a reposé sur une description hiérarchique des quantités mises en jeu [Dureisseix et Ladevèze 98b]. Cette approche s'est avérée efficace, au moins lors de l'analyse de structures faiblement hétérogènes, puisque dans ce cadre, la comparaison avec la méthode de décomposition de domaine duale FETI a révélé des performances similaires. L'état d'esprit consistait à montrer les performances des méthodes dans leur domaine d'application, à savoir les problèmes à grand nombre de degrés de liberté. Ceci n'est pas sans conséquence pour l'implantation de ces méthodes puisqu'il a été nécessaire de développer au sein d'un code de calcul de type industriel [Champaney *et al.* 97]. Dans l'approche alors utilisée, la présence de deux échelles n'est pas matérielle mais numérique : elle provient, lors de la décomposition en sous-structures, de la différence de taille caractéristique des sous-structures d'une part, et de la taille de la structure d'autre part [Dureisseix et Ladevèze 98a].

Le cas des structures fortement hétérogènes, comme les structures composites, pose des problèmes supplémentaires. L'évolution de la méthode multiéchelle hiérarchique vers une démarche d'homogénéisation des structures a conduit à une méthode désignée sous le terme de micro-macro. Elle a permis de synthétiser les concepts de représentation à deux échelles au travers des interfaces entre sous-structures, de façon hiérarchique comme cas particulier, mais surtout aussi avant toute discréttisation, au niveau du milieu continu. Pouvant tout d'abord se décliner avec une version orientée par la cinématique [Ladevèze et Dureisseix 99], ou par les efforts [Ladevèze et Dureisseix 00], les deux point de vue peuvent être réunifiés en une unique démarche [Ladevèze *et al.* 01]. Classée comme une méthode d'homogénéisation, elle ne nécessite pas la séparation des échelles, ni une réanalyse locale couplée. Cette approche a servi de base au travail de thèse d'Olivier Loiseau, [Loiseau 01] co-encadré par Pierre Ladevèze et moi-même. Les premiers résultats permettent d'attendre de bonnes performances de cette approche ; le point clé consistant à tirer parti des caractéristiques du problème, ici la description à l'échelle micro.

Parallèlement à ces développements, le traitement de la non-linéarité de contact dans une approche multiéchelle a fait et continue de faire l'objet d'une collaboration avec Charbel Farhat, de l'Université du Colorado à Boulder, USA. Ces travaux ont été menés dans le cadre de la méthode FETI.

L'aspect multiéchelle en espace me semble être un point de passage important pour aborder les problèmes multiphysiques. C'est pour cela que les travaux de recherche s'orientent maintenant vers la construction et la mise en œuvre de stratégies de calcul adaptées. La deuxième partie du mémoire présente ainsi les travaux plus récents engagés sur le domaine des simulations multiphysiques faisant intervenir des champs couplés.

Avec une première application, assez faiblement multiphysique puisqu'il s'agit juste du traitement du couplage vitesse-pression en incompressible, étudiée dans le cadre d'un travail de DEA, on peut illustrer l'utilisation multiéchelle de la décomposition de domaine sur ce problème couplé.

Enfin, une méthode de résolution dédiée à des analyses multiphysiques a été dé-

veloppée sur le cas simple de la poroélasticité dans le cadre d'une collaboration avec Bernhard Schrefler de l'Université de Padoue, Italie. Avant même de prendre en compte les aspects multiéchelles, cette stratégie peut déjà se classer dans la famille des méthodes de partitionnement ; l'idée est de généraliser le concept d'interface géométrique entre sous-structures, à celui d'une interface entre physiques différentes. Avec le cadre utilisé, l'intégration de l'aspect multiéchelle en espace ne pose pas de problème particulier. Ce cadre sert aussi de support à la thèse de David Néron, co-encadrée par Pierre Ladevèze et moi-même, qui vient de débuter et qui se focalisera plus sur l'aspect multiéchelle en temps et sur sa prise en compte dans la stratégie de calcul. Le traitement des non-linéarités de comportement, qui interviennent rapidement dans la modélisation des problèmes multiphysiques, pourra être abordée dans le même cadre.

1^{re} partie : méthodes multiéchelles de décomposition de domaine

De manière générale, le domaine d'emploi en parallèle d'une technique peut être caractérisé par la *granularité* des tâches qui sont réalisées, c'est-à-dire le ratio entre le volume d'information et de calcul à traiter localement par un processeur, et le volume d'information à échanger entre les processeurs pour mener à bien la résolution. Dans le cas des méthodes de décomposition de domaine, la granularité élevée est bien adaptée pour la résolution des grands systèmes linéaires implicites.

1 Décomposition de domaine et extensibilité

Le fractionnement d'un domaine en sous-domaines ou sous-structures, suivant la terminologie employée, peut être réalisé à partir de ses caractéristiques physiques (partie solide, partie fluide comme on aura l'occasion d'y revenir pour le multiphysique), de ses caractéristiques géométriques (assemblage de différentes pièces), ou de façon artificielle (comme la décomposition automatique d'un maillage éléments finis). La réalisation de ce fractionnement peut avoir plusieurs finalités ; par exemple, le traitement dédié de chaque sous-système ou la parallélisation. Nous nous intéresserons ici à ce dernier objectif et plus précisément, à une décomposition de domaine sans recouvrement (méthode de Schur par opposition à la méthode de Schwarz [Chan et Goovaerts 92, Dryja et Widlund 95]).

L'idée générale de ces méthodes consiste à partitionner géométriquement la structure Ω en sous-domaines Ω^E . Ce faisant, on introduit, outre les champs de déplacement U^E et de contraintes σ^E par sous-domaine Ω^E , de nouvelles quantités relatives aux interfaces entre sous-domaines : un champ de déplacement au bord \underline{W}^E et un champ d'effort au bord \underline{F}^E définis pour chaque interface de chaque sous-domaine. Chaque sous-structure est une structure à part entière, interagissant avec son environnement (les interfaces), et chaque interface possède son comportement propre. Pour une interface parfaite entre deux sous-domaines Ω^E et $\Omega^{E'}$, on doit avoir les conditions de transmission $\underline{W}^E = \underline{W}^{E'}$ et $\underline{F}^E + \underline{F}^{E'} = 0$.

Les différentes méthodes de décomposition de domaine diffèrent d'abord dans la

façon de traiter ces conditions de raccord. Elles peuvent être classées suivant le type de traitement qu'elles utilisent pour les inconnues à l'interface :

- une méthode primale conserve un déplacement continu à la traversée des interfaces et cherche à annuler le déséquilibre en effort ;
- une méthode duale propose des efforts en équilibre sur l'interface et cherche à réduire le saut de déplacement ;
- une méthode mixte cherche à traiter de façon égalitaire efforts et déplacements aux interfaces.

Ces méthodes peuvent être des méthodes directes ou itératives. Lorsque la taille du problème croît, ces dernières sont actuellement les plus efficaces, tant en temps de calcul qu'en encombrement mémoire requis. Cependant, les approches les plus performantes sont obligatoirement *multiéchelles* : une propriété importante de ces méthodes est *l'extensibilité*, c'est-à-dire que lorsque la taille du problème croît, si on augmente en même temps le nombre de sous-domaines, le nombre d'itérations pour résoudre le problème n'augmente pas.

Le problème d'interface. Le problème de référence peut donc être réécrit comme la résolution d'un problème portant sur les quantités d'interfaces (effort et déplacement) au moins dans le cas linéaire. Le retour aux quantités intérieures (contraintes et déformations) peut ensuite se faire à partir des conditions de bord alors déterminées.

Les méthodes multifrontales [Duff 86] sont typiques d'une résolution directe (et en parallèle) de ce nouveau problème d'interface. La résolution directe a comme inconvénient de devoir construire explicitement ce problème (complément de Schur) qui, bien que portant sur un nombre d'inconnues plus restreint que le problème de référence, possède une bien plus grande connectivité (ce qui traduit une grande largeur de bande). Il peut en effet être vu comme un problème éléments finis assemblé à partir des superéléments que sont les différentes sous-structures (les méthodes multifrontales construisent explicitement ces superéléments). Il peut donc être très coûteux à résoudre, en particulier lorsque le nombre de sous-structures est grand. Notons qu'une amélioration possible consiste à utiliser une méthode multiniveau, en considérant un ensemble d'interfaces comme une sous-structure à part entière, les différents ensembles ayant alors eux-même des interfaces entre eux, voir [Escaig *et al.* 94, Lassignardie *et al.* 99] par exemple. Cette technique permet ainsi de pouvoir utiliser de façon efficace un plus grand nombre de processeurs. Ce dernier reste cependant encore assez limité.

Une technique itérative a l'avantage de ne nécessiter ni la construction explicite ni la résolution directe du problème d'interface. Comme beaucoup de techniques itératives, elle pourra par contre être moins robuste et elle nécessite un critère de convergence fiable pour arrêter les itérations. Un taux de convergence élevé, c'est-à-dire un relativement faible nombre d'itérations pour converger, sera intéressant du point de vue de la robustesse. Typiquement, une technique itérative pourra être plus performante qu'une méthode directe lorsque le nombre d'itérations nécessaires pour converger sera bien plus petit que le nombre de degrés de liberté aux interfaces. Pour les méthodes primales et duales, le gradient conjugué préconditionné est généralement utilisé comme solveur itératif ; pour la méthode *mixte* qui sert principalement de support dans ce mémoire, une technique plus apparentée, au moins dans le cas linéaire, à la méthode du

Lagrangien augmenté est utilisée [Fortin et Glowinski 82, Lions 90, Glowinski et Le Tallec 90] : il s'agit de la méthode à grand incrément de temps (LATIN pour Large Time INcrement) [Ladevèze 96]. Ses principes et son utilisation sont présentés dans [Cognard *et al.* 96, Champaney *et al.* 96] et ses performances ont été illustrées dans [Champaney *et al.* 97].

Extensibilité. Lors du fractionnement en sous-structures (et d'autant plus que leur nombre est important) on peut toujours introduire dans le problème différentes échelles. Même si le problème ne contient pas naturellement ces échelles (comme cela pourra être le cas pour les structures hétérogènes comme les composites, par exemple), un point de vue numérique pourra guider leur choix. La première échelle est ainsi liée à la taille de la structure, et la seconde, à la taille des sous-structures ou des interfaces. Lorsqu'aucune n'est prise en compte dans l'algorithme, on considérera l'approche utilisée comme monoéchelle. De façon générale dans ce cas, lors d'une itération de la méthode, l'information ne pourra être échangée qu'entre sous-structures voisines. Un nombre caractéristique lié à la convergence (donc au nombre d'itérations) sera le nombre de sous-structures dans une direction d'espace. Avec une telle interprétation, on conçoit que le nombre d'itérations sera croissant avec le nombre de sous-structures.

Prenons le cas d'une structure modèle homogène très simple, comme celle de la poutre bidimensionnelle de la figure 1. On peut remarquer que la taille des sous-

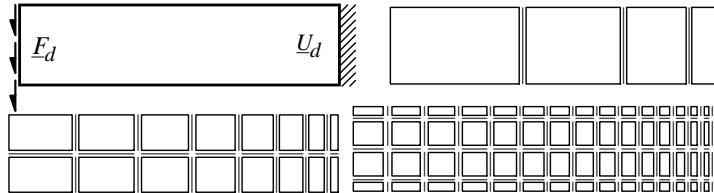


FIG. 1 – Problème modèle et sa décomposition en 4, 16 et 64 sous-structures et interfaces

domaines est variable, il en est de même pour la taille de maille des éléments finis le constituant (non représentés ici). On peut cependant noter par H une longueur caractéristique des sous-domaines, et par h une longueur caractéristique des éléments. Travailler à h constant revient à conserver un problème de référence de taille constante. Travailler à H constant revient à garder le même nombre de sous-domaines . Enfin, un dernier indicateur intéressant est $\frac{h}{H}$: travailler à $\frac{h}{H}$ constant conserve des problèmes locaux par sous-domaine de taille constante, la taille du problème de référence augmentant avec le nombre de sous-domaines. Une méthode de décomposition de domaine est dite *numériquement extensible* si, en travaillant à $\frac{h}{H}$ constant, le nombre d'itérations pour converger ne dépend que peu du nombre de sous-domaines (donc de H). On dit de plus qu'elle est *optimale* s'il y a peu de dépendance vis à vis de $\frac{h}{H}$. Elle sera ensuite *parallèlement extensible* si le temps de calcul est peu dépendant de H . La figure 2 reporte les taux de convergence relatifs (normé par le cas monoéchelle avec 4 sous-structures). De façon caractéristique pour les approches monoéchelles, on observe clairement une décroissance du taux de convergence avec le nombre de sous-structures.

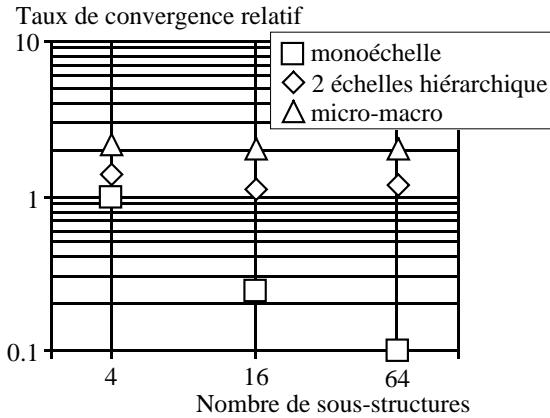


FIG. 2 – Taux de convergence moyens en fonction du nombre de sous-structures

Il est apparu assez clairement depuis les travaux de Bramble [Bramble *et al.* 86] que pour obtenir la propriété d’extensibilité, une méthode de décomposition de domaine doit impérativement être multiéchelle. L’approche la plus évidente consiste alors à utiliser les deux échelles précédemment citées. Ceci peut être réalisé de différentes manières. Par exemple, dans la méthode FETI (*Finite Element Tearing and Interconnecting*) [Farhat et Roux 91, Farhat *et al.* 00] et de façon similaire dans la méthode BDD (*Balancing Domain Decomposition*) [Mandel 93, Le Tallec 94], la grande échelle est représentée par les mouvements de solide rigide des sous-domaines “flottants” ; la petite échelle est décrite par le comportement éléments finis classique.

Travaux de thèse : méthode mixte LATIN multiéchelle et description hiérarchique.
La façon de procéder pour décrire les différentes échelles a reposé ici sur l’utilisation de deux discrétisations éléments finis différentes, sur le même problème de référence. Un premier maillage de la structure, dit “grossier”, définit la partie globale (à grande échelle) de la solution, et un maillage “fin” de chaque sous-structure, est celui sur lequel est défini le problème de référence.

Le transfert d’information entre les deux échelles est réalisé par deux opérateurs nommés, suivant la terminologie des méthodes multigrilles, opérateur de prolongation et opérateur de restriction. Le premier permet de transférer les informations de la grille grossière vers la grille fine (par exemple de façon hiérarchique au sens de la h -version), le deuxième permet le retour. Notons dès à présent qu’une telle description hiérarchique peut tout à fait être réalisée sur les quantités d’interface, voir figure 3, l’utilisation d’un maillage grossier à l’intérieur de chaque sous-structure n’étant qu’une façon simple de définir des quantités à grande échelle à l’intérieur.

De façon pratique, le cas où les deux discrétisations sont emboîtées simplifie l’implantation, mais dans tous les cas, la nécessité de gérer ces deux discrétisations est plus lourde pour l’utilisateur.

Ces travaux ont été réalisés en thèse sous la direction conjointe de Pierre Ladevèze et François-Xavier Roux [Dureisseix 97]. L’extrait suivant du *preprint* [Dureisseix et

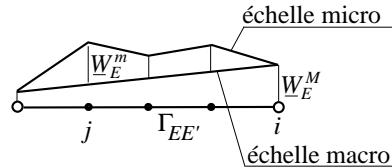


FIG. 3 – Description hiérarchique à deux échelles sur l’interface $\Gamma_{EE'}$

Ladevèze 98a] donne de plus amples détails sur cette approche.

Outre la distinction des quantités à grande et petite échelle via une description hiérarchique, un trait important de cette approche est qu’elle satisfait à *chaque itération* à la continuité des champs de déplacement à grande échelle et à l’équilibre au sens des éléments finis des efforts à grande échelle (équilibre des forces généralisées correspondantes du maillage à grande échelle). De façon plus secondaire, les travaux de thèse ont aussi porté sur l’utilisation d’une discréttisation plus adaptée des quantités d’interface et sur la formulation correspondante (ce qui conduit à des éléments d’interface discontinus). Pour de plus amples détails sur ce point, on pourra consulter [Dureisseix 97] ; il ne sera en effet pas abordé dans la suite.

Les principaux résultats obtenus sont les suivants : tout d’abord, l’utilisation d’une grande échelle globale sur toute la structure a permis d’augmenter le taux de convergence, et surtout, de recouvrir le caractère extensible (la figure 2 reporte aussi le taux de convergence comparé obtenu par l’approche multiéchelle). Pour ce qui concerne les performances de l’approche, elle a été comparée à la méthode FETI, qui fait actuellement référence dans le domaine des méthodes de décomposition de domaine adaptées au parallélisme, en calcul de structure. Pour pouvoir discuter les coûts, la méthode proposée a été implantée dans le code de calcul de type industriel Castem 2000 (actuellement Cast3M) [Verpeaux *et al.* 88]. Sur les problèmes homogènes testés, elle s’est bien comportée vis à vis de la méthode FETI, puisque les coûts de calcul se sont avérés similaires. Enfin, le paramètre de direction de recherche — paramètre “libre” de la méthode, c’est-à-dire non fixé *a priori* — est plus facilement estimable : il est lié à une dimension caractéristique de la petite échelle, et non plus de la structure, et devient quasi-indépendant du système de charge appliqué. Bien entendu, pour l’utilisateur, une technique de détermination automatique et à moindre coût de ce paramètre serait bienvenue.

A 2-LEVEL and MIXED DOMAIN DECOMPOSITION APPROACH for STRUCTURAL ANALYSIS

David Dureisseix and Pierre Ladevèze

1. Introduction

When using domain decomposition methods without overlapping, one can focus on displacements, such as primal approaches, [11] . . . , or on efforts, such as dual approaches, [6]. Since the LATIN approach used herein allows interfaces to play a major role, both displacements and efforts are the unknowns; it is a “mixed” approach. A general drawback with domain decomposition methods is the decrease in convergence as increases the number of substructures. Using a global mechanism to propagate information among all substructures can eliminate this drawback.

We are proposing herein to take into account the introduction of two scales when decomposing the structure into substructures and interfaces. As a first step, the implemented version is concerned with linear elasticity. The large scale problem is then used to build a global exchange of information and therefore to improve performance. Moreover, comparisons with other decomposition methods, and in particular with several variants of the FETI method, are proposed.

2. Formulation of the problem

The studied structure is seen as the assembly of two mechanical entities: sub-structures Ω^E , $E \in \mathbf{E}$, and interfaces $L^{EE'}$. Each possess its own variables and equations. The principles of this one-level approach have been described in [9], its feasibility has been shown in [10], and [2] proposes some significant examples.

Since we are dealing herein with linear elasticity, only the final configuration is of interest.

2.1. Substructure behaviour. Each substructure Ω^E is submitted to the action of its environment (neighbouring interfaces): an effort \underline{F}^E and a displacement field \underline{W}^E on its boundary $\partial\Omega^E$. Eventually, \underline{f}_d is a prescribed body force (Figure 1).

For each $E \in \mathbf{E}$, $(\underline{W}^E; \underline{F}^E)$ has to satisfy:

- kinematic equations:

$$(2.1) \quad \exists \underline{U}^E \in \mathcal{U}^E, \quad \underline{\epsilon}^E = \underline{\epsilon}(\underline{U}^E) \quad \text{and} \quad \underline{U}_{|\partial\Omega^E}^E = \underline{W}^E$$

1991 *Mathematics Subject Classification*. Primary 65N55, 73C35; Secondary 73V05, 65F10.

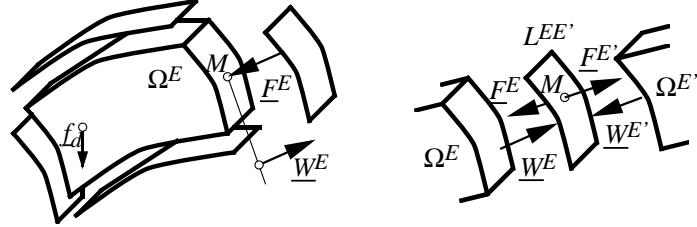


FIGURE 1. Substructure and interface

where \mathcal{U}^E is the set of displacement fields defined on Ω^E which possess a finite energy, and ϵ^E is the associated strain.

- equilibrium equations: a stress field σ^E balances f_d and F^E , i.e.:

$$(2.2) \quad \forall \underline{U}^* \in \mathcal{U}^E, \quad \int_{\Omega^E} \text{Tr}[\sigma^E \epsilon(\underline{U}^*)] d\Omega = \int_{\Omega^E} f_d \cdot \underline{U}^* d\Omega + \int_{\partial\Omega^E} \underline{F}^E \cdot \underline{U}^* dS$$

- constitutive relation: herein, the behaviour is linear and elastic (\mathbf{K} denotes Hooke's tensor) and

$$(2.3) \quad \sigma^E = \mathbf{K} \epsilon^E$$

\mathbf{s} denotes the set of unknowns $(W^E, F^E, U^E, \sigma^E)$ for $E \in \mathbf{E}$, that characterises the state of all substructures.

2.2. Interface behaviour. The state of the liaison between two substructures Ω^E and $\Omega^{E'}$ is defined by values on its surface of both the displacements and efforts $(W^E; F^E)$ and $(W^{E'}; F^{E'})$ (see Figure 1). For a perfect liaison, they must satisfy:

$$(2.4) \quad F^E + F^{E'} = 0 \quad \text{and} \quad W^E = W^{E'}$$

Of course, other kinds of liaison can be expressed, such as the prescribed effort liaison, the prescribed displacement liaison, and the unilateral contact liaison with or without friction, as described in [9], [2]. Here, we are only dealing with perfect interfaces that continuously transfer both efforts and displacements.

2.3. Description of the one-level algorithm. According to the framework of LArge Time INcrement (LATIN) methods, equations are split into two groups in order to separate difficulties, [10]:

- Γ is the set of unknowns \mathbf{s} satisfying each interface behaviour (2.4), and
- \mathbf{A}_d is the set satisfying each substructure behaviour (2.1), (2.2), (2.3).

The solution \mathbf{s}_{ex} searched is then the intersection of \mathbf{A}_d and Γ . A two-stage algorithm successively builds an element of \mathbf{A}_d and an element of Γ . Each stage involves a search direction; these are the parameters of the method:

- the local stage uses the search direction \mathbf{E}^+ : $(\hat{F} - \underline{F}) - k(\hat{W} - \underline{W}) = 0$

Finding $\hat{\mathbf{s}} \in \Gamma$ in such a way that $\hat{\mathbf{s}} - \mathbf{s}_n$ belongs to the search direction \mathbf{E}^+ is a local problem on the interfaces. For instance, with perfect interfaces, the solution is explicitly written: $\hat{W} = \hat{W}' = \frac{1}{2}[(W + W') - k^{-1}(F + F')]$ and $\hat{F} = -\hat{F}' = \frac{1}{2}[(F - F') - k(W - W')]$. It can easily be parallelised.

- the linear stage uses the search direction \mathbf{E}^- : $(F - \hat{F}) + k(W - \hat{W}) = 0$

Finding $\mathbf{s}_{n+1} \in \mathbf{A}_d$ in such a way that $\mathbf{s}_{n+1} - \hat{\mathbf{s}}$ belongs to \mathbf{E}^- is a global problem on each substructure. When using the search direction, (2.2) is an elasticity-like

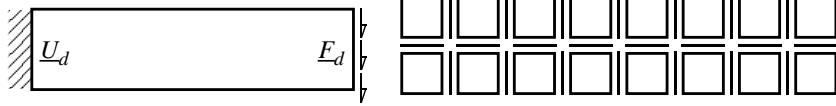


FIGURE 2. Model problem and example of decomposition into 16 substructures and interfaces

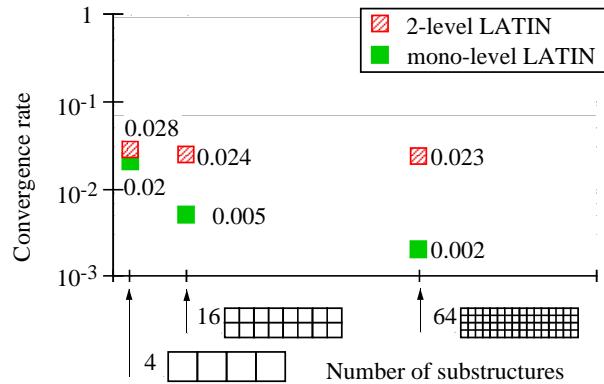


FIGURE 3. Convergence rate versus number of substructures

problem on each substructure, with Robin boundary conditions. It can be solved concurrently once the substructures have been distributed among the available processors, along with their neighbouring interfaces.

Finally, a convergence check can be built with $\|\hat{s} - s_n\|$. More details for this one-level approach can be found in [10]. In the case of linear elasticity, this algorithm is similar to the one proposed in [8], [12], [7], i.e. it is one version of Uzawa algorithm.

3. A 2-level extension

Let us first consider the model problem of a slendered bidimensional structure submitted to a parabolic bending loading (see Figure 2). The reference $(\underline{U}; \sigma)_{\text{ref}}$ here is the direct finite element solution without decomposition. It allows us to define the convergence rate in energy norm:

$$\tau = -\log \frac{e_{n+1}}{e_n} \quad \text{where} \quad e_n^2 = \frac{\frac{1}{2} \int_{\Omega} \text{Tr}[(\sigma_n - \sigma_{\text{ref}}) \mathbf{K}^{-1} (\sigma_n - \sigma_{\text{ref}})] d\Omega}{\frac{1}{2} \int_{\Omega} \text{Tr}[\sigma_{\text{ref}} \mathbf{K}^{-1} \sigma_{\text{ref}}] d\Omega}$$

Figure 3 presents the averaged convergence rate (up to convergence: $e_n \leq 0.1\%$) versus the number of substructures. It illustrates a well-known behaviour of domain decomposition methods: slowing the convergence rate when increasing the number of subdomains, [1]. To remedy such a drawback, we select herein to express the solution on two different scales:

$$(3.1) \quad (\underline{U}^E; \sigma^E) = (\underline{U}_1^E; \sigma_1^E) + (\underline{U}_2^E; \sigma_2^E)$$

1 and 2 denote unknowns related to large scale (effective quantities) and related to corrections on the fine scale respectively. The large scale problem is kept global in order to build the global information exchange mechanism, while the fine scale is managed with the previous substructuring technique.

Each level can arise from a different model for the structure; here, they are related to 2 different meshes with embedded elements. Let Ω_1 and Ω_2 denote these meshes. The principles of such a technique are described in [4]. As in the multigrid terminology, information transfer between levels is performed with a prolongation operator, \mathbf{P} , and a restriction operator, $\mathbf{R} = \mathbf{P}^T$. $(\underline{U}, \bar{\sigma})$ is the effective part of the solution, i.e. the part defined on the mesh Ω_1 (then, $\underline{U}_1^E = \mathbf{P}^E \underline{U}$ and $\bar{\sigma} = \sum_{E \in \mathbf{E}} \mathbf{R}^E \sigma_1^E$). With embedded grids, the prolongation is straightforward and performed with a classical hierarchical finite element projection, as hierarchical bases are used for splitting \mathcal{U}^E into \mathcal{U}_1 and \mathcal{U}_2^E . With such a splitting, the global equilibrium equations become:

$$(3.2) \quad \forall \underline{U}_1^* \in \mathcal{U}_1, \quad \forall \underline{U}_2^* \in \mathcal{U}_2^E, \quad \sum_{E \in \mathbf{E}} \int_{\Omega^E} \text{Tr}[\sigma(\epsilon(\underline{U}_1^*) + \epsilon(\underline{U}_2^*))] d\Omega = \\ = \sum_{E \in \mathbf{E}} \int_{\Omega^E} (f_d \cdot \underline{U}_1^* + f_d \cdot \underline{U}_2^*) d\Omega + \sum_{E \in \mathbf{E}} \int_{\partial\Omega^E} F_2^E \cdot \underline{U}_2^* dS$$

with $\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 = \mathbf{K}\epsilon(\underline{U}_1) + \mathbf{K}\epsilon(\underline{U}_2)$, and the search direction on fine scale $F_2^E = \hat{F}_2^E + k\hat{W}_2^E - k\underline{W}_2^E$, with $\underline{W}_2^E = \underline{U}_2^*|_{\partial\Omega^E}$, it leads to:

- on the fine scale 2, for each substructure Ω_2^E , the stress field σ_2^E also has to balance $-\sigma_1^E = -\mathbf{K}\epsilon(\underline{U}_1|_{\Omega^E}) = -\mathbf{K}\epsilon(\mathbf{P}^E \underline{U})$:

$$(3.3) \quad \forall \underline{U}_2^* \in \mathcal{U}_2^E, \quad \int_{\Omega^E} \text{Tr}[\epsilon(\underline{U}_2) \mathbf{K}\epsilon(\underline{U}_2^*)] d\Omega + \int_{\partial\Omega^E} \underline{U}_2 \cdot k\underline{U}_2^* dS = \\ = \int_{\Omega^E} f_d \cdot \underline{U}_2^* d\Omega + \int_{\partial\Omega^E} (\hat{F}_2^E + k\hat{W}_2^E) \cdot \underline{U}_2^* dS - \int_{\Omega^E} \text{Tr}[\epsilon(\underline{U}_1) \mathbf{K}\epsilon(\underline{U}_2^*)] d\Omega$$

The discretised displacement-oriented formulation of the problem (3.3) is:

$$(3.4) \quad ([K^E] + [k^E]) [U_2^E] = [f_d^E] + [\hat{f}^E] - [B_2 \sigma_1^E]$$

$[K^E]$ and $[k^E]$ denote rigidity matrices (constant along iterations), arising from material and search direction respectively, $[\hat{f}^E]$ is a load due to $\hat{F}_2^E + k\hat{W}_2^E$, and B_2 is the operator giving the generalised forces that balance a given stress field on mesh Ω_2^E . We can notice that the problem to solve is global on the substructure and is elasticity-like in nature.

- on the large scale 1,

$$(3.5) \quad \forall \underline{U}_1^* \in \mathcal{U}_1, \quad \int_{\Omega} \text{Tr}[\epsilon(\underline{U}_1) \mathbf{K}\epsilon(\underline{U}_1^*)] d\Omega = \int_{\Omega} f_d \cdot \underline{U}_1^* d\Omega - \sum_{E \in \mathbf{E}} \int_{\Omega^E} \text{Tr}[\epsilon(\underline{U}_2) \mathbf{K}\epsilon(\underline{U}_1^*)] d\Omega$$

with $\underline{U}_1^* = \mathbf{P}^E \underline{U}$, the last term is: $-\sum_{E \in \mathbf{E}} \int_{\Omega^E} \text{Tr}[\mathbf{R}^E \epsilon(\underline{U}_2) \mathbf{K}\epsilon(\underline{U}_1^*)] d\Omega$. As the stress field $\bar{\sigma}$ must balance $-\bar{\sigma}_2 = -\sum_{E \in \mathbf{E}} \mathbf{R}^E \mathbf{K}\epsilon(\underline{U}_2^E)$, the scales are not separated. The discretised displacement-oriented formulation of the problem (3.5), with $\bar{\sigma}_d$ arising

TABLE 1. 2-level algorithm

Large scale — 1 processor	Fine scale — n processors
Initialisation initialisation of $[B_1\bar{\sigma}_2] = 0$ receiving $[B_1\bar{\sigma}_d]_{ \Omega^E}$ assembling the contributions factorisation of $[K_1]$ forward-backward on (3.6) sending \bar{U}	Initialisation computing contributions $[B_1\bar{\sigma}_d]_{ \Omega^E}$ sending $[B_1\bar{\sigma}_d]_{ \Omega^E}$ initialisation of $\hat{s} = 0$ factorisation of $[K^E] + [k^E]$ → receiving \bar{U} computing coupling term $[B_2\sigma_1^E]$ forward-backward on (3.4)
Loop over iterations receiving $[B_1\bar{\sigma}_2]_{ \Omega^E}$ assembling the contributions forward-backward on (3.6) sending \bar{U}	Loop over iterations computing coupling term $[B_1\bar{\sigma}_2]_{ \Omega^E}$ sending $[B_1\bar{\sigma}_2]_{ \Omega^E}$ local stage , convergence check ↔ → receiving \bar{U} computing coupling term $[B_2\sigma_1^E]$ forward-backward on (3.4)

from external loads, is:

$$(3.6) \quad [K_1][\bar{U}] = [B_1\bar{\sigma}_d] - [B_1\bar{\sigma}_2]$$

The solution is searched successively from the two levels within each LATIN iteration on the substructured fine scale, in a fixed point method, as described in [4]. The linear stage is then performed on both scales, while local stage is still the same as for the one-level approach but only deals with fine scale quantities: $(\hat{W}_2^E; \hat{F}_2^E)$. Table 1 describes the algorithm. It has been implemented in the industrial-type code CASTEM 2000 developed at the CEA in Saclay, [13].

For the previous example, the convergence rate has been illustrated in Figure 3. The quasi-independence of the convergence rate with respect to the number of substructures shows the numerical scalability of the 2-level LATIN method. One can notice that for this example, the new optimum value for the search direction is now related to the interface length (L_0 has then been chosen as equal to 0.25 times the length of one substructure). It is no longer characterised by the behaviour of the whole structure [2], but becomes a substructuring characteristic, see [4].

4. Comparisons

Several domain decomposition algorithms currently use a global mechanism, like the FETI method, [6]. It produces at each iteration a solution that satisfies equilibrium through the interfaces, and that has to accommodate global equilibrium on each subdomain. This leads to the resolution of a global problem on all subdomains to find their rigid body movement, related to the large-scale problem.

The proposed example at this time is a tridimensional beam with a parabolic bending loading at one extremity. 32 substructures and a mesh with 20-node cubic elements are

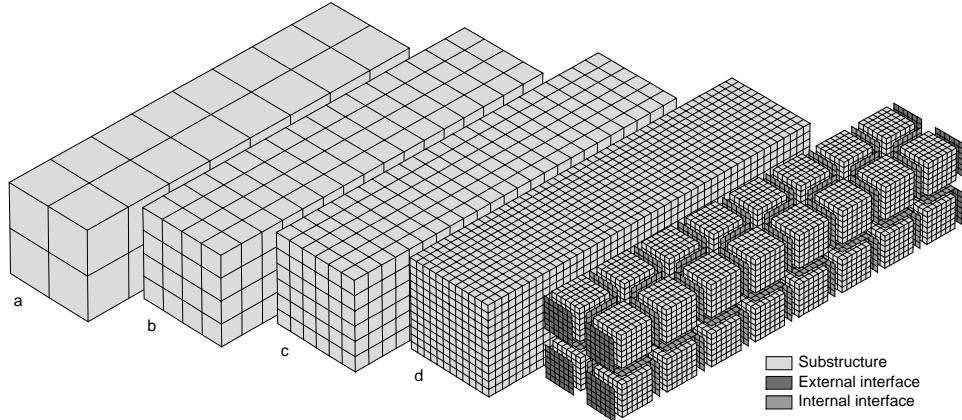


FIGURE 4. Meshes of the large-scale problem (a,b,c,d) and of the sub-structured problem (assembly of substructures and interfaces)

considered for this problem (one substructure has 3 675 d.o.f. and requires 12.8 Mb of storage for the factorised rigidity, while the direct problem has 95 043 d.o.f. and requires 1 252 Mb). For the large scale, the influence of the discretisation with 8-node cubic elements is studied, as also shown in Figure 4.

Figure 5 shows error e_n versus iterations, for the FETI method without preconditioning, then with lumped preconditioning, and finally with optimal Dirichlet preconditioning. These three computations have been performed by F.-X. Roux with the PARAGON machine at ONERA-Châtillon, France. The previous single-level LATIN algorithm as well as the 2-level extension for the different large-scale discretisations are also reported. These computations have been performed on the CRAY-T3D computer at IDRIS in Orsay. Both of these parallel computers have been used with 32 processors. Since time comparisons between two approaches depends on the processor, the intercommunication network, the compilers, disk usage, etc., we retain only the major tendencies by weighting the previous results; after analysing the costly parts of simulations, we identified CPU costs of initialisations for the FETI approach and the LATIN single-level to 1, in terms of CPU equivalent time (accumulated on the 32 processors). Afterwards, the FETI iteration and the 2-level LATIN iteration for the case (a) are identified in terms of cost. Figure 6 then shows the evolution of error versus this CPU equivalent time.

The cost for a direct finite element approach is 18 in terms of CPU equivalent time. When using the multi-frontal scheme, [3], [5], the condensed Schur complement problem has 19 875 d.o.f. and requires 329 Mb of storage. The costs are 3 for local condensations and forward-backward substitutions (which can be performed concurrently) and 2.6 for the resolution of the condensed problem (sequentially). Total cost of the analysis is then 5.6 in CPU equivalent time. The cost of a local condensation is higher than a simple factorisation due to the higher fill-in of the local rigidity matrix (in order to treat the boundary d.o.f. at the end).

One can initially note that when increasing the large-scale problem size of the 2-level LATIN algorithm, the error indicator starts out lower at the first iteration because the large-scale first solution is used to initiate the algorithm. Another effect is the increase in the convergence rate (Figure 5), but since iteration costs are also increasing, the two effects cancel each other for the proposed example, (Figure 6).

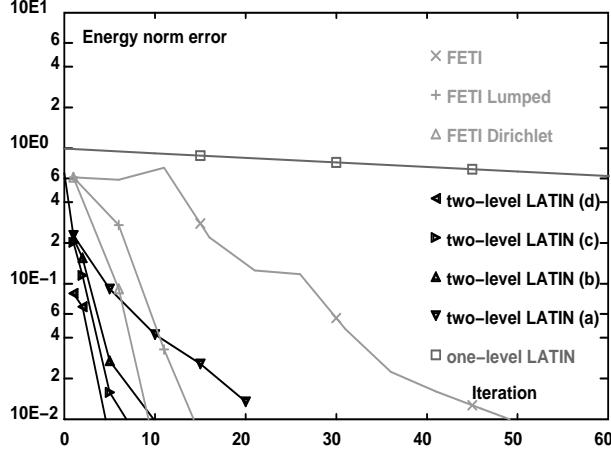


FIGURE 5. Comparison of methods – error versus iterations

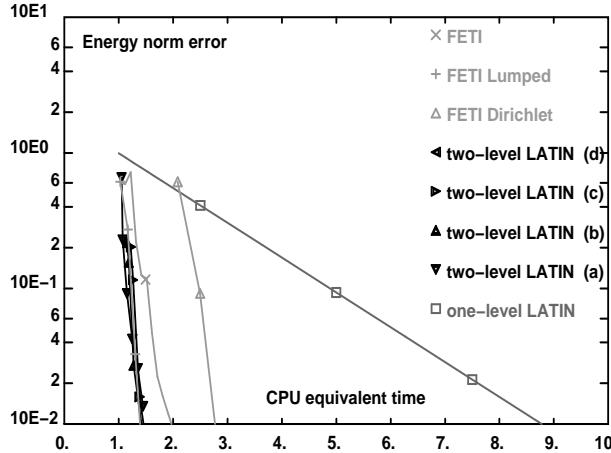


FIGURE 6. Comparison of costs

5. Conclusions

The originality in both the use of the large time increment method and a substructuring approach is the major role played by interfaces, which are considered as structures in their own right. This leads to a “pure parallel” algorithm that can be improved when using a 2-level scheme. The consequence is the generation of a global problem to solve on the whole structure at each iteration. The resulting algorithm is then numerically scalable.

The ultimate goal is the extension to non-linear structural analysis with a large number of d.o.f. One approach which is currently under development deals with a 2-level version more suited to homogenisation techniques, completely merged with non-incremental LATIN methods.

Acknowledgements. The authors wish to thank F.-X. Roux from ONERA-Châtillon, for having performed the computations with FETI approaches on the PARAGON, as well as IDRIS at Orsay, for accessing the CRAY-T3D.

References

1. J. H. Bramble, J. E. Pasciak, and A. H. Schatz, *The construction of preconditioners for elliptic problems by substructuring, I*, Math. Comp. **47** (1986), no. 175, 103–134.
2. L. Champaney, J.-Y. Cognard, D. Dureisseix, and P. Ladevèze, *Large scale applications on parallel computers of a mixed domain decomposition method*, Computational Mechanics (1997), no. 19, 253–263.
3. I. S. Duff, *Parallel implementation of multifrontal schemes*, Parallel Computing **3** (1986), 192–204.
4. D. Dureisseix and P. Ladevèze, *Parallel and multi-level strategies for structural analysis*, Proceedings of the Second European Conference on Numerical Methods in Engineering (J.-A. Désidéri, ed.), Wiley, September 1996, pp. 599–604.
5. Y. Escaig, G. Touzot, and M. Vayssade, *Parallelization of a multilevel domain decomposition method*, Computing Systems in Engineering **5** (1994), no. 3, 253–263.
6. C. Farhat and F.-X. Roux, *Implicit parallel processing in structural mechanics*, Computational Mechanics Advances (J. Tinsley Oden, ed.), vol. 2, North-Holland, June 1994.
7. R. Glowinski and P. Le Tallec, *Augmented lagrangian interpretation of the nonoverlapping Schwarz alternating method*, Third International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations (Philadelphia) (T. F. Chan, R. Glowinski, J. Périaux, and O. B. Widlund, eds.), SIAM, 1990, pp. 224–231.
8. J. Ladevèze, *Algorithmes adaptés aux calculs vectoriel et parallèle pour des méthodes de décomposition de domaines*, Actes du 3ème colloque Tendances Actuelles en Calcul de Structures (Bastia) (J. P. Grellier and G. M. Campel, eds.), Pluralis, November 1985, pp. 893–907.
9. P. Ladevèze, *Mécanique non-linéaire des structures — nouvelle approche et méthodes de calcul non incrémentales*, Hermès, Paris, 1996.
10. P. Ladevèze and Ph. Lorong, *A large time increment approach with domain decomposition technique for mechanical non linear problems*, Comput. Meths. Appl. Sc. Engng. (New York) (R. Glowinski, ed.), INRIA, Nova Science, 1992, pp. 569–578.
11. P. Le Tallec, *Domain decomposition methods in computational mechanics*, Computational Mechanics Advances, vol. 1, North-Holland, 1994.
12. P.-L. Lions, *On the Schwarz alternating method III: a variant for nonoverlapping subdomains*, Third International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations (Philadelphia) (T. F. Chan, R. Glowinski, J. Périaux, and O. B. Widlund, eds.), SIAM, 1990, pp. 202–223.
13. P. Verpeaux, T. Charras, and A. Millard, *CASTEM 2000 : une approche moderne du calcul des structures*, Calcul des Structures et Intelligence Artificielle (J.-M. Fouet, P. Ladevèze, and R. Ohayon, eds.), vol. 2, Pluralis, 1988, pp. 261–271.

LMT CACHAN (E.N.S. DE CACHAN / UNIVERSITÉ PARIS 6 / C.N.R.S.), 61 AVENUE DU PRÉSIDENT WILSON, F-94235 CACHAN CEDEX, FRANCE

E-mail address: dureisse@lmt.ens-cachan.fr

LMT CACHAN (E.N.S. DE CACHAN / UNIVERSITÉ PARIS 6 / C.N.R.S.), 61 AVENUE DU PRÉSIDENT WILSON, F-94235 CACHAN CEDEX, FRANCE

E-mail address: ladeveze@lmt.ens-cachan.fr

D'autres utilisations d'une grande échelle ou échelle macro. Comme cela a déjà été mentionné, la méthode FETI utilise les mouvements de solide rigide des sous-domaines flottants comme descripteurs de la grande échelle, et un recollement en moyenne de type moindre carrés pour formuler le problème global correspondant. Il s'agit donc bien d'une approche multiéchelle, bien que l'information contenue dans l'échelle macro soit en quelque sorte "minimale". Dans ce cas, l'échelle macro est présente automatiquement dans le problème, mais elle peut aussi, comme dans la démarche présentée précédemment, être introduite sur mesure. Notons aussi que la méthode FETI est une méthode de décomposition de domaine duale. En effet, la contrainte de raccord cinématique entre sous-domaines est dualisée au niveau discret par l'emploi de multiplicateurs de Lagrange. De façon brève, l'algorithme itératif est un gradient conjugué préconditionné opérant dans le sous-espace des multiplicateurs qui sont auto-équilibrés (au sens de la résultante et du moment) sur les sous-domaines flottants. À chaque itération, les efforts (multiplicateurs) sont en équilibre sur l'interface, et la partie de la solution à grande échelle est raccordée au sens de la moyenne aux interfaces sur les mouvements de solide rigide.

La méthode BDD peut être considérée à ce titre comme une version primale de la méthode FETI, les mouvements de corps rigide intervenant cette fois-ci lors de la phase de préconditionnement.

La méthode multiéchelle hiérarchique primale décrite dans [Tie *et al.* 99] utilise tout comme précédemment une description hiérarchique des deux échelles. Son implantation est par contre réalisée dans un véritable code éléments finis hiérarchiques. La différence réside dans l'algorithme itératif utilisé : un gradient conjugué portant sur les quantités primales (le saut de déplacement aux interfaces). Les propriétés, en cours d'itération, de la solution à grande échelle sont les mêmes que celles de la méthode mixte. Une comparaison des performances de ces deux méthodes serait donc bienvenue ; elle n'a cependant pas encore été finalisée à ce jour.

Toujours dans le but de brosser un bref état de l'art de la construction d'une grande échelle dans les techniques de décomposition de domaine, citons les travaux plus récents concernant une nouvelle version de la méthode FETI, à savoir FETI-DP (pour FETI Dual-Primal) [Farhat *et al.* 01]. Dans cette approche, l'échelle macro et le problème correspondant sont issus d'une contrainte cinématique particulière : les noeuds "coin" sont assujettis à satisfaire la continuité en déplacement à chaque itération. Sous cette contrainte, plus aucun sous-domaine ne demeure flottant. Le problème macro porte donc cette fois-ci sur le déplacement de certains noeuds particuliers. Comme la contrainte de continuité aux interfaces continue à être dualisée par multiplicateurs de Lagrange, cette approche peut continuer à être classée dans les méthodes duales. Le gain par rapport à la méthode FETI standard réside dans la moindre connexité du problème macro (qui n'est d'ailleurs plus résolu qu'une fois par itération au lieu de deux fois précédemment), dans une unification des différentes versions de FETI précédentes (FETI et FETI-2 notamment), et enfin dans l'absence de mouvements rigides qui peuvent parfois être délicats à extraire des rigidités (modes à énergie de déformation "presque" nulle ...).

Une dernière remarque sur cette approche : en analyse 3D massive, le problème macro semble ne plus suffire à rendre l'approche extensible. Un moyen d'y remédier consiste à *augmenter* l'algorithme, par exemple en forçant une contrainte cinématique

supplémentaire lors des itérations (et, bien sûr, satisfaite par la solution recherchée). La plus simple proposition concerne la continuité du déplacement moyen aux interfaces. On retrouve donc là des idées déjà présentées, comme la continuité de la partie hiérarchique à grande échelle au cours des itérations. Cette remarque tend à confirmer que le type d'approche présenté précédemment (hiérarchique), tout comme celui qui sera présenté dans la prochaine partie (micro-macro) sont pertinents. Pour eux, l'échelle macro contient, certes plus que les seuls modes rigides, mais aussi plus que les seuls déplacements des nœuds “coin”.

Enfin des travaux toujours en cours avec Nicolas Moës portent sur une vision particulière de la grande échelle et du problème correspondant. En considérant les sous-structures comme soumises sur leur bord à un couple de répartitions d'effort et de déplacement ($\underline{W}, \underline{E}$) liés entre eux par l'opérateur de Dirichlet-Neumann (dans le cas linéaire), on peut définir les charges macro sur le bord par un certain nombre de modes de Trefftz (les premiers, qui sont ceux de plus bas degré en variable d'espace). Cette approche étant trop dédiée au cas des sous-structures homogènes et isotropes, ces modes analytiques sont remplacés par des modes numériques (Trefftz généralisés) décrits sur la base éléments finis. Pour cela, une formulation simplifiée issue de la [Hochard *et al.* 97] est utilisée. Ce choix est justifié par le fait qu'il s'agit véritablement d'une formulation mixte portant à la fois sur les deux types de champ de bord. La petite échelle contient le reste de la base éléments finis qui sert à discréteriser le domaine. Les travaux concernant cette approche ne sont pas encore aboutis, et elle n'a pour l'instant donné lieu qu'à une communication [Moës et Dureisseix 99].

Bilan. Pour synthétiser un début de comparaison de ces différentes approches, elles sont regroupées dans la table 1 avec l'approche micro-macro qui fera l'objet de la prochaine partie.

De façon générale, les différentes méthodes et descriptions de la grande échelle présentées précédemment ont ceci en commun qu'elles travaillent en superposition sur les deux échelles, pour déterminer la solution. Elles utilisent toutes une sorte d'orthogonalité ou de complémentarité entre les échelles. Ainsi dans la méthode FETI, l'échelle fine est tronquée par le choix de l'inverse généralisée de la rigidité des sous-domaines flottants. Pour FETI-DP ainsi que les approches “hiérarchiques”, ceci est réalisé par le blocage des nœuds “macro” sur la petite échelle.

Pour relier en un mot les précédentes démarches multiéchelles aux techniques multigrilles, une remarque empruntée à Patrick Le Tallec est de mise : en pratique, dans les techniques multigrilles, le rapport des raffinements entre deux échelles peut aller jusqu'à un ordre de grandeur d'écart. Cela nécessite donc un passage par toute une série de grilles de plus en plus grossières jusqu'à obtenir un problème de taille suffisamment petite pour pouvoir décider de sa résolution de façon directe. Dans le cas des méthodes de décomposition de domaine multiéchelles, ce rapport $\frac{H}{h}$ peut être aisément de plusieurs ordres de grandeur.

Une démarche commune dans l'utilisation d'une échelle macro en décomposition de domaine est, soit l'utilisation d'une échelle imposée comme celle des mouvements de solide rigides, soit une construction *ad hoc* de la grande échelle. La démarche proposée dans la section suivante est clairement bâtie sur cette deuxième option. Elle per-

Approche	échelle macro	algorithme itératif	type de méthode
FETI	mouvements de solide rigide	GC	duale
mixte hiérarchique LATIN2	discrétisation hiérarchique	LATIN	mixte
primale hiérarchique	discrétisation hiérarchique	GC	primale
FETI-DP	cinématique macro particulière	GC	duale
SSA	premiers modes de Trefftz généralisés	LATIN	mixte
micro-macro	partie macro aux interfaces	LATIN	mixte
BDD	mouvements de solide rigide	GC	primale

TAB. 1 – *Caractéristiques de diverses approches multiéchelles en décomposition de domaine*

met de relier une échelle précédemment “numérique” à une échelle intrinsèque à une structure hétérogène. Dans ce contexte, elle est constituée bien entendu une démarche d’homogénéisation.

2 Une démarche d’homogénéisation

Comme on vient de le voir, la prise en compte des deux échelles introduites par la décomposition permet d’améliorer considérablement les algorithmes “monoéchelles” de décomposition de domaine. Le cas des structures hétérogènes comme les structures composites, posent une autre question. En effet une échelle interne à la structure existe ici avant même toute décomposition : c’est l’échelle des cellules (ou des VER, Volumes Élémentaires Représentatifs) constituant la structure.

À la suite des travaux de thèse, la reformulation plus générale du cadre de la méthode a permis d’aboutir à une nouvelle vision de la démarche d’homogénéisation. L’échelle macro effective est ici utilisée comme grande échelle, la petite échelle étant celle des cellules. Ces travaux sont à la base de la thèse d’Olivier Loiseau, co-encadrée par Pierre Ladevèze et moi-même [Loiseau 01].

Pour tracer les grands traits de cette approche, commençons par dire quelques mots de plusieurs méthodes classiques d’homogénéisation. Il ne s’agit bien entendu pas de faire un bilan exhaustif de ces méthodes. D’ailleurs, seules les méthodes utilisant un calcul de structure à l’échelle de la cellule nous intéresseront ici. La démarche de l’homogénéisation des milieux périodiques en est un exemple typique [Sanchez-Palencia 80].

Séparation des échelles : la structure et la cellule. Prenons ici comme référence, le problème décrit entièrement à l'échelle micro. Cette échelle de description peut être judicieuse dans plusieurs types de cas de figure, comme les structures fortement hétérogènes. Des illustrations d'exemples pratiques pourront être trouvés dans le document [Dureisseix 00].

La définition de l'échelle pertinente des phénomènes que l'on cherche à prendre en compte passe par le choix d'un volume élémentaire représentatif (VER) dans lequel on considère les quantités d'intérêt comme plus ou moins *homogènes*. La problématique est alors de pouvoir obtenir des quantités macro suffisamment représentatives des moyennes des quantités locales micro.

Avec des hypothèses classiques (notamment pouvoir considérer la solution macro comme quasi-constante par cellule), une méthode classique d'homogénéisation propose de ne traiter les calculs à l'échelle micro que localement sur chaque cellule (ou sur une seule cellule type). Les calculs sur l'ensemble de la structure ne portent alors que sur l'échelle macro. En ce sens, la solution fournie (solution macro puis relocalisation micro par cellule) est une *approximation* du problème de référence : le couplage entre les cellules se fait uniquement à l'échelle macro. Considérons en effet une cellule qu'on a isolé de l'ensemble de la structure. Pour ce faire, on a pratiqué des coupures sur ses interfaces, et ses interactions avec l'environnement sont représentées par des champs de déplacement \underline{W} et d'effort \underline{F} sur ces interfaces. Ces champs sont décrits comme superposition de quantités macro et micro : $\underline{W} = \underline{W}^M + \underline{W}^m$ et $\underline{F} = \underline{F}^M + \underline{F}^m$. Suivant l'approche utilisée, des hypothèses plus ou moins fortes sont faites sur ces quantités pour donner l'approximation voulue :

- une homogénéisation cinématique postule que $\underline{W}^m = 0$, ainsi le calcul à l'échelle micro se fait indépendamment cellule par cellule dès qu'on impose un déplacement macro à sa frontière \underline{W}^M , ce qui conduit à un problème de Dirichlet ;
- une homogénéisation statique postule que $\underline{F}^m = 0$, ainsi le calcul à l'échelle micro se fait indépendamment cellule par cellule dès qu'on impose un effort macro à sa frontière \underline{F}^M , ce qui conduit à un problème de Neumann ;
- une homogénéisation des milieux périodiques à l'ordre 1 postule que les champs micro sont périodiques pour le déplacement et antipériodiques pour les efforts, ainsi le calcul à l'échelle micro se fait indépendamment cellule par cellule avec des conditions de périodicité pour une approche en déplacement ;
- etc.

Ces approches sont mises en échec quand les hypothèses qui les sous-tendent ne sont plus valides. C'est souvent le cas quand la sollicitation extérieure est aussi à petite échelle (on peut alors prendre en compte le gradient, par exemple par une approche à l'ordre 2). C'est aussi le cas en présence d'effets de bord (ce qui peut nécessiter des réanalyses locales plus ou moins couplées) ou plus généralement, si la séparation des échelles est mal réalisée (rapport des dimensions caractéristiques des hétérogénéités et du volume élémentaire grand). Dans ces différents cas, on peut envisager de traiter la difficulté en recouvrant le couplage initialement négligé entre les différentes cellules. En interprétant les cellules comme des sous-structures, l'outil “décomposition de domaine” est typiquement adapté à cet effet.

L'utilisation d'un tel outil pour réaliser une homogénéisation automatique fait l'ob-

jet de la prochaine section.

Description micro-macro. Reprenons le principe d'une cellule (ou sous-structure) qui a été isolée à l'intérieur d'une structure en pratiquant des coupures le long de ses bords (les interfaces voisines). Les interactions de cette partie avec le reste de la structure sont représentées par des champs de déplacement et d'effort le long des coupures pratiquées. La partie macro de la solution peut tout à fait être définie sur ces interfaces. La partie micro sera alors la partie complémentaire. une façon simple de procéder consiste à prendre la partie linéaire de ces champs comme partie macro, voir figure 1. En 2D, donc sur une interface unidimensionnelle, la partie constante est constituée de 2 translations ; pour obtenir la partie linéaire, il faut ajouter la rotation et l'extension longitudinale. Cette terminologie est plus dédiée à un champ de déplacement, mais la même démarche est tout à fait possible pour un champ d'efforts. L'extension est immédiate en 3D.

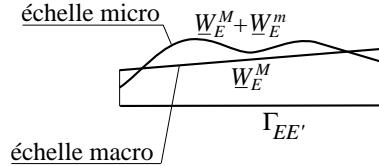


FIG. 1 – Description micro-macro à deux échelles sur l'interface $\Gamma_{EE'}$

Notons que cette description ne nécessite aucune discréétisation *a priori*, contrairement à l'approche hiérarchique. Cependant, la description macro est par essence discrète (4 paramètres par interface en 2D pour chaque champ, 10 en 3D). Travaillant de façon mixte avec les déplacements et les efforts, ces champs doivent respecter une certaine cohérence entre eux. Ils sont en effet mis en dualité par la forme linéaire “travail” (à relier à “l’orthogonalité” entre échelles précédemment remarquée) : la contribution de l’interface $\Gamma_{EE'}$ de la sous-structure E est

$$(\underline{F}_E, \underline{W}_E)_{\Gamma_{EE'}} \equiv \int_{\Gamma_{EE'}} \underline{F}_E \cdot \underline{W}_E dS = (\underline{F}_E^m, \underline{W}_E^m)_{\Gamma_{EE'}} + (\underline{F}_E^M, \underline{W}_E^M)_{\Gamma_{EE'}}$$

On peut ainsi envisager deux approches : soit on choisit le champ macro de déplacement et on en *déduit* la description du champ macro d'effort par dualité, soit on procède de façon inverse. Dans le premier cas, si on définit la partie macro du déplacement à l'aide d'un projecteur $\boldsymbol{\pi}_{\Gamma_{EE'}}$:

$$\underline{W}_E^M|_{\Gamma_{EE'}} = \boldsymbol{\pi}_{\Gamma_{EE'}} \underline{W}_E|_{\Gamma_{EE'}}$$

avec la description micro-macro précédente, on obtient un projecteur symétrique. Les efforts macro obtenues par dualité sont alors tels que

$$\underline{F}_E^M|_{\Gamma_{EE'}} = \boldsymbol{\pi}_{\Gamma_{EE'}}^T \underline{F}_E|_{\Gamma_{EE'}} = \boldsymbol{\pi}_{\Gamma_{EE'}} \underline{F}_E|_{\Gamma_{EE'}}$$

Le choix des espaces correspondants permet de bâtir l'approche multiéchelle *ad hoc* qui est décrite dans le prochain *preprint*.

Notons encore que la description hiérarchique de la grande échelle telle qu'elle a déjà été présentée est conforme à cette présentation, en choisissant un projecteur hiérarchique qui n'est par contre plus symétrique.

Le *preprint* suivant [Ladevèze et al. 01] décrit ces deux approches de façon plus détaillée.

A micro-macro and parallel computational strategy for highly-heterogeneous structures

P. Ladevèze*, O. Loiseau and D. Dureisseix

LMT-Cachan (ENS Cachan / CNRS / Université Paris VI)
61 Avenue Président Wilson, F-94 235 Cachan CEDEX, France

SUMMARY

A new micro-macro computational strategy is proposed for the analysis of structures which are described up to the micro level, such as composite structures. The description of micro and macro quantities is performed on the interface arising from the decomposition of the structure into an assembly of substructures and interfaces. A traction-based version of the micro-macro strategy is described and the influence of the numerical parameters as well as the performance of the approach are discussed. Copyright © 2001 John Wiley & Sons, Ltd.

KEY WORDS: homogenization; domain decomposition; multilevel; LATIN method

1. INTRODUCTION

When analyzing heterogeneous structures, such as reinforced or composite structures, and when a refined solution is required, the computation must involve a fine discretization of the structure (at the micro-level). Since the constituents often exhibit very different mechanical characteristics, the resulting structure is highly heterogeneous and the local solution displays high gradient areas, effects with a short length of variation, *etc.* This situation leads to problems with a large number of degrees of freedom. Computational strategies have been developed in order to the resolution costs for such problems low. The theory of periodic media homogenization [1] is one such strategy. Further developments for associated computational approaches can be found in [2, 3, 4]. The macro-level solution yields the effective values of the unknowns; the micro-level solution must be recomputed with a specific treatment of the boundary areas as distinct from the interior areas. Of course, the fundamental assumption in the use of this method lies in the fact that the ratio of the small-scale length to the large-scale length has to be small. Moreover, these techniques are not really suited to non-linear problems of evolution, in which they are applied to linear problems arising from successive linearizations related to the computational strategy.

The objective of the micro-macro approaches developed herein, following previous developments [5, 6], is to avoid several of the limitations in classical homogenization techniques and to accomodate the most powerful computing resources used today, *i.e.* parallel architecture computers. This iterative

*Correspondence to: LMT-Cachan, 61 Avenue Président Wilson, F-94 235 Cachan CEDEX, France

strategy has a strong mechanical basis; it is built upon characteristic properties which are satisfied by structural models described up to the micro-scale.

The first step is the decomposition of the structure into an assembly of simple constituents: substructures and interfaces. For instance, a substructure may contain one or several cells of a composite structure. Each of these components possesses its own variables and equations. An interface transfers both a distribution of displacements and a distribution of forces.

The novelty, with respect to our earliest work [7], is the splitting of the unknowns (displacements, forces, stress, strain) into the form:

$$s = s^M + s^m$$

where s^M is the set of the macroscopic quantities and s^m is the additive “micro” complement. Several descriptions are conceivable. Here, we consider descriptions related to a “continuum-medium” point of view, and we feature a general method for homogenization and local re-analysis. A first description, which is displacement-based, has been introduced in [5, 6]. We introduce here a new traction-based description.

The second step of this micro-macro strategy is the use of the so-called LATIN Method on the problem expressed as an assembly of substructures and interfaces to be solved. The LATIN Method is a non-incremental iterative computational strategy applied over the entire studied time interval [7]. The resultant micro-macro strategy displays convergence for stable materials under standard assumptions. In order to focus on the main concepts, this method will be described herein only for linear elasticity.

At each iteration, one has to solve a “macro” problem, defined on the entire structure, along with a family of linear problems, each one of which has independent substructure and interfaces. These are the “micro” problems, whereas the “macro” problem is related to the entire homogenized structure. For linear problems, this strategy involves numerical parameters that can be interpreted as interface stiffnesses. A study of the influence of these numerical parameters on both the displacement-based and traction-based micro-macro asymptotical strategies is reported. The conclusion is remarkable: the two approaches are identical for the best values of the numerical parameters. Moreover, only one numerical parameter remains, which can be interpreted as the micro stiffness of the interface. Several numerical examples for composite structures illustrate the possibilities of the present approach.

This overall scheme is well suited to parallel architecture computers. It can be considered as a mixed domain decomposition method. An initial version, adapted to slightly heterogeneous structures, has been reported in [8]. This version is *a priori* less efficient than the present micro-macro computational strategy, yet remains comparable to the FETI domain decomposition method [9], which today is the reference within the field of parallelism. This use of two scales or two grids pertains to other methods as well, such as multigrid methods, in which the basis is essentially numerical and quite distinct from the “homogenization” orientation of the field of mechanics.

2. THE REFERENCE PROBLEM AND ITS RE-FORMULATION

The reference problem is related to the quasi-static behavior of a structure, denoted by Ω , for small perturbations and isothermal evolution. The loadings are:

- a prescribed displacement \underline{U}_d on an initial part of the boundary $\partial_1\Omega$,
- a prescribed traction force \underline{F}_d on the complementary part of the boundary $\partial_2\Omega$,
- a prescribed body force \underline{f}_d on Ω .

For the sake of simplicity, only the case of linear elasticity will be discussed herein. Therefore, only the final configuration is of interest, and time is no longer taken into account. The non-linear case is discussed in [10].

The current state of the structure is given by the stress field σ and the displacement field \underline{U} at each point \underline{M} of Ω . σ is searched in the corresponding space \mathcal{S} , while \underline{U} is searched in \mathcal{U} . The problem to be solved then is to find $s = (\underline{U}, \sigma)$ in $\mathcal{U} \times \mathcal{S}$ which satisfies:

- kinematic admissibility equations:

$$\begin{aligned}\underline{U} &\in \mathcal{U} \\ \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{U}) , \quad \underline{U}|_{\partial_1 \Omega} &= \underline{U}_d\end{aligned}$$

where $\boldsymbol{\varepsilon}$ is the strain field.

- equilibrium equations:

$$\begin{aligned}\sigma &\in \mathcal{S} \\ \forall \underline{U}^* \in \mathcal{U}_0, \quad \int_{\Omega} \text{Tr}[\sigma \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{U}^*)] d\Omega &= \int_{\Omega} \underline{f}_d \cdot \underline{U}^* d\Omega + \int_{\partial_2 \Omega} \underline{F}_d \cdot \underline{U}^*|_{\partial_2 \Omega}\end{aligned}$$

where \mathcal{U}_0 is the set of kinematically-admissible displacement fields with null conditions on $\partial_1 \Omega$.

- the constitutive relation:

$$\sigma = \mathbf{K} \boldsymbol{\varepsilon}$$

where $\mathbf{K}(\underline{M})$ is the Hooke's tensor, characterizing the local material behavior.

The first step of the micro-macro strategy is the re-formulation of the problem in terms of a decomposition of the structure into an assembly of simple constituents: substructures and interfaces [7] (see Figure 1). Each of these components possesses its own variables and equations.

A substructure $\Omega_E, E \in \mathbf{E}$, is submitted to the action of its environment (its neighboring interfaces): a traction field \underline{F}_E and a displacement field \underline{W}_E on its boundary $\partial \Omega_E$.

An interface $\Gamma_{EE'}$ between substructures E and E' transfers both the displacement field and traction field on each side: $\underline{W}_E, \underline{W}_{E'}$ and $\underline{F}_E, \underline{F}_{E'}$. The corresponding spaces are then $\mathcal{W}_{EE'}$ and $\mathcal{F}_{EE'}$. Extended to all the interfaces, they become \mathcal{W} and \mathcal{F} . Since both the displacement and forces on the interfaces are the unknowns, the resulting approach is a "mixed" domain decomposition method, as opposed to the primal substructuring [11, 12] or dual approach [9].

The solution to the reference problem,

$$\mathbf{s} = \bigcup_{E \in \mathbf{E}} \mathbf{s}_E \quad \text{with} \quad \mathbf{s}_E = (\underline{U}_E, \underline{W}_E, \sigma_E, \underline{F}_E)$$

with the corresponding space being \mathbf{S} , must satisfy an initial set of equations, \mathbf{A}_d , in order to be admissible, *i.e.*:

- kinematic admissibility equations:

$$\begin{aligned}\underline{U}_E &\in \mathcal{U}_E \\ \boldsymbol{\varepsilon}_E = \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{U}_E) , \quad \underline{U}_E|_{\partial \Omega_E} &= \underline{W}_E\end{aligned}$$

- equilibrium equations:

$$\begin{aligned}\sigma_E &\in \mathcal{S}_E \\ \forall \underline{U}^* \in \mathcal{U}_E, \quad \int_{\Omega_E} \text{Tr}[\sigma_E \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{U}^*)] d\Omega &= \int_{\Omega_E} \underline{f}_d \cdot \underline{U}^* d\Omega + \int_{\partial \Omega_E} \underline{F}_E \cdot \underline{U}^*|_{\partial \Omega_E} d\Gamma\end{aligned}$$

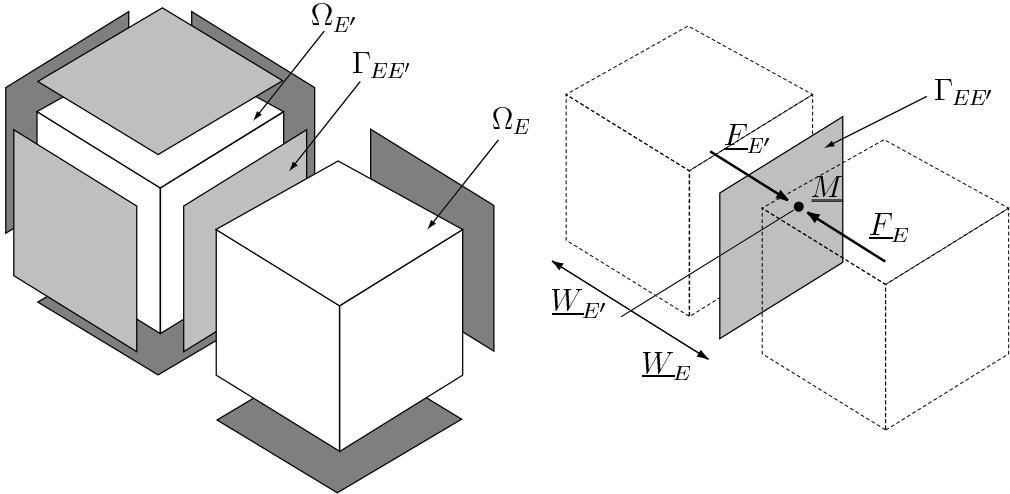


Figure 1. Substructures and interfaces.

In addition, s must also satisfy a second set of equations, Γ , in order to verify the material and interface behaviors:

- constitutive relation:

$$\sigma_E = \mathbf{K} \epsilon_E$$

- interface behavior:

$$F_E = -F_{E'} = A_{\Gamma_{EE'}}(W_E, W_{E'})$$

where $A_{\Gamma_{EE'}}$ is the interface behavior operator. For instance, with a perfect interface, the transmission conditions are $W_E = W_{E'}$; with boundary interfaces, the transmission conditions are the boundary conditions. Various other interface behaviors are conceivable, e.g. unilateral contact interface [13].

The regularity required for displacement field U_E and stress field σ_E is the classical one; for instance, with a three-dimensional analysis, $\mathcal{U}_E = [H^1(\Omega_E)]^3$ and $\mathcal{S}_E = [L^2(\Omega_E)]^6$.

Such a substructuring technique is well-suited to the case of periodic structures [14], but with this approach, boundary areas and interior areas are treated in the same way.

3. DESCRIPTION ON THE MICRO AND MACRO SCALES

3.1. General description

The set of state variables of the structure is expected to possess two parts: one related to the micro-scale, denoted by m , and one related to the macro-scale M , each one with a different characteristic variation length [8].

Here, we define forces and displacements for both scales, on the interfaces. This splitting involves the following quantities: $F_E|_{\Gamma_{EE'}}$, the restriction to the interface $\Gamma_{EE'}$ of the traction force field F_E , and

$\underline{W}_E|_{\Gamma_{EE'}}$, the restriction to the interface $\Gamma_{EE'}$ of the displacement field \underline{W}_E . Then, on every interface forces and displacements are split into:

$$\begin{aligned}\underline{F}_E|_{\Gamma_{EE'}} &= \underline{F}_E^M|_{\Gamma_{EE'}} + \underline{F}_E^m|_{\Gamma_{EE'}} \\ \underline{W}_E|_{\Gamma_{EE'}} &= \underline{W}_E^M|_{\Gamma_{EE'}} + \underline{W}_E^m|_{\Gamma_{EE'}}\end{aligned}$$

There are two ways to obtain this separation

- First way, the displacement-based strategy: the definition of the macro displacement is given by a projection on the displacement

$$\underline{W}_E^M|_{\Gamma_{EE'}} = \Pi_{\Gamma_{EE'}}^W(\underline{W}_E|_{\Gamma_{EE'}})$$

where $\Pi_{\Gamma_{EE'}}^W$ is a displacement field projector defined on the interface $\Gamma_{EE'}$. Then the corresponding macro part of the forces arises with duality on contribution work:

$$\langle \underline{F}_E, \underline{W}_E \rangle_{\Gamma_{EE'}} = \langle \underline{F}_E^m, \underline{W}_E^m \rangle_{\Gamma_{EE'}} + \langle \underline{F}_E^M, \underline{W}_E^M \rangle_{\Gamma_{EE'}} \quad (1)$$

with

$$\langle \underline{F}_E, \underline{W}_E \rangle_{\Gamma_{EE'}} = \int_{\Gamma_{EE'}} \underline{F}_E|_{\Gamma_{EE'}} \cdot \underline{W}_E|_{\Gamma_{EE'}} \, d\Gamma$$

- Second way, the traction-based strategy: the definition of the macro traction field is given by a projection on the interface traction force

$$\underline{F}_E^M|_{\Gamma_{EE'}} = \Pi_{\Gamma_{EE'}}^F(\underline{F}_E|_{\Gamma_{EE'}})$$

where $\Pi_{\Gamma_{EE'}}^F$ is a traction field projector defined on the interface $\Gamma_{EE'}$. Then the corresponding macro part of the force arises with duality on contribution work (1).

The first way is related to the initial approach developed in [5, 6]. A subsequent approach which we are developing herein uses the second way. But, for both approaches, the state of the structure is described by micro and macro interface quantities

$$\begin{aligned}(\underline{W}^M, \underline{F}^M) &\in \mathcal{W}_{ad}^M \times \mathcal{F}_{ad}^M \\ (\underline{W}^m, \underline{F}^m) &\in \mathcal{W}^m \times \mathcal{F}^m\end{aligned}$$

It has to be noted that the micro-macro splitting is done at the "continuum medium" level, it involves no discretization.

A major point for both approaches is that micro forces and micro displacements do not have to satisfy transmission conditions across an interface. On the contrary the macro quantities are chosen in order to satisfy these conditions in a weak sense: $(\underline{W}^M, \underline{F}^M) \in \mathcal{W}_{ad}^M \times \mathcal{F}_{ad}^M$. The choice for \mathcal{W}_{ad}^M and \mathcal{F}_{ad}^M depends on the approach used. In the following section, we will discuss an example of a description associated with a traction oriented projector, then \mathcal{W}_{ad}^M and \mathcal{F}_{ad}^M will be specified.

3.2. A traction-based micro-macro description: A continuum mechanics point of view

Let us consider an interface $\Gamma_{EE'}$ between two substructures E and E' . The macro traction force distribution on the interface is obtained from the original force field using a projector $\Pi_{\Gamma_{EE'}}^F$ (chosen as orthogonal with respect to work on $\Gamma_{EE'}$):

$$\underline{F}_E^M|_{\Gamma_{EE'}} = \Pi_{\Gamma_{EE'}}^F (\underline{F}_E|_{\Gamma_{EE'}})$$

For instance, one can choose to extract the resultant and moment of the field \underline{F}_E on $\Gamma_{EE'}$, as a projector. Then, the micro-level distribution can be deduced:

$$\underline{F}_E^m|_{\Gamma_{EE'}} = [\mathbf{Id} - \Pi_{\Gamma_{EE'}}^F] (\underline{F}_E|_{\Gamma_{EE'}})$$

and from the duality on the contribution work, the displacement fields can be obtained as follows:

$$\begin{aligned} \underline{W}_E^M|_{\Gamma_{EE'}} &= \Pi_{\Gamma_{EE'}}^F (\underline{W}_E|_{\Gamma_{EE'}}) \\ \underline{W}_E^m|_{\Gamma_{EE'}} &= [\mathbf{Id} - \Pi_{\Gamma_{EE'}}^F] (\underline{W}_E|_{\Gamma_{EE'}}) \end{aligned}$$

In this description, \mathcal{F}_{ad}^M is chosen to be the subspace of traction force fields in \mathcal{F}^M which satisfy the transmission conditions on every interface and which are balanced with f_d on each substructure. For the displacements, we only have: $\mathcal{W}_{ad}^M = \mathcal{W}^M$, that is to say macro displacement fields do not have to satisfy the transmission conditions between two substructures. Due to that point, this traction-based approach gives priority to the forces whereas in the displacement-based approach, displacements have to be continuous whereas macro traction forces can be discontinuous.

4. COMPUTATIONAL MICRO-MACRO STRATEGY: BASIC ASPECTS

In order to solve the problem related to the assembly of substructures and interfaces, a strategy is developed within the framework of the LATIN Method [7]. For the linear elastic case treated herein, the duality used is a work-based duality and no longer a dissipative one.

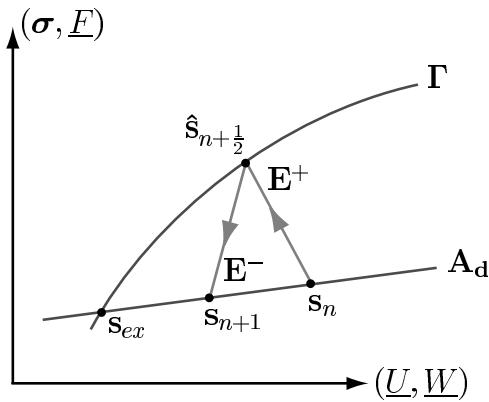


Figure 2. One iteration of the LATIN Method.

The LATIN Method is a non-incremental iterative strategy [7]. It successively builds an element \mathbf{s} of the space of admissible fields \mathbf{A}_d (kinematic and equilibrium equations on each substructure), and an element of the second set Γ (constitutive relation and interface behavior) at each iteration. Iteration n starts with \mathbf{s}_n , an element of \mathbf{A}_d . Then, the local stage is performed from this element to an element $\hat{\mathbf{s}}_{n+\frac{1}{2}}$ of Γ , using the upward search direction \mathbf{E}^+ . Next, the linear stage is performed, leading from $\hat{\mathbf{s}}_{n+\frac{1}{2}}$ to an element \mathbf{s}_{n+1} of \mathbf{A}_d using the downward search direction (see Figure 2). The two search directions represent the parameters of the method.

4.1. Local stage at iteration n

At this stage, the material behavior as well as the interface behavior are satisfied. The problem consists of finding $\hat{\mathbf{s}}_{n+\frac{1}{2}} \in \Gamma$, given $\mathbf{s}_n \in \mathbf{A}_d$. Moreover, $\hat{\mathbf{s}}_{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{s}_n$ has to belong to the upward search direction \mathbf{E}^+ . The upward search direction is given for every substructure E :

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{E,n+\frac{1}{2}} - \boldsymbol{\sigma}_{E,n}) + \mathbf{K}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_{E,n+\frac{1}{2}} - \boldsymbol{\epsilon}_{E,n}) = 0$$

and for every interface $\Gamma_{EE'}$:

$$\begin{aligned} \forall \underline{F}^{m*} \in \mathcal{F}_{EE'}^m, \\ \left\langle \frac{1}{k^m} (\hat{\underline{F}}_{E,n+\frac{1}{2}}^m - \underline{F}_{E,n}^m), \underline{F}^{m*} \right\rangle_{\Gamma_{EE'}} - \left\langle \hat{\underline{W}}_{E,n+\frac{1}{2}}^m - \underline{W}_{E,n}^m, \underline{F}^{m*} \right\rangle_{\Gamma_{EE'}} = 0 \end{aligned}$$

as well as:

$$\begin{aligned} \forall \underline{F}^{M*} \in \mathcal{F}_{EE'}^M, \\ \left\langle \frac{1}{k^M} (\hat{\underline{F}}_{E,n+\frac{1}{2}}^M - \underline{F}_{E,n}^M), \underline{F}^{M*} \right\rangle_{\Gamma_{EE'}} - \left\langle \hat{\underline{W}}_{E,n+\frac{1}{2}}^M - \underline{W}_{E,n}^M, \underline{F}^{M*} \right\rangle_{\Gamma_{EE'}} = 0 \end{aligned}$$

and similar relations for quantities on $\Gamma_{EE'}$ related to the neighboring substructure $\Omega_{E'}$ of Ω_E .

\mathbf{K} is Hooke's tensor. k^m and k^M are two positive scalar parameters of the method. k^m is related only to micro-quantities and to interface characteristics [8], while the choice for k^M will be discussed later in this paper.

For a perfect interface, Γ contains the transmission conditions for forces:

$$\begin{aligned} \underline{F}_{E'}^m + \underline{F}_E^m &= 0 \\ \underline{F}_{E'}^M + \underline{F}_E^M &= 0 \end{aligned}$$

and for displacements:

$$\begin{aligned} \forall \underline{F}^{m*} \in \mathcal{F}_{EE'}^m, \quad \langle \underline{W}_E^m - \underline{W}_{E'}^m, \underline{F}^{m*} \rangle_{\Gamma_{EE'}} &= 0 \\ \forall \underline{F}^{M*} \in \mathcal{F}_{EE'}^M, \quad \langle \underline{W}_E^M - \underline{W}_{E'}^M, \underline{F}^{M*} \rangle_{\Gamma_{EE'}} &= 0 \end{aligned}$$

Γ also contains the boundary conditions for boundary interfaces included in $\partial_1 \Omega$ or $\partial_2 \Omega$.

4.2. Linear stage at iteration n

The problem here consists of finding $\mathbf{s}_{n+1} \in \mathbf{A}_d$, given $\hat{\mathbf{s}}_{n+\frac{1}{2}} \in \Gamma$. For each substructure E , the stress field has to balance forces on the interfaces:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}_E \in S_E, \quad \underline{F}^M \in \mathcal{F}_{ad}^M, \quad \underline{F}^m \in \mathcal{F}^m \\ \forall \underline{U}^* \in \mathcal{U}_E, \\ \int_{\Omega_E} \text{Tr}[\boldsymbol{\sigma}_E \boldsymbol{\epsilon}(\underline{U}^*)] d\Omega = \int_{\Omega_E} f_d \cdot \underline{U}^* d\Omega + \int_{\partial\Omega_E} (\underline{F}_E^M \cdot \underline{U}^*|_{\partial\Omega_E} + \underline{F}_E^m \cdot \underline{U}^*|_{\partial\Omega_E}) d\Gamma \end{aligned}$$

The displacement field has to be compatible with interface displacement fields:

$$\begin{aligned}\underline{U}_E &\in \mathcal{U}_E, \underline{W}^M \in \mathcal{W}_{ad}^M = \mathcal{W}^M, \underline{W}^m \in \mathcal{W}^m \\ \underline{U}_E|_{\partial\Omega_E} &= (\underline{W}_E^M + \underline{W}_E^m)|_{\partial\Omega_E}\end{aligned}$$

Under the previous conditions, note that we imposed $(\underline{W}^M, \underline{F}^M)$ to belong to $\mathcal{W}_{ad}^M \times \mathcal{F}_{ad}^M$.

The downward search direction \mathbf{E}^- is added to the equations defining \mathbf{s}_{n+1} ; for every substructure, we have:

$$(\sigma_{E,n+1} - \hat{\sigma}_{E,n+\frac{1}{2}}) - \mathbf{K}(\epsilon_{E,n+1} - \hat{\epsilon}_{E,n+\frac{1}{2}}) = 0 \quad (2)$$

and for every interface $\Gamma_{EE'}$, we have:

$$\begin{aligned}\forall \underline{F}^{m*} \in \mathcal{F}_{EE'}^m \\ \langle \underline{F}_{E,n+1}^m - \hat{\underline{F}}_{E,n+\frac{1}{2}}^m, \underline{F}^{m*} \rangle_{\Gamma_{EE'}} + \langle k^m (\underline{W}_{E,n+1}^m - \hat{\underline{W}}_{E,n+\frac{1}{2}}^m), \underline{F}^{m*} \rangle_{\Gamma_{EE'}} = 0\end{aligned} \quad (3)$$

and:

$$\begin{aligned}\forall \underline{F}^{M*} \in \mathcal{F}_{ad,0}^M \\ \sum_{\Gamma_{EE'}} \left\langle \frac{1}{k^M} (\underline{F}_{E,n+1}^M - \hat{\underline{F}}_{E,n+\frac{1}{2}}^M), \underline{F}^{M*} \right\rangle_{\Gamma_{EE'}} + \langle \underline{W}_{E,n+1}^M - \hat{\underline{W}}_{E,n+\frac{1}{2}}^M, \underline{F}^{M*} \rangle_{\Gamma_{EE'}} = 0\end{aligned} \quad (4)$$

Note that the macro search direction is global due to the choice for \mathcal{F}_{ad}^M in section 3.2.

The resulting problem is then split into two kinds of sub-problems: a global macro problem, and a micro problem on each substructure. In the following discussion, subscripts $n + \frac{1}{2}$ and $n + 1$ will be omitted.

5. A TRACTION-BASED MICRO-MACRO COMPUTATIONAL STRATEGY: A CONTINUUM MECHANICS PRESENTATION

In this section, we will provide details about the problem to be solved at the linear stage (section 4.2). The solution to the local stage problem can be found in [7]. No details will be given here because no specificity has been introduced into the solution of this problem due to the micro-macro splitting.

5.1. Micro-scale problem

Let us consider a substructure E . The stress field σ_E is balanced with a boundary field \underline{F}_E and body forces \underline{f}_d . The interface traction force field \underline{F}_E has been split on $\partial\Omega_E$ into micro and macro parts. Due to duality, the displacement field has been split as well. In particular, we have $\underline{W}_E^m|_{\Gamma_{EE'}} = [\mathbf{Id} - \Pi_{\Gamma_{EE'}}^F](\underline{W}_E|_{\Gamma_{EE'}})$, thus the micro search direction (3) may be written (in the following $\Pi_{\Gamma_{EE'}}^F$ is simply denoted by Π) as:

$$\begin{aligned}\forall \underline{W}^{m*} \in \mathcal{W}_{EE'}^m \\ \langle \underline{F}_E^m, \underline{W}^{m*} \rangle_{\Gamma_{EE'}} = \langle \hat{\underline{F}}_E^m + k_m \hat{\underline{W}}_E^m - k_m [\mathbf{Id} - \Pi](\underline{U}_E|_{\Gamma_{EE'}}), \underline{W}^{m*} \rangle_{\Gamma_{EE'}}\end{aligned}$$

We also take into account the search direction (2) to express the following formulation: find $\underline{U}_E \in \mathcal{U}_E$ such that:

$$\begin{aligned} \forall \underline{U}^* \in \mathcal{U}_E, \\ \int_{\Omega_E} \text{Tr}[\varepsilon(\underline{U}_E) \mathbf{K} \varepsilon(\underline{U}^*)] d\Omega + \int_{\partial\Omega_E} k_m (\mathbf{Id} - \Pi) \underline{U}_E|_{\partial\Omega_E} \cdot (\mathbf{Id} - \Pi) \underline{U}^*|_{\partial\Omega_E} = \\ \int_{\Omega_E} \underline{f}_d \cdot \underline{U}^* d\Omega + \int_{\partial\Omega_E} \underline{F}_E^M \cdot \underline{U}^*|_{\partial\Omega_E} d\Gamma + \int_{\partial\Omega_E} (\hat{\underline{F}}_E^m + k_m \hat{\underline{W}}_E^m) \cdot \underline{U}^*|_{\partial\Omega_E} d\Gamma \end{aligned} \quad (5)$$

For the projectors chosen in this paper, resultant and moment are preserved; hence, $k_m (\mathbf{Id} - \Pi) \underline{U}_E|_{\partial\Omega_E}$ is a null resultant and moment traction force field, as is $(\hat{\underline{F}}_E^m + k_m \hat{\underline{W}}_E^m)$.

Property 1. *The micro-scale problem admits a solution with an undefined additive rigid body mode displacement field for each substructure if \underline{F}_E^M is balanced with $\underline{f}_{d,E}$.*

Proof. Let us consider a substructure and a traction force field \underline{F}_E leading *a priori* to two different solutions $\underline{U}_E^{(1)}$ and $\underline{U}_E^{(2)}$. With (5) and the particular choice for $\underline{U}^* = \underline{U}_E^{(1)} - \underline{U}_E^{(2)}$, the difference between these two solution fields satisfies:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_E} \text{Tr}[\varepsilon(\underline{U}_E^{(1)} - \underline{U}_E^{(2)}) \mathbf{K} \varepsilon(\underline{U}_E^{(1)} - \underline{U}_E^{(2)})] + \\ & \int_{\partial\Omega_E} k_m (\mathbf{Id} - \Pi)(\underline{U}_E^{(1)} - \underline{U}_E^{(2)}) \cdot (\mathbf{Id} - \Pi)(\underline{U}_E^{(1)} - \underline{U}_E^{(2)}) = 0 \end{aligned}$$

Due to the strict positiveness of both \mathbf{K} and k_m and to the choice for Π , $(\underline{U}_E^{(1)} - \underline{U}_E^{(2)})$ contains the null energy modes for the energy potential, *i.e.* the rigid body modes. One can notice that in the case where $(\underline{U}_E^{(1)} - \underline{U}_E^{(2)})$ is a rigid body mode, $(\mathbf{Id} - \Pi)(\underline{U}_E^{(1)} - \underline{U}_E^{(2)}) = 0$ anyway. \square

The condition that \underline{F}_E^M be balanced with \underline{f}_d is fulfilled due to the definition of \mathcal{F}_{ad}^M , according to which \underline{F}_E^M is chosen.

Since the micro-problem defined with (5) is linear, its right-hand side can be separated into a micro-scale contribution $(\underline{f}_d, \hat{\underline{F}}_E^m + k_m \hat{\underline{W}}_E^m)$ and a macro-scale contribution \underline{F}_E^M . Therefore, the solution to the micro linear stage problem and in particular its macro-level projection can be written separately on the boundary:

$$\underline{W}_E^M = \Pi \underline{U}_E|_{\partial\Omega_E} = \hat{\underline{U}}_d(\underline{f}_d, \hat{\underline{F}}_E^m + k_m \hat{\underline{W}}_E^m) + \mathbf{L}_E(\underline{F}_E^M) \quad (6)$$

where $\hat{\underline{U}}_d$ is a boundary displacement field to be computed knowing $(\underline{f}_d, \hat{\underline{F}}_E^m + k_m \hat{\underline{W}}_E^m)$. \mathbf{L}_E is an operator that can be interpreted as a homogenized behavior operator of the cell E . \mathbf{L}_E is a finite dimension operator ($6 \times$ number of interfaces, in 3D) defined on $\mathcal{F}_{E,ad}^M$ into \mathcal{W}_E^M ($\mathcal{F}_{E,ad}^M$ is the set of boundary traction force fields balanced with \underline{f}_d on E).

Property 2. *The bilinear form $(\underline{F}_E^{M(1)}, \underline{F}_E^{M(2)}) \mapsto \int_{\partial\Omega_E} \mathbf{L}_E(\underline{F}_E^{M(1)}) \cdot \underline{F}_E^{M(2)} d\Gamma$ is symmetric positive definite on $\mathcal{F}_{E,ad,0}^M \times \mathcal{F}_{E,ad,0}^M$.*

Proof. Let us consider two macro traction fields $\underline{F}_E^{M(1)}$ and $\underline{F}_E^{M(2)}$ taken in $\mathcal{F}_{E,ad}^M$. Then, the difference $\delta\underline{F}_E^M = \underline{F}_E^{M(1)} - \underline{F}_E^{M(2)}$ belongs to $\mathcal{F}_{E,ad,0}^M$; from equation (5), a displacement field $\delta\underline{U}_E$ can be associated with $\delta\underline{F}_E^M$:

$$\begin{aligned} \forall \underline{U}^* \in \mathcal{U}_E, & \int_{\Omega_E} \text{Tr}[\varepsilon(\delta\underline{U}_E) \mathbf{K}\varepsilon(\underline{U}^*)] d\Omega + \\ & \int_{\partial\Omega_E} k_m(\mathbf{Id} - \Pi) \delta\underline{U}_E|_{\partial\Omega_E} \cdot (\mathbf{Id} - \Pi) \underline{U}^*|_{\partial\Omega_E} = \int_{\partial\Omega_E} \delta\underline{F}_E^M \cdot \underline{U}^*|_{\partial\Omega_E} d\Gamma \end{aligned} \quad (7)$$

Using the same formula, we can associate another difference $\Delta\underline{F}_E^M = \underline{F}_E^{M(3)} - \underline{F}_E^{M(4)}$ with another displacement field $\Delta\underline{U}_E$. In the previous equation, we replace \underline{U}^* with $\Delta\underline{U}_E$. Moreover, on the boundary of a substructure, due to the definition of the macro part of the displacement from duality arguments, we obtain:

$$\int_{\partial\Omega_E} \delta\underline{F}_E^M \cdot \Delta\underline{U}_E|_{\partial\Omega_E} d\Gamma = \int_{\partial\Omega_E} \delta\underline{F}_E^M \cdot \Delta\underline{W}_E d\Gamma = \int_{\partial\Omega_E} \delta\underline{F}_E^M \cdot \Delta\underline{W}_E^M d\Gamma$$

Recalling that from the definition of \mathbf{L}_E , $\Delta\underline{W}_E^M = \mathbf{L}_E(\delta\underline{F}_E^M)$, we finally obtain:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_E} \text{Tr}[\varepsilon(\delta\underline{U}_E) \mathbf{K}\varepsilon(\Delta\underline{U}_E)] d\Omega + \int_{\partial\Omega_E} k_m(\mathbf{Id} - \Pi) \delta\underline{U}_E|_{\partial\Omega_E} \cdot (\mathbf{Id} - \Pi) \Delta\underline{U}_E|_{\partial\Omega_E} \\ & = \int_{\partial\Omega_E} \delta\underline{F}_E^M \cdot \mathbf{L}_E(\Delta\underline{F}_E^M) d\Gamma \end{aligned}$$

for any $(\delta\underline{F}_E^M, \Delta\underline{F}_E^M) \in \mathcal{F}_{E,ad,0}^M \times \mathcal{F}_{E,ad,0}^M$. This allows being conclusive on the positiveness and symmetry of the studied bilinear form.

In order to prove the bilinear form to be definite, let us now assume that $\delta\underline{F}_E^M = \Delta\underline{F}_E^M$ satisfies:

$$\int_{\partial\Omega_E} \delta\underline{F}_E^M \cdot \mathbf{L}_E(\delta\underline{F}_E^M) d\Gamma = 0$$

which immediately leads to the following:

$$\int_{\Omega_E} \text{Tr}[\varepsilon(\delta\underline{U}_E) \mathbf{K}\varepsilon(\delta\underline{U}_E)] d\Omega + \int_{\partial\Omega_E} k_m(\mathbf{Id} - \Pi) \delta\underline{U}_E|_{\partial\Omega_E} \cdot (\mathbf{Id} - \Pi) \delta\underline{U}_E|_{\partial\Omega_E} = 0$$

Thus, $\delta\underline{U}_E$ is a rigid body displacement field of substructure E . From equation (7), we obtain:

$$\begin{aligned} \forall \underline{U}^* \in \mathcal{U}_E, & \int_{\partial\Omega_E} \delta\underline{F}_E^M \cdot \underline{U}^*|_{\partial\Omega_E} d\Gamma = 0 \\ \Rightarrow \quad \forall \underline{W}_E^* \in \mathcal{W}_E^M, & \int_{\partial\Omega_E} \delta\underline{F}_E^M \cdot \underline{W}_E^* d\Gamma = 0 \\ \Rightarrow & \delta\underline{F}_E^M = 0 \end{aligned}$$

This allows us to conclude that the bilinear form is definite. \square

Lastly, \mathbf{L}_E can be computed by solving a small number of micro-scale-like problems (5). The micro-scale problem in (5) can be definitely solved once the macro-forces \underline{F}_E^M are known. This computation is performed within the macro-scale problem.

5.2. Macro-scale problem

The macro-scale problem consists of verifying the macro search direction (4) by taking into account the results obtained at the micro-scale (6): find $\underline{F}^M \in \mathcal{F}_{ad}^M$ such that:

$$\forall \underline{F}^{M*} \in \mathcal{F}_{ad,0}^M$$

$$\sum_{\Gamma_{EE'}} \langle \mathbf{L}_E(\underline{F}_E^M), \underline{F}^{M*} \rangle_{\Gamma_{EE'}} + \left\langle \frac{1}{k_M} \underline{F}_E^M, \underline{F}^{M*} \right\rangle_{\Gamma_{EE'}} = \sum_{\Gamma_{EE'}} \left\langle \frac{\hat{F}_E^M}{k_M} + \hat{W}_E^M - \hat{U}_d, \underline{F}^{M*} \right\rangle_{\Gamma_{EE'}}$$

Property 3. *The macro-scale problem admits a unique solution if $k_M \geq 0$.*

Proof. Property 2 is extended to all interfaces, hence the left-hand side of the macro-scale problem is symmetric and positive definite. The macro-scale problem is a finite dimension problem; consequently, the uniqueness and existence of a solution to this problem is obtained. \square

The macro-traction \underline{F}^M has to be admissible; a typical way of taking into account such a relation is to introduce Lagrange multipliers. In our case, the Lagrange multipliers are the rigid body modes of each substructure; equation (6) thus becomes:

$$\underline{W}_E^M = \Pi \underline{U}_E|_{\partial\Omega_E} = \hat{U}_d(f_d, \hat{F}_E^m + k_m \hat{W}_E^m) + \mathbf{L}_E(\underline{F}_E^M) + (\underline{u}_E^{(0)} + \underline{\omega}_E^{(0)} \wedge \underline{OM})|_{\partial\Omega_E}$$

The macro-problem then becomes: find $\underline{F}^M \in \mathcal{F}_{ad}^M$ such that:

$$\forall \underline{F}^{M*} \in \mathcal{F}_{ad,0}^M$$

$$\sum_{\Gamma_{EE'}} \langle \mathbf{L}_E(\underline{F}_E^M), \underline{F}^{M*} \rangle_{\Gamma_{EE'}} + \left\langle \frac{1}{k_M} \underline{F}_E^M, \underline{F}^{M*} \right\rangle_{\Gamma_{EE'}}$$

$$+ \left\langle \frac{1}{k_M} (\underline{u}_E^{(0)} + \underline{\omega}_E^{(0)} \wedge \underline{OM})|_{\partial\Omega_E}, \underline{F}^{M*} \right\rangle_{\Gamma_{EE'}} = \sum_{\Gamma_{EE'}} \left\langle \frac{\hat{F}_E^M}{k_M} + \hat{W}_E^M - \hat{U}_d, \underline{F}^{M*} \right\rangle_{\Gamma_{EE'}} \quad (8)$$

which is statically admissible:

$$\forall (\underline{u}_E^{(0)*} + \underline{\omega}_E^{(0)*} \wedge \underline{OM})$$

$$\int_{\Omega_E} f_d \cdot (\underline{u}_E^{(0)*} + \underline{\omega}_E^{(0)*} \wedge \underline{OM}) d\Omega + \int_{\partial\Omega_E} \underline{F}_E^M \cdot (\underline{u}_E^{(0)*} + \underline{\omega}_E^{(0)*} \wedge \underline{OM}) d\Gamma = 0 \quad (9)$$

The solution to the macro problem (8,9) (which does not depend on the micro unknowns, once \hat{U}_d has been calculated up to the micro-scale) leads to the macro force field \underline{F}^M at iteration n , as well as to additive rigid body modes. The micro-scale problem can then be completed to obtain the micro contributions at iteration n .

5.3. Convergence

Following the convergence proof for the one-level strategy given in [7], with standard assumptions for elasticity, convergence is reached if the search directions are framed by two constants k_1 and k_2 , such that:

$$\infty > k_2 \geq k_m \geq k_1 > 0$$

$$\infty \geq k_M \geq 0$$

In particular, if \mathbf{s}_{ex} denotes the solution to the reference problem (*i.e.* the intersection between \mathbf{A}_d and Γ on Figure 2), we have:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_{ex}\| = 0 \text{ and } \lim_{n \rightarrow \infty} \|\hat{\mathbf{s}}_{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{s}_{ex}\| = 0$$

with:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{s}\|^2 &= \sum_E \int_{\Omega_E} \text{Tr} [\sigma_E \mathbf{K}^{-1} \sigma_E + \varepsilon_E \mathbf{K} \varepsilon_E] d\Omega \\ &\quad + \sum_{\Gamma_{EE'}} \int_{\Gamma_{EE'}} (\underline{E}_E^m \cdot \frac{1}{k_m} \underline{E}_E^m + \underline{W}_E^m \cdot k_m \underline{W}_E^m + \underline{E}_E^M \cdot \frac{1}{k_M} \underline{E}_E^M + \underline{W}_E^M \cdot k_M \underline{W}_E^M) d\Gamma \end{aligned}$$

6. OPTIMIZATION OF THE ALGORITHM PARAMETERS

From a continuum mechanics point of view, two scalar parameters appear in the traction-based strategy: the search direction parameters. The micro-level parameter k_m appears in equation (3) and the macro-level parameter k_M in equation (4). In all examples treated herein, the macro part of interface traction fields consists of the linear part of these fields.

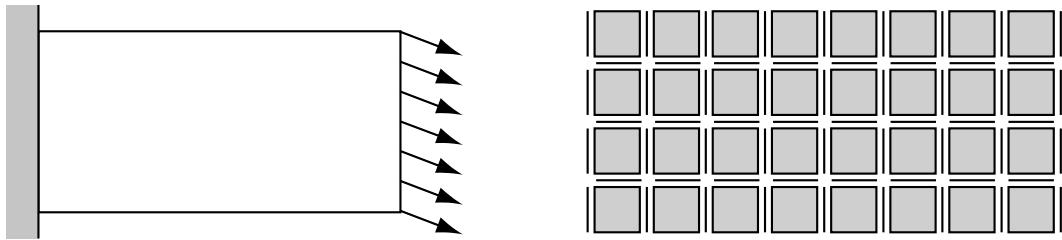


Figure 3. Cantilever structure clamped to one end and submitted to a flexion-tension loading at the other end.

The first test example proposed is a cantilever structure. It is solved in 2D under a plane strain assumption. The structure is clamped at one extremity and submitted to a non-axial force distribution at the other extremity. The structure under study has been split into 32 substructures (see Figure 3). Each substructure has been discretized with 512 3-node triangular finite elements. The influences of both discretization and substructuring are not discussed in this paper. For the sake of simplicity, in order to focus on the numerical parameters' optimal values, the material constituting the structure is linear elastic, homogeneous and isotropic.

Iterative solutions were computed using the traction-based strategy. For each element of a test-value sample for k_M , we performed 20 iterations of the method. k_m remains constant and equal to $E/25L_m$, with L_m being the characteristic length of a substructure. The direct solution of the finite element problem was taken as a reference. The error relative to this reference solution was compared versus the value of $k_M/k_{M,0}$ in Figure 4. This error has been measured with a global energy norm on the displacement difference between the two solutions. (The starting value $k_{M,0}$ is classically related to the whole structure's characteristic dimension [8]: $k_{M,0} = E/L_M$, where E is the Young's modulus of the material and L_M is the length of the structure.)

An optimal value for k_M then appears (see Figure 4):

$$k_M \rightarrow \infty$$

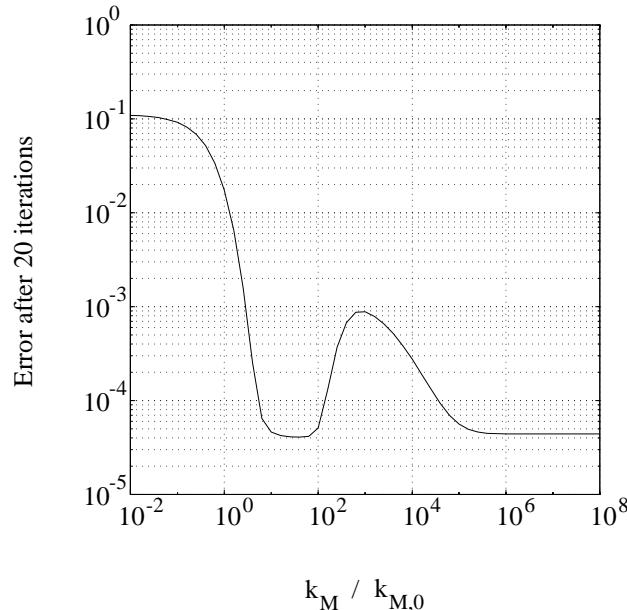


Figure 4. Traction-based micro-macro LATIN strategy: Error after 20 iterations.

The macro-problem can thus be rewritten taking this result into account.

Concerning the displacement-based approach described in [6], a similar result is obtained. Performing the same test as previously discussed, and considering the linear part of interface displacement as macro-displacement, the resulting chart is shown in Figure 5. Using this strategy, the optimal value is found: $k_M = 0$. The macro-scale problem therefore has to be rewritten as well.

Remarkable result. One can note that the previous two optimal versions coincide (as soon as the macro projectors for the displacement-based approach and for the traction-based approach are conjugate). In particular, in this unified approach both macro-displacements and macro-forces verify the transmission conditions at any iteration, not only when convergence is reached. The major point lies in the fact that a parameter has been deleted: *only k_m remains*. This last parameter is related to the characteristic dimensions of a substructure. A first evaluation of k_m has already been proposed in [8].

7. AN EXAMPLE OF HIGHLY-HETEROGENEOUS STRUCTURAL CALCULATIONS

The iterative strategy proposed herein has been specially created to treat heterogeneous structures with optimal efficiency. This approach can be used to analyze composite structures, by taking directly into account the microstructure of the considered material. The unified version is of course used here.

In order to demonstrate the possibilities of this method, we will present some examples of finite element calculation. These examples are performed in 2D under the assumption of plane strains. The material is heterogeneous, yet every component displays an elastic isotropic behavior. Two elementary cells are proposed: (A) a fiber-reinforced composite, and (B) honeycomb (see Figure 6). For these two

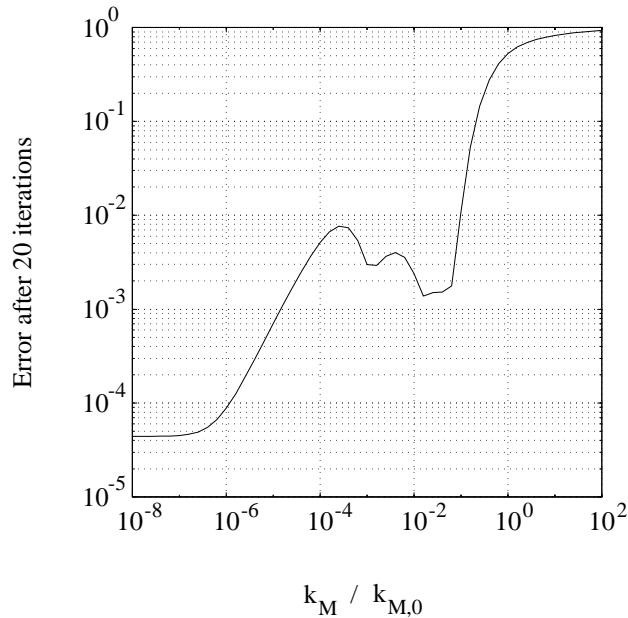


Figure 5. Displacement-based micro-macro LATIN strategy: Error after 20 iterations.

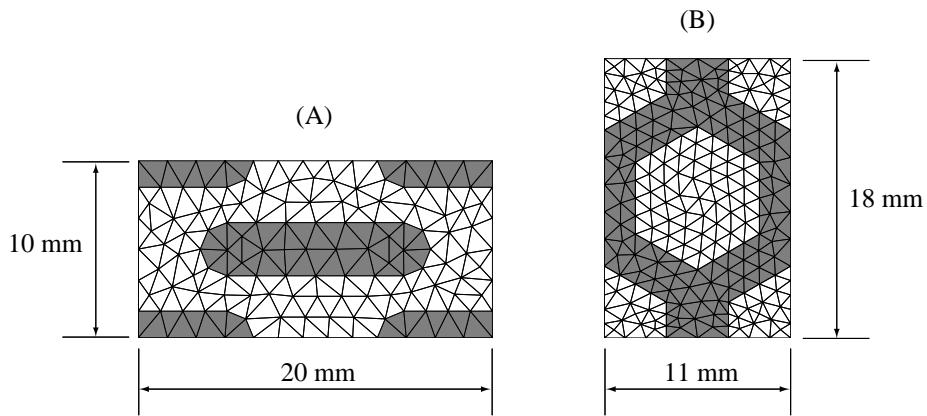


Figure 6. (A) fiber-reinforced composite cell; (B) honeycomb cell.

heterogeneous material cells, the heterogeneity ratio is 10^3 : for cell (A), the fiber inclusions are 10^3 times stiffer than the matrix; for cell (B), the honeycomb structural parts are 10^3 times stiffer than the material in the cavities. The Young's modulus is taken as equal to 2.10^5 MPa, and the Poisson's ratio

Table I. Average convergence rate after 30 iterations.

Number of substructures	16	36	64	100
(A)	$6.0 \cdot 10^{-2}$	$6.3 \cdot 10^{-2}$	$6.5 \cdot 10^{-2}$	$6.6 \cdot 10^{-2}$
(B)	$3.2 \cdot 10^{-2}$	$3.4 \cdot 10^{-2}$	$3.6 \cdot 10^{-2}$	$3.6 \cdot 10^{-2}$

0.3.

This strategy has been tested on cantilever structures containing various numbers of elementary cells (A) and (B) (see Figure 7). The whole structure is decomposed into as many substructures as elementary cells: hence, each substructure is constituted of 1 elementary cell. The cantilever structures are clamped at one end and submitted to a flexion-shear force distribution at the other end. These structures are under a global flexion loading. Figure 7 shows the configurations of these different structures for the two proposed cell types.

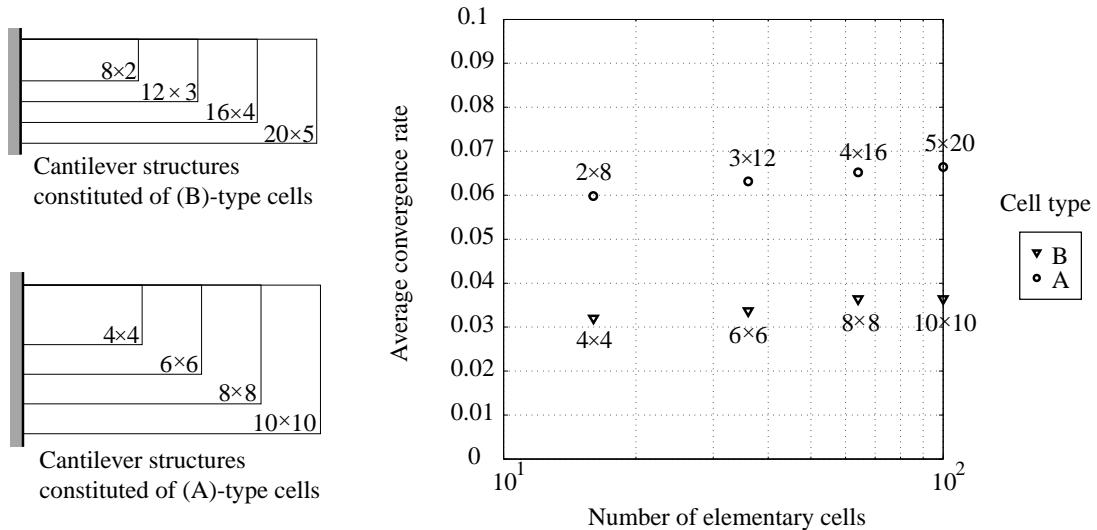


Figure 7. Average convergence rate after 30 iterations: (1) for the two cells proposed, (A) fiber-reinforced composite and (B) honeycomb; and (2) for different numbers of substructures: 16, 36, 64 and 100.

Concerning the calculation results, we have reported the average convergence rate after 30 iterations of the method for different numbers of elementary cells in Figure 7 and Table I. This average convergence rate is computed using the following formula:

$$\tau_{avg} = -\frac{1}{29} \log\left(\frac{e_{30}}{e_1}\right)$$

where e_{30} and e_1 represent the energy norm of the error between the iteratively-calculated solution and the reference solution (result of the direct finite element problem) after 30 iterations and after the first iteration, respectively. This value remains constant for the 4 tests performed on both cell types. As a

consequence, due to the optimal choice for the parameter k_M in the previous section, the method seems to be numerically scalable *i.e.* independent of the number of substructures. The convergence result is only dependent only on the complexity of the local substructure problem.

In Figure 8, is reported the energy norm of the error between the iterative solution and the reference solution (result of the direct finite element problem without substructuring) for the problem of 64 substructures of (A)-type cells, for which the proposed approach yields the best results. 30 iterations have been performed. As a reference, we have also performed 30 iterations of the original FETI Method for two different preconditioners [9] (without heterogeneous improved scaling [15]). It should be pointed out that no preconditioner has been used in the LATIN micro-macro approach.

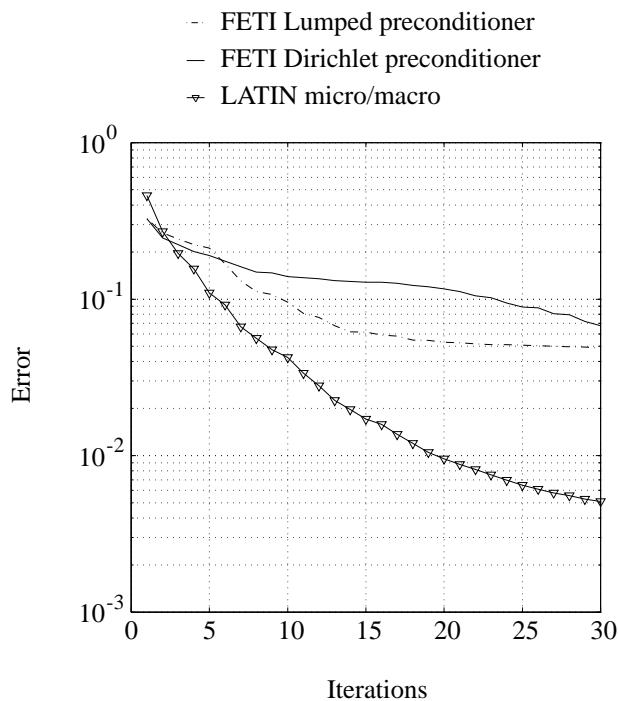


Figure 8. Evolution of the error for 30 iterations of the method applied to the problem of 64 (A)-type cells.

In order to obtain information on the costs of the different approaches, the major trends can be estimated by the complexity analysis of the algorithms. We have used a band storage, Crout factorization as a linear solver and an arrow pattern of rigidity matrices with Schur condensation for the micro-macro approach. For the previous example, the initialization stage (initial factorizations and condensation for all the substructures and for the macro problems) leads to the following results: (a) the FETI Method with a Dirichlet preconditioner cost is 40% that of the LATIN micro-macro approach, and (b) the FETI Method with a lumped preconditioner cost is 20% that of the LATIN micro-macro approach. Concerning one single iteration (dot products, forward and back substitution, also cumulated on all substructures), the costs are: (a) the FETI Method with a Dirichlet preconditioner is equivalent to the LATIN micro-macro approach, and (b) the FETI Method with a lumped preconditioner is half of the previous cost. These results have been obtained on a small 2D problem. Because the global problem in

a LATIN micro-macro approach is always large when compared to the corresponding problem in FETI, the same estimations tend to position the micro-macro close to the FETI lumped complexity, as the size of the local problems increases. Concerning the synchronization between processes, the FETI method needs to solve 2 global problems at each iteration and thus to synchronize twice all the processors with one of them. The micro-macro approach as previously described, requires only 1 such synchronization per iteration.

In Figures 9 and 10, we present the calculated solutions after the 1st and 28th iterations. The information given by the macro and micro scales on the interfaces have also been indicated. One substructure on the first left-hand column of substructures is magnified in order to focus on the macro and micro projections of the interface displacements.

As a conclusion, we can say, roughly speaking, that the cost of a micro-macro iteration is similar to the cost of a FETI iteration. Moreover, the cost of preliminary calculations becomes similar for both methods, as the problem size increases. As a consequence, if the convergence rate observed on the last example is preserved, the micro-macro computational strategy can be much more efficient for highly heterogeneous structure calculations. However, for weakly heterogeneous structures, the cost should be the same, as observed in [8].

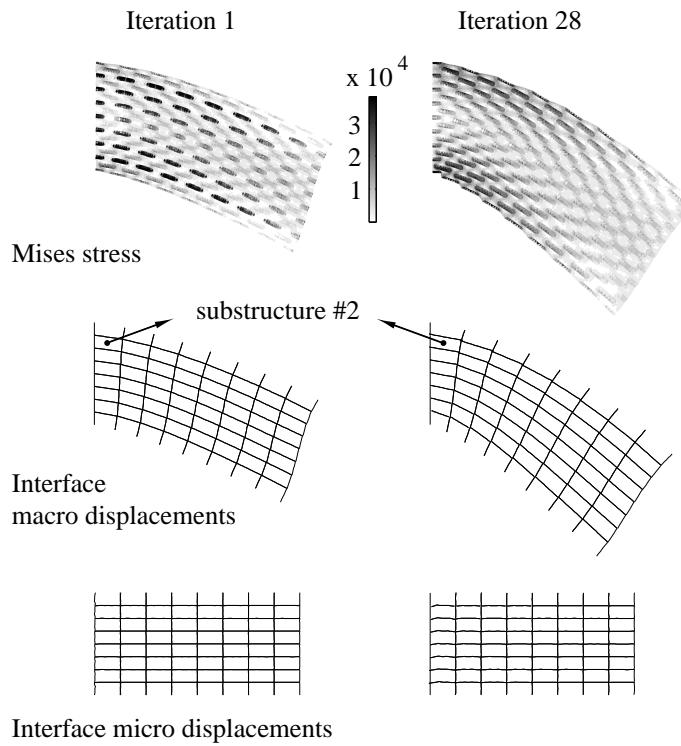


Figure 9. Representation of the solution calculated after the 1st and 28th iterations.

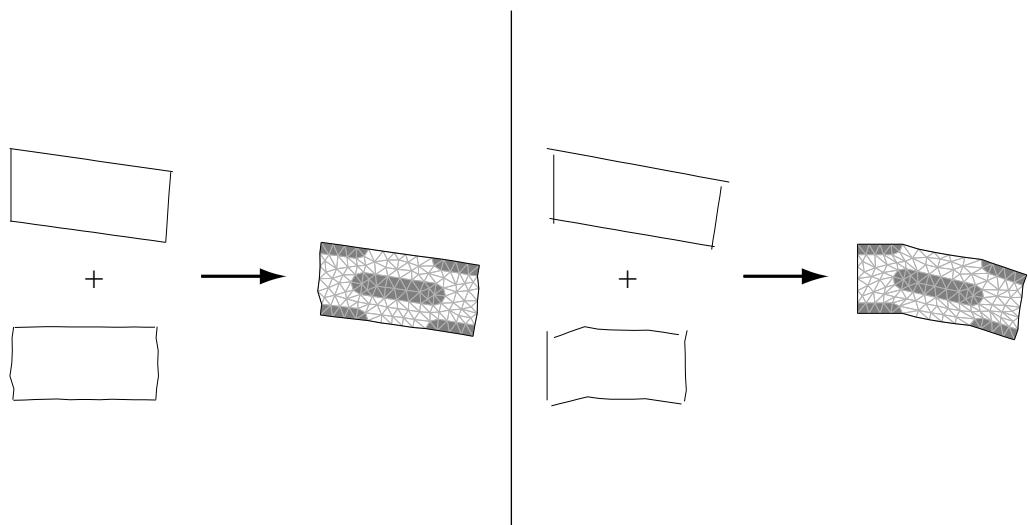


Figure 10. Displacement solution after the 1st and 28th iterations. Contributions of the macro and micro scales to the interface displacements for substructure #2.

8. CONCLUSION

Both the optimal displacement-based and traction-based micro-macro strategies form a unique strategy characterized by only one parameter, interpreted as a micro-stiffness.

Moreover, this approach leads to a parallel and mechanical approach, which is related to domain decomposition methods and well-suited to parallel architecture computers; the underlying algorithm can be interpreted as a “mixed” and 2-level domain decomposition method. It leads to a numerically-scalable and efficient domain decomposition method.

In certain cases, using 3 scales could be of interest from a modelling point of view and/or for a computational efficiency issue. For instance laminate composite structures usually involve a micro scale (fiber, matrix level), a meso scale (ply and interface level), a macro scale (the whole structure level). Hence we can imagine a 3-level approach involving 2 homogenization procedures close to the one proposed in this paper. Another way to introduce a third scale is to use a discretization on the macro scale. In that case, a patch of cells is replaced by a super-element in order to reduce the computational cost of the macro problem. This last approach is currently under testing.

Further work is also in progress to extend this computational strategy to contact problems as well as to plasticity and visco-plasticity problems.

REFERENCES

1. E. Sanchez-Palencia. Non homogeneous media and vibration theory. *Lectures Notes in Physics*, 127, 1980.
2. J. Fish, V. Belsky. Multigrid method for periodic heterogeneous media (part 1,2). *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 32:1–38, 1995.
3. J.T. Oden, K. Vemaganti, N. Moës. Hierarchical modelling of heterogeneous solids. to appear in a special issue *Computational Advances in Modelling Composites and Heterogeneous Materials*.
4. J.T. Oden, T.I. Zohdi. Analysis and adaptive modelling of highly heterogeneous structures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 148:367–392, 1997.
5. P. Ladevèze, D. Dureisseix. A new micro-macro computational strategy for structural analysis. *Comptes-Rendus de l'Académie des Sciences*, 327:1237–1244, 1999. (partially in english).
6. P. Ladevèze, D. Dureisseix. A micro-macro approach for parallel computing of heterogeneous structures. to appear in *Journal of Computational Civil and Structural Engineering*.
7. P. Ladevèze. *Nonlinear Computational Structural Mechanics - New Approaches and Non-Incremental Methods of Calculation*. Springer Verlag, 1999.
8. D. Dureisseix, P. Ladevèze. A multi-level and mixed domain decomposition approach for structural analysis. In *Domain Decomposition Methods 10*, pages 246–253. Contemporary Mathematics, 1998.
9. C. Farhat, F.-X. Roux. A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 32:1205–1227, 1991.
10. P. Ladevèze, D. Dureisseix. Une nouvelle stratégie de calcul parallèle et micro/macro en mécanique non-linéaire. Technical Report 188, Laboratoire de Mécanique et Technologie, Cachan, 1997.
11. J. Mandel. Balancing domain decomposition. *Communications in Applied Numerical Methods*, 9:233–241, 1993.
12. P. Le Tallec. Domain decomposition methods in computational mechanics. *Computational Mechanics Advances*, 1, 1994.
13. L. Champaney, J.-Y. Cognard, D. Dureisseix, and P. Ladevèze. Large scale applications on parallel computers of a mixed domain decomposition method. *Computational Mechanics*, (19):253–263, 1997.
14. A. El Hami, B. Radi. Some decomposition methods in the analysis of repetitive structures. *Computers and Structures*, 58(5):973–980, 1996.
15. D. Rixen and C. Farhat. A simple and efficient extension of a class of substructure based preconditioners to heterogeneous structural mechanics problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46:501–534, 1998.

Principaux résultats obtenus, et perspectives. L'approche précédente peut être décrite de deux points de vue : celui d'une méthode de décomposition de domaine multiéchelle mixte, et celui d'une technique d'homogénéisation.

Concernant la décomposition de domaine, elle présente bien sûr le caractère extensible. Comme le logiciel réalisé par Olivier Loiseau durant son travail de thèse avait pour but de montrer la faisabilité de l'approche, il a été implanté dans l'environnement MatlabTM et ne permet de traiter que des cas bidimensionnels. Le comportement "algorithme" (évolution de l'erreur en fonction des itérations) montre ses insuffisances car il ne permet pas de pondérer les différentes phases des algorithmes en fonction de leur coût.

L'évaluation des performances en terme de coût est donc difficile à mener sur cette base. La comparaison des temps de restitution (c'est-à-dire des temps nécessaires pour obtenir le résultat de l'analyse) des différents algorithmes a l'inconvénient, par la globalité de son analyse, de prendre en compte un nombre très grand de paramètres (qualité d'écriture du code, performances des compilateurs utilisés, performances des systèmes d'entrées-sorties, dépendance aux types d'opérations numériques effectuées suivant le processeur, indirections et synchronisations dues aux types de réseaux de communication ...).

Pour éviter de faire intervenir ces trop nombreux paramètres, une analyse de complexité a donc été réalisée dans le cas de problèmes typiques (structure en forme de pavé, sous-structuration et maillage réguliers ...). Sur cette base, l'approche a été comparée à la méthode FETI. L'analyse tend à favoriser les résultats de l'approche micro-macro, surtout lorsque le degré d'hétérogénéité augmente. Cette analyse simplifiée ne permet bien sûr pas une étude plus fine du coût, en particulier lors d'une utilisation sur architecture parallèle. Cette étude nécessite une implantation dans un code éléments finis, qui est en cours.

Les deux versions de la méthode (basées sur les déplacements macro ou sur les efforts macro) ont été réunies par l'utilisation de la valeur optimale du paramètre de direction de recherche macro. Dans ce cas de figure, et comme précédemment, seule demeure la valeur de la direction de recherche micro comme paramètre de la méthode. Remarquons aussi qu'au cours des itérations, à la fois les efforts et les déplacements macro satisfont à l'équilibre et à la continuité aux interfaces.

Le deuxième type de résultats obtenus par l'approche micro-macro concerne son utilisation en temps que démarche d'homogénéisation. Il s'agit en effet d'une méthode d'homogénéisation automatique en ce sens qu'elle ne nécessite pas un traitement particulier des zones bord : les effets de bord sont capturés au cours des itérations où la solution macro effective est également corrigée. À convergence, la solution tend vers la solution fine du problème de référence à l'échelle micro. Un certain nombre de limitations n'interviennent donc plus : il n'est pas nécessaire d'avoir des échelles très séparées, et le milieu étudié n'est pas forcément périodique. On peut bien entendu utiliser ces propriétés si elles existent ; par exemple dans le cas périodique, tous les problèmes globaux par sous-structure sont identiques.

Le milieu homogénéisé peut être interprété comme un milieu de Cosserat dont la description peut être de degré plus ou moins élevé suivant le choix de la description macro. En pratique, sur les cas testés, la partie linéaire des champs s'avère suffisante.

Sur la base de cette approche, les outils développés par Olivier Loiseau concernent

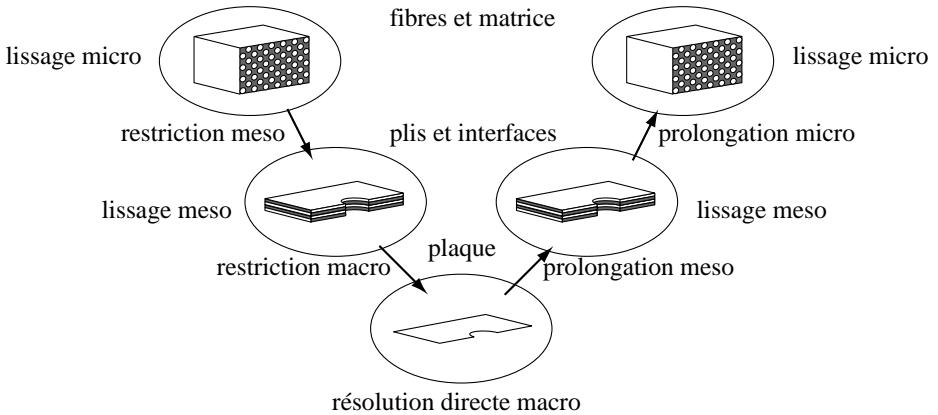


FIG. 1 – Présence de 3 échelles dans un composite stratifié

entre autre, une discréétisation de l'échelle macro (elle même discrète au départ) afin de pouvoir traiter efficacement de grandes zones d'une structure composite où il n'est pas nécessaire de traiter tout le problème à l'échelle micro.

En terme de perspectives directes, il serait utile de pouvoir disposer d'un outil de contrôle d'erreur pour plusieurs points d'intérêt. Tout d'abord comme pilotage, il permettrait de disposer d'un critère fiable d'arrêt des itérations (la référence pouvant être la solution discréétisée à convergence). Il serait utile aussi pour contrôler l'algorithme, par exemple en adaptant la direction de recherche afin de maintenir un taux de convergence élevé sans demander de l'utilisateur qu'il fournisse une valeur pour les paramètres de direction de recherche. Bien entendu, le contrôle doit pouvoir permettre l'adaptation du maillage macro (en prenant comme référence, le problème homogénéisé en milieu continu) ou micro. Plus encore, il doit fournir un indicateur de changement de modélisation (adaptation du modèle), voir [Vemaganti et Oden 01] à propos de cette thématique par exemple. Le but est de distinguer les zones où la discréétisation de l'échelle macro suffit, où l'échelle macro doit être complète, et où il est nécessaire de calculer la solution sur l'échelle micro (en prenant cette fois-ci comme référence le problème fin en milieu continu). Comme "sous-produit", cela permettra de distinguer automatiquement les zones intérieures des zones bord (ou d'intérêt particulier) sur lesquelles une modélisation fine est nécessaire.

La même démarche d'adaptation de modèle devrait aussi pouvoir permettre le couplage de modèles poutre, plaque ou coque (ou sa version 3D dégénérée) vus comme un modèle homogénéisé particulier, avec des zones modélisées en 3D complet. C'est par exemple le cas des composites stratifiés, où on peut distinguer trois échelles : celle de la structure (ou du composant), celle des plis, et celle des constituants (fibres et matrice par exemple). Cet exemple est illustré sur la figure 1 (inspirée de [Fish et Belsky 95]).

Un autre cas de figure intéressant est celui où cohabitent des effets d'échelles très différentes dans une même structure. C'est par exemple le cas pour les matériaux à gradient de propriété, et dans une encore plus grande mesure dans le cas de la "process zone" en pointe de fissure dans une structure massive. C'est une thématique sur la-

quelle travaille en partie Anthony Nouy en thèse sous la direction de Pierre Ladevèze. Pour ces cas de figure, l'utilisation d'un même type de discréétisation à des échelles très différentes est très délicat numériquement et peut conduire à une analyse erronée (entre autre, à cause d'un mauvais conditionnement du problème discréétisé). L'approche micro-macro peut alors s'avérer un outil efficace en tant que remplaçant des approches de type "zoom structural" et "globale-locale". Un développement utile dans ce cas serait la possibilité de couplage de l'échelle macro discrète au voisinage de la zone d'intérêt, avec des éléments finis classiques loin de cette zone. Le couplage avec l'échelle micro peut alors être réalisé par la présente approche micro-macro.

Dans une autre mesure, un tel zoom peut être avantageux pour l'analyse ou l'optimisation de zones d'intérêt particulier : congés de raccordement entre descriptions plus grossières des surfaces, par exemple en avant projet de procédés d'obtention, ou analyse d'une structure à deux niveaux de détails (comme c'est actuellement partiellement le cas sur les grandes structures de type paquebots ou la sollicitation est à grande échelle au niveau de la structure et le dimensionnement à petite échelle au niveau des parois, raidisseurs ...). Cette approche devrait pouvoir utilement se coupler avec la technique des *level set* [Oster et Sethian 88, Sethian 99] ou du VOF (*Volume Of Fluid*) [Scardovelli et Zaleski 99] pour décrire les bords ou frontières libres (en injection ou au changement de phase comme la solidification, ou même en combustion, qui relèvent d'une analyse multiphysique).

Reconstruction de champs intérieurs macroscopiques. La reconstruction d'une contrainte σ et d'une déformation ϵ macro comme post-traitement à partir de champs macro \underline{W}^M et \underline{F}^M , sur une sous-structure Ω , peut être réalisée de différentes manières. Un intérêt est la possibilité d'utiliser cette reconstruction comme un outil pour coupler l'échelle macro avec des contraintes ou déformations issues d'éléments finis standards. À titre d'illustration, on considérera ici le cas sans charge de volume. Pour simplifier, on cherchera des contraintes et déformations macro uniformes sur Ω . Le principal outil est la dualité au sens du travail :

$$\int_{\partial\Omega} \underline{F}^M \cdot \underline{W}^M dS = \int_{\Omega} \text{Tr}[\sigma \epsilon] d\Omega$$

Une telle construction peut privilégier les déplacements ou les efforts. Pour la version en déplacement par exemple, considérons le cas où \underline{F}^M est *raccordé fortement* avec σ : $\underline{F}^M = \sigma \underline{n}|_{\partial\Omega}$, alors par dualité,

$$\forall \sigma, \quad \int_{\partial\Omega} \underline{W}^M \cdot \sigma \underline{n} dS = \int_{\Omega} \text{Tr}[\sigma \epsilon] d\Omega$$

donne la construction de ϵ à partir de \underline{W}^M . Le comportement macro $\epsilon = \mathbf{D}^{-1}\sigma$ peut alors s'en déduire en utilisant, pour deux champs macro notés avec les indices 1 et 2, le comportement homogénéisé $\underline{W}^M = \mathbf{L}\underline{F}^M$ (à un mouvement de solide rigide près, qui a été omis pour alléger la présentation) :

$$\int_{\partial\Omega} \underline{F}_1^M \cdot \underline{W}_2^M dS = \int_{\Omega} \text{Tr}[\sigma_1 \mathbf{D}^{-1} \sigma_2] d\Omega$$

alors

$$\forall \boldsymbol{\sigma}_1, \quad \boldsymbol{\sigma}_2, \quad \underline{F}_1^M = \boldsymbol{\sigma}_1 \underline{n}|_{\partial\Omega}, \quad \underline{F}_2^M = \boldsymbol{\sigma}_2 \underline{n}|_{\partial\Omega},$$

$$\int_{\partial\Omega} \underline{F}_1^M \cdot \mathbf{L}^{-1} \underline{F}_2^M dS = \int_{\Omega} \text{Tr}[\boldsymbol{\sigma}_1 \mathbf{D}^{-1} \boldsymbol{\sigma}_2] d\Omega$$

ce qui permet de déterminer la souplesse équivalente \mathbf{D}^{-1} .

Un outil mieux adapté pour la reconstruction de $\boldsymbol{\sigma}$ et $\boldsymbol{\epsilon}$ peut être celui, déjà mentionné, de la RdM3D [Hochard *et al.* 97] qui permet de traiter ce problème de façon mixte. Son emploi aisément dans notre cas est aussi une justification de travaux en cours qui visent à l'utiliser comme problème macro global. Dans le cas présent, ce “raccord mixte faible” s'écrit entre les quantités $(\underline{F}, \underline{W})$, premiers modes de Trefftz, liés par l'opérateur de Dirichlet-Neumann pour un problème homogène (à choisir). Ce lien qui les unit sera noté $(\underline{F}, \underline{W}) \in \partial\mathbf{A}_{\mathbf{d}}$. Le raccord avec les quantités $(\underline{F}^M, \underline{W}^M)$ données est :

$$\forall (\underline{F}^*, \underline{W}^*) \in \partial\mathbf{A}_{\mathbf{d}}^0, \quad \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} [\underline{F}^* \cdot (\underline{W} - \underline{W}^M) + \underline{W}^* \cdot (\underline{F} - \underline{F}^M)] dS = 0$$

soit :

$$\forall (\underline{F}^*, \underline{W}^*) \in \partial\mathbf{A}_{\mathbf{d}}^0, \quad \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (\underline{F}^* \cdot \underline{W} + \underline{W}^* \cdot \underline{F}) dS = \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (\underline{F}^* \cdot \underline{W}^M + \underline{W}^* \cdot \underline{F}^M) dS$$

En utilisant seulement les premiers mode (champs uniformes) on a $\underline{F} = \boldsymbol{\sigma} \underline{n}|_{\partial\Omega}$, $\underline{W} = \boldsymbol{\epsilon} \underline{OM}|_{\partial\Omega}$, $\boldsymbol{\sigma}$ et $\boldsymbol{\epsilon}$ uniformes, $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}\boldsymbol{\epsilon}$ (où \mathbf{D} est à choisir). Alors

$$\frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (\underline{F}^* \cdot \underline{W} + \underline{W}^* \cdot \underline{F}) dS = \int_{\Omega} \text{Tr}[\boldsymbol{\epsilon} \mathbf{D} \boldsymbol{\epsilon}^*] d\Omega$$

et on obtient :

$$\forall \boldsymbol{\epsilon}^*, \quad \int_{\Omega} \text{Tr}[\boldsymbol{\epsilon} \mathbf{D} \boldsymbol{\epsilon}^*] d\Omega = \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (\underline{W}^M \cdot (\mathbf{D} \boldsymbol{\epsilon}^*) \underline{n} + \underline{F}^M \cdot \boldsymbol{\epsilon}^* \underline{OM}) dS$$

ce qui donne les champs $\boldsymbol{\epsilon}$ et $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}\boldsymbol{\epsilon}$, connaissant \underline{F}^M et \underline{W}^M . Cette construction fait bien entendu intervenir un opérateur de comportement homogénéisé \mathbf{D} qui pourra être choisi, comme précédemment, par une équivalence énergétique pour certains champs particuliers.

D'autres techniques pour déterminer \mathbf{D} permettent de ne plus favoriser l'un ou l'autre des champs de déplacement ou d'effort. Par exemple, la détermination de \mathbf{D} à partir de la donnée des champs sur le bord \underline{F}^M et \underline{W}^M peut être vue comme la résolution d'un problème inverse (bien posé, au vu de la faible quantité d'information que l'on cherche dans \mathbf{D} homogène). Dans ce cas, on peut envisager de le résoudre par l'utilisation d'une fonctionnelle de type erreur en relation de comportement : définissons les champs $\underline{F}^M = \boldsymbol{\sigma} \underline{n}|_{\partial\Omega}$, $\underline{W}^M = \boldsymbol{\epsilon} \underline{OM}|_{\partial\Omega}$ (où $\boldsymbol{\sigma}$ et $\boldsymbol{\epsilon}$ sont uniformes) liés par $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}\boldsymbol{\epsilon}$; on n'a pas *a priori* $\underline{F}^M - \mathbf{L}\underline{W}^M = 0$ (où \mathbf{L} est, rappelons-le, non local), mais

on peut bâtir une erreur en relation de comportement η sur cette quantité :

$$\begin{aligned}
\eta^2 &= \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (\underline{F}^M - \underline{\mathbf{L}}\underline{W}^M) \cdot \mathbf{L}^{-1} (\underline{F}^M - \underline{\mathbf{L}}\underline{W}^M) dS = \\
&= \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (\underline{\boldsymbol{\sigma}_n} \cdot \mathbf{L}^{-1} \underline{\boldsymbol{\sigma}_n} + \underline{\boldsymbol{\epsilon}_{OM}} \cdot \mathbf{L} \underline{\boldsymbol{\epsilon}_{OM}}) dS - \int_{\Omega} \text{Tr}[\underline{\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\epsilon}}] d\Omega = \\
&= \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (\underline{\boldsymbol{\sigma}_n} \cdot \mathbf{L}^{-1} \underline{\boldsymbol{\sigma}_n} + \underline{\boldsymbol{\epsilon}_{OM}} \cdot \mathbf{L} \underline{\boldsymbol{\epsilon}_{OM}}) dS - \int_{\Omega} \text{Tr}[\underline{\boldsymbol{\epsilon}\mathbf{D}\boldsymbol{\epsilon}}] d\Omega = \\
&= \eta^2(\underline{\boldsymbol{\epsilon}}, \underline{\mathbf{D}}, \underline{\mathbf{L}})
\end{aligned}$$

on a ainsi, $\forall \underline{\boldsymbol{\epsilon}}, \eta^2 \geq 0$ et $\forall \underline{\boldsymbol{\epsilon}}, \eta^2 = 0$ quand \mathbf{L} est tel que $(\underline{\boldsymbol{\sigma}_n}|_{\partial\Omega}) = \mathbf{L}(\underline{\boldsymbol{\epsilon}_{OM}}|_{\partial\Omega})$ avec $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}\boldsymbol{\epsilon}$, c'est-à-dire pour un milieu homogène. Il s'agit en outre d'une forme quadratique en $\boldsymbol{\epsilon}$, qu'on peut donc formellement écrire $\eta^2 = \text{Tr}[\underline{\boldsymbol{\epsilon}}\mathcal{A}(\mathbf{D}, \mathbf{L})\underline{\boldsymbol{\epsilon}}]$. Trouver \mathbf{D} à partir de \mathbf{L} peut alors s'écrire $\min_{\mathbf{D}} \|\mathcal{A}(\mathbf{D}, \mathbf{L})\|$, mais cela conduit à un problème non-linéaire qui n'est peut-être pas justifié pour un seul post-traitement des quantités $(\underline{F}^M, \underline{W}^M)$ afin de reconstruire des champs intérieurs $(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\epsilon})$.

Notons enfin qu'une reconstruction de champs $\boldsymbol{\sigma}$ de ce type n'est pas sans rapport avec la reconstruction d'un champ statiquement admissible utilisé en calcul d'erreur classique. Elle s'apparente à une version à mi chemin entre une technique analytique (utilisation de champ de Trefftz, éventuellement à un ordre plus élevé, au lieu d'un sous-découpage des éléments finis [Coffignal *et al.* 83, Pelle *et al.* 89]) et numérique (écriture du raccord faible par une formulation variationnelle, au lieu d'un représentation aux points de sur-intégration, ce qui conduit à une contrainte qui n'est pas rigoureusement admissible [Babuska *et al.* 94]). Pour mettre en œuvre un indicateur de type erreur en relation de comportement, il reste alors la reconstruction d'un champ cinétiquement admissible sur l'ensemble de la structure. La version non rigoureusement admissible de ce dernier est fournie par la déformation macro reconstruite $\boldsymbol{\epsilon}$. La mesure de l'erreur en relation de comportement se faisant alors avec le comportement micro $\mathbf{D}_{\text{loc}}(M) : \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{D}_{\text{loc}}\boldsymbol{\epsilon}\|_{\mathbf{D}_{\text{loc}}^{-1}}^2 = \frac{1}{2} \text{Tr}[(\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{D}_{\text{loc}}\boldsymbol{\epsilon})\mathbf{D}_{\text{loc}}^{-1}(\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{D}_{\text{loc}}\boldsymbol{\epsilon})]$. Une telle démarche, peu coûteuse, devrait s'avérer suffisante pour contrôler l'erreur sur l'échelle macro. Il se peut par contre qu'elle soit trop pénalisante (indice d'efficacité trop élevé) pour un contrôle à l'échelle micro, et qu'une reconstruction plus "riche" soit alors nécessaire (au niveau des éléments et pas seulement au niveau des sous-structures). La redesccente à l'échelle micro au niveau d'une sous-structure s'apparente par contre au type de calcul nécessité par l'utilisation d'un extracteur pour la construction d'une erreur locale [Ladevèze *et al.* 99]. Il doit ainsi exister des liens entre calcul macro et erreur de pollution d'une part, et entre relocalisation micro, extracteur et erreur locale d'autre part.

Quelques autres démarches de la littérature. On peut trouver dans d'autres travaux la même idée que celle développée précédemment, à savoir le couplage d'une méthode numérique et d'une stratégie mécanique qui tire parti des propriétés du problème, afin d'augmenter les performances de la méthode. La méthode numérique en question est la technique de décomposition de domaine multiéchelle, la stratégie mé-

canique, la technique d'homogénéisation et les propriétés du problème, la nécessité de décrire la structure à l'échelle micro.

Une méthode qui n'est pas sans connection avec celle présentée, est développée dans [Fish et Belsky 95] : il s'agit d'utiliser un problème homogénéisé en tant que niveau de plus grossier dans une technique multigrille. L'opérateur de prolongation est alors spécialement choisi pour redonner une homogénéisation périodique sur la grille la plus grossière. Là encore, le problème de référence est celui décrit à l'échelle fine. Remarquons cependant que cette technique nécessite quand même un traitement particulier à la transition entre deux régions où les cellules de sont pas identiques (notion de "cellule de transition"). Bien entendu, quand on cherche à déterminer une approximation du problème de référence, différentes techniques peuvent être utilisées comme l'homogénéisation classique, ou par des méthodes plus ou moins dédiées à une application, qui couplent plus ou moins les échelles locales et globales, comme par exemple dans [Zohdi *et al.* 01].

Un dernier exemple, cette fois-ci provenant des méthodes de décomposition de domaine, est celui de l'adaptation des méthodes existantes au cas des structures hétérogènes. Une telle démarche a été réalisée dans la méthode FETI [Rixen et Farhat 98, Klawonn *et al.* 01], et dans la méthode BDD [Mandel et Brezina 96].

Quelques questions en suspend sur ce thème. Dans la présentation précédente, on s'est principalement intéressé au cas du comportement linéaire. La présence de deux échelles et de l'homogénéisation dans le cas non-linéaire est un sujet d'importance, et qui est encore assez ouvert. Dans le cas des non-linéarités matérielles (de type plasticité ou visco-plasticité), le cadre de la LATIN permet de poursuivre la démarche dans le même esprit (l'étape résolvant les problèmes globaux continuant à être linéaire). En particulier, la description d'une première version de la méthode peut être trouvée dans [Ladevèze et Dureisseix 97] ; les grands traits consistent à se placer dans une situation où l'homogénéisation n'est pas réalisée une fois pour toute (comme dans l'analyse inverse qui consiste à identifier un modèle *a priori*) mais au fur et à mesure dans le "direction" où la structure est sollicitée. La mise en œuvre dans ce cadre n'a pas encore été réalisée. Par contre, le cas de la non-linéarité aux interfaces a déjà été abordée dans le cadre du contact. Le question est alors celle du comportement à plusieurs échelles pour ce type de non-linéarités. La partie suivante porte sur quelques travaux concernant ces problèmes de contact.

3 Exemple de non-linéarité d'interface : le cas du contact

Remarquons tout d'abord que le traitement des problèmes de contact par des méthodes de décomposition de domaine ne traite pas forcément les zones de contact au travers des interfaces. Dans le cas du multicontact (par exemple, les milieux granulaires), il peut être intéressant de traiter ces surfaces de contact à l'intérieur des sous-domaines (voir par exemple [Alart *et al.* 00, Barboteu *et al.* 01]).

Par contre, si les surfaces de contact ne sont pas majoritaires, il peut être utile de traiter le contact au travers d'un comportement particulier d'interface. Nous nous placerons dans ce cas de figure pour la suite ; les champs d'effort au travers de l'interface

doivent être en équilibre : $\underline{F} + \underline{F}' = 0$, soit $\underline{F} = -\underline{F}'$, et, avec le saut de déplacement $\underline{V} = \underline{W} - \underline{W}'$, ils doivent vérifier un comportement local du type $\mathcal{R}(\underline{V}, \underline{E}) = 0$ où \mathcal{R} est plus ou moins régulière. En particulier, dans le cas du contact sans frottement, et sans adhésion, avec la notation $\underline{F} = F_n \underline{n} + \underline{F}_t$ et $\underline{V} = V_n \underline{n} + \underline{V}_t$ (où \underline{n} est la normale extérieure au premier sous-domaine, et où l'indice t désigne les quantités tangentielles), les conditions de Kuhn-Tucker doivent être vérifiées :

$$F_n \geq 0 \quad V_n \geq 0 \quad F_n V_n = 0$$

(les seules conditions tangentielles étant $\underline{F}_t = 0$). Le traitement (non régularisé) de ce comportement peut être réalisé de différentes manières. Par exemple, pour une méthode primale, la condition de positivité du saut de déplacement peut être rangée dans les contraintes d'admissibilité des champs, les autres ne sont pas vérifiées à chaque itération mais participent au résidu r :

- si $V_n = 0$, $r = \langle F_n \rangle_-$
- si $V_n > 0$, $r = F_n$

Le traitement peut être fait de façon symétrique pour une méthode duale. L'avantage d'une méthode mixte est de ne pas dissymétriser le comportement au profit d'un des deux champs.

Dans le cas d'une méthode de décomposition de domaine multiéchelle, la question de pouvoir écrire le comportement sur les deux échelles se pose. En effet, un comportement non-linéaire couple les deux échelles et, par exemple dans le cas du contact précédent, les conditions de Kuhn-Tucker ne sont pas forcément vérifiées pour les champs macroscopiques. Différentes approches peuvent être mises en place, notamment celles issues des techniques multigrilles, voir [Alart et Lebon 93] par exemple.

Cas de l'approche mixte micro-macro En traitant l'ensemble des équations portant sur les quantités d'interface comme étant le comportement de ces dernières, les équations d'admissibilité sont inchangées. Seule l'étape locale est modifiée. Rappelons que le problème consiste à trouver le couple $(\hat{\underline{W}}, \hat{\underline{F}})$ connaissant $(\underline{W}, \underline{F})$ et vérifiant

- le comportement (sur la partie normale)

$$(\hat{\underline{F}}^M + \hat{\underline{F}}^m) \cdot \underline{n} \geq 0, (\hat{\underline{W}}^M + \hat{\underline{W}}^m) \cdot \underline{n} \geq 0, (\hat{\underline{F}}^M + \hat{\underline{F}}^m) \cdot (\hat{\underline{W}}^M + \hat{\underline{W}}^m) = 0,$$
- la direction de recherche

$$\hat{\underline{F}}^M - \underline{F}^M - k^M (\hat{\underline{W}}^M - \underline{W}^M) = 0, \hat{\underline{F}}^m - \underline{F}^m - k^m (\hat{\underline{W}}^m - \underline{W}^m) = 0$$

Traiter ce problème couplé entre les échelles macro (M) et micro (m) peut être réalisé avec une méthode itérative globale par interface [Ladevèze et Dureisseix 97]. Un cas particulier assez simple proposé aussi dans [Ladevèze et Dureisseix 97] consiste cependant à lier les paramètres de direction de recherche de façon à avoir $k^M = k^m = k$. Ceci permet de traiter l'interface directement sur les quantités totales $\hat{\underline{F}}$ et $\hat{\underline{W}}$, de façon similaire à l'approche monoéchelle. L'avantage au niveau de l'implantation est de conserver la modularité de l'étape locale et de bénéficier des travaux déjà réalisés en monoéchelle [Champaney *et al.* 99] pour le traitement du contact avec frottement, des discrétisations non conformes et d'autres non-linéarités d'interface ...

C'est en procédant de cette manière que les premiers résultats en contact frottant ont été obtenus en multiéchelle mixte par Anthony Nouy et Pierre Ladevèze. Pour ma

part, j'ai seulement apporté des résultats dans le cas de l'approche duale, qui fait l'objet de la partie suivante.

Cas de l'approche duale. Les travaux menés en collaboration avec Charbel Farhat de l'Université du Colorado, à Boulder, USA, ont permis quant à eux de traiter le cas du contact dans une approche duale multiéchelle, ce qui a conduit à l'approche FETI-C.

Le principe consiste ici à continuer à utiliser l'algorithme du gradient sur un problème non-linéaire. Les quantités mises en exergue sont toujours les efforts aux interfaces (sous forme de multiplicateurs de Lagrange) mais cette fois-ci, la “projection” dans l'espace des efforts admissibles a changé : outre l'équilibre local aux interfaces et l'équilibre global des sous-domaines flottants, ils doivent satisfaire les conditions de positivité de la pression aux interfaces de contact.

L'originalité de cette approche est d'utiliser le problème macro pour réaliser cette projection (de façon itérative, mais qui converge en un nombre fini d'itérations) ; ce problème grossier de contact s'est avéré efficace pour guider la détection de la surface de contact active, puisque des convergences similaires à celles de la méthode FETI sur des problèmes linéaires ont été obtenus (optimalité et extensibilité) même en l'absence d'une phase de *line-search*, classique en optimisation. Ce traitement du problème grossier, comme la construction d'une méthode à un seul niveau d'itération sont des originalités par rapport à d'autres méthodes dérivant de la programmation quadratique, comme [Dostal *et al.* 98, Dostal *et al.* 00].

Plus de détails sur cette approche se trouvent dans le *preprint* suivant [Dureisseix et Farhat 01].

A numerically scalable domain decomposition method for the solution of frictionless contact problems

D. Dureisseix¹ and C. Farhat^{2,*}

¹ LMT-Cachan (École Normale Supérieure de Cachan/CNRS/Université Paris 6)
61 Avenue du Président Wilson, F-94235 Cachan CEDEX, FRANCE

² Department of Aerospace Engineering Sciences and Center for Aerospace Structures
University of Colorado, Campus Box 429, Boulder, CO 80309-0429, USA

SUMMARY

We present a domain decomposition method with Lagrange multipliers for solving iteratively frictionless contact problems. This method, which is based on the FETI method and therefore is named here the FETI-C method, incorporates a coarse contact system that guides the iterative prediction of the active zone of contact. We demonstrate numerically that this method is numerically scalable with respect to both the problem size and the number of subdomains. Copyright © 2001 John Wiley & Sons, Ltd.

KEY WORDS: contact; domain decomposition; FETI; scalability

1. INTRODUCTION

Contact problems are frequent in structural analysis, particularly when investigating the assembly of substructures. They are characterized by constraints such as non-penetration conditions, and an active area of contact — that is, an area where contact effectively occurs — that is unknown *a priori*. For these reasons, these problems lead to stiff non-linear systems of equations. Even in the absence of friction, several approaches exist for solving static contact problems [20, 34, 32]. In most of them, the numerical methods that are employed for enforcing the contact constraints can be grouped into Lagrange multiplier and penalty methods [33].

The penalty methods [19, 2] are closely related to the regularization of the contact constraints. They are usually formulated in terms of the displacement variables, and therefore are primal methods. They allow treating contact as a material behavior, as exemplified by the method of joint finite elements [1]. Penalty methods can experience various numerical difficulties, especially ill-conditioning, when a too large or too small penalty parameter is introduced.

Lagrange multiplier methods are dual methods where the multipliers, which represent the contact reaction forces, are introduced in order to enforce exactly the non-penetration conditions. These

*Correspondence to: Department of Aerospace Engineering Sciences and Center for Aerospace Structures, University of Colorado, Campus Box 429, Boulder, CO 80309-0429, USA

methods can be further classified into (a) trial and error approaches for determining the active zone of contact, (b) mathematical programming techniques [21, 18], (c) search gradient methods [25, 10, 27, 28], and (d) a combination of all of these approaches. Augmented Lagrange multiplier methods [3, 22, 26, 6] result in mixed formulations involving both displacement and force unknowns. The numerical solution schemes underlying both the Lagrange multiplier and augmented Lagrange multiplier methods are often related to the Uzawa algorithm [4, 31, 8].

Recently, various forms of domain decomposition have been introduced in the formulation of contact problems in order to speedup the solution of these problems, particularly when they are large-scale, on both serial and parallel computing platforms [7, 11, 5]. Of particular interest is the approach proposed in [11], not only because of its numerous innovative concepts, but also because it is based on the FETI domain decomposition method [12, 16, 17], which has well established numerical scalability properties for both second-order elasticity [15, 23] and fourth-order plate and shell problems [14, 13, 24]. We remind the reader that an iterative method is said to be numerically scalable if its convergence properties — for example, the number of iterations for convergence — are asymptotically independent of the size of the problem to be solved.

The objective of this paper is to present an alternative domain decomposition method for the solution of frictionless contact problems that is also based on the FETI method, and which for this reason is named the FETI-C method (as in FETI-Contact).

FETI-C is in many aspects different from the domain decomposition method recently proposed in [11] for solving frictionless contact problems. Indeed, the solution strategy described in [11] is organized around two levels of iterations, the first one aimed at satisfying the contact conditions, and the second one at satisfying, among other things, the equilibrium conditions. In the outer-iterations, an active zone of contact is updated by a mathematical programming technique. In the inner-iterations, a minimal subregion of the previously predicted area of contact is frozen and a state of equilibrium is sought after. In the FETI-C method described in this paper, both contact and equilibrium conditions are updated by a single iterative procedure. Most importantly, the FETI-C method incorporates an auxiliary “coarse contact problem” which not only guides the prediction of the active zone of contact, but also appears to ensure the numerical scalability of the proposed solution method with respect to both the number of subdomains, and the size of the problem. These numerical scalability properties are demonstrated numerically in this paper.

For simplicity, and without any loss of generality, we consider here only the case where the subdomains in contact have matching discrete interfaces. We also assume that all structural components undergo small deformations as well as small displacements and rotations. In Section 2, we review the FETI method in order to keep this paper as self-contained as possible. In Section 3, we overview the formulation of the frictionless contact problem. In Section 4, we highlight the suitability of the FETI framework to the solution of contact problems, and describe the FETI-C non-linear solver. In Section 5, we validate this solver using sample two- and three-dimensional frictionless contact problems and demonstrate numerically its numerical scalability with respect to both the problem size and the number of subdomains. Finally, we conclude this paper in Section 6.

2. AN OVERVIEW OF THE FETI METHOD

2.1. Domain decomposition with Lagrange multipliers

The FETI method [12, 16, 17, 14, 13] is a *non-overlapping* domain decomposition or substructuring method with Lagrange multipliers. It was originally developed for solving efficiently on parallel processors large-scale linear or linearized systems of equations arising from the discretization of structural mechanics problems defined on a domain Ω . Such a system of equations can be written as

$$\mathbf{K}_g \mathbf{u}_g = \mathbf{f}_g \quad (1)$$

where for a large class of applications, \mathbf{K}_g is a symmetric positive definite or semi-definite matrix constructed from the assembly of element level stiffness matrices by introducing a global numbering of the degrees of freedom (d.o.f.) indicated here by the subscript g , \mathbf{u}_g is the vector of generalized displacements, and \mathbf{f}_g the vector of prescribed forces. In the FETI method, the given domain Ω is partitioned into N_s non-overlapping subdomains $\Omega^{(s)}$, the equilibrium equations are written at the subdomain level, and Lagrange multipliers are introduced at the subdomain interfaces to enforce the compatibility of the displacement field. In such an approach, the initial mechanical problem is essentially reformulated as a saddle point problem whose Euler equations are given by [12]

$$\delta_{v^{(s)}, \mu} \mathcal{L}(v^{(s)}, \mu) = 0 \quad (2)$$

where $\delta_{v^{(s)}, \mu}$ designates the variation with respect to the arguments $v^{(s)}$ and μ , and \mathcal{L} is the Lagrangian of the problem and can be written as

$$\mathcal{L}(v^{(s)}, \mu) = \sum_{s=1}^{N_s} \left(\frac{1}{2} v^{(s)T} \mathbf{K}^{(s)} v^{(s)} - v^{(s)T} \mathbf{f}^{(s)} \right) + \mu^T \sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}^{(s)} v^{(s)} \quad (3)$$

Here, the superscript s designates a subdomain quantity, the superscript T denotes the transpose of a quantity, $v^{(s)}$ and μ are some admissible subdomain displacement and Lagrange multiplier fields, respectively, $\mathbf{K}^{(s)}$ is the subdomain stiffness matrix, $\mathbf{f}^{(s)}$ the subdomain vector of prescribed forces, and $\mathbf{B}^{(s)}$ the signed Boolean matrix that extracts from a subdomain vector $v^{(s)}$ its signed (\pm) restriction to the subdomain interface boundary. The Euler equations (2) lead to the following constrained problem which is equivalent to problem (1)

$$\mathbf{K}^{(s)} \mathbf{u}^{(s)} = \mathbf{f}^{(s)} - \mathbf{B}^{(s)T} \boldsymbol{\lambda} \quad s = 1, \dots, N_s \quad (4)$$

$$\sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}^{(s)} \mathbf{u}^{(s)} = 0 \quad (5)$$

where $\mathbf{u}^{(s)}$ and $\boldsymbol{\lambda}$ are respectively the subdomain displacements and Lagrange multipliers that are the stationary points of \mathcal{L} . The mechanical interpretation of equations (4) and (5) is graphically depicted in Figure 1: each of equations (4) expresses the subdomain equilibrium under the action of the prescribed forces $\mathbf{f}^{(s)}$ and the subdomain interface forces $\mathbf{B}^{(s)T} \boldsymbol{\lambda}$, and equation (5) expresses the compatibility of the subdomain displacement fields at the subdomain interfaces. There is one compatibility equation for each pair of d.o.f. that connect at a subdomain interface. Once $\boldsymbol{\lambda}$ is determined, the subdomain displacement fields can be recovered by solving concurrently the equilibrium equations to obtain

$$\mathbf{u}^{(s)} = \mathbf{K}^{(s)+} \left(\mathbf{f}^{(s)} - \mathbf{B}^{(s)T} \boldsymbol{\lambda} \right) + \mathbf{R}^{(s)} \boldsymbol{\alpha}^{(s)} \quad (6)$$

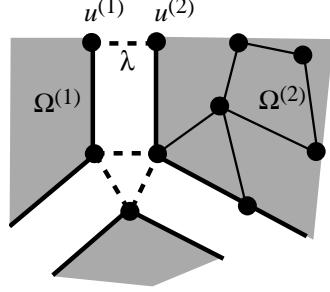


Figure 1. Interface assembly in the FETI formulation

where $\mathbf{K}^{(s)+}$ denotes the inverse of $\mathbf{K}^{(s)}$ if $\Omega^{(s)}$ has sufficient Dirichlet boundary conditions to prevent $\mathbf{K}^{(s)}$ from being singular, or a generalized inverse of $\mathbf{K}^{(s)}$ if $\Omega^{(s)}$ is a floating subdomain — that is, a subdomain without sufficient displacement boundary conditions to prevent $\mathbf{K}^{(s)}$ from being singular. In the latter case, the columns of $\mathbf{R}^{(s)}$ represent the rigid body modes of $\Omega^{(s)}$, i.e. $\mathbf{R}^{(s)} = \ker \mathbf{K}^{(s)}$, and $\boldsymbol{\alpha}^{(s)}$ is the set of amplitudes that specifies the contribution of the null space $\mathbf{R}^{(s)}$ to the solution $\mathbf{u}^{(s)}$. These coefficients can be determined by requiring that each subdomain problem be mathematically solvable — that is, each floating subdomain be self-equilibrated — which can be written as

$$\mathbf{R}^{(s)T} (\mathbf{f}^{(s)} - \mathbf{B}^{(s)T} \boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{0} \quad (7)$$

Substituting equation (6) into the compatibility equation (5) and exploiting the solvability condition (7) transforms the constrained problem (4,5) into the interface problem

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}_I & -\mathbf{G}_I \\ -\mathbf{G}_I^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\lambda} \\ \boldsymbol{\alpha} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{d} \\ -\mathbf{e} \end{bmatrix} \quad (8)$$

where

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_I &= \sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}^{(s)} \mathbf{K}^{(s)+} \mathbf{B}^{(s)T} \\ \mathbf{d} &= \sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}^{(s)} \mathbf{K}^{(s)+} \mathbf{f}^{(s)} \\ \mathbf{G}_I &= [\mathbf{B}^{(1)} \mathbf{R}^{(1)} \dots \mathbf{B}^{(N_s)} \mathbf{R}^{(N_s)}] \\ \boldsymbol{\alpha} &= [\boldsymbol{\alpha}^{(1)T} \dots \boldsymbol{\alpha}^{(N_s)T}]^T \\ \mathbf{e} &= [\mathbf{f}^{(1)T} \mathbf{R}^{(1)} \dots \mathbf{f}^{(N_s)T} \mathbf{R}^{(N_s)}]^T \end{aligned} \quad (9)$$

Because $\boldsymbol{\lambda}$ is a dual variable to the primal variables $\mathbf{u}^{(s)}$, the interface problem (8) is called a dual interface problem. This interface problem is best solved by an iterative algorithm, the choice of which completes the description of the original FETI method.

2.2. Iterative solution of the dual interface problem

In the FETI method, the interface problem (8) is solved by a preconditioned conjugate projected gradient (PCPG) algorithm. More specifically, the indefinite interface problem (8) is transformed into a semi-definite system of equations by eliminating the self-equilibrium condition $\mathbf{G}_I^T \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{e}$ using the splitting

$$\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{\lambda}^0 + \mathbf{P}(\mathbf{Q})\bar{\boldsymbol{\lambda}} \quad (10)$$

where $\boldsymbol{\lambda}^0$ is a particular solution of $\mathbf{G}_I^T \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{e}$ of the form

$$\boldsymbol{\lambda}^0 = \mathbf{Q}\mathbf{G}_I(\mathbf{G}_I^T \mathbf{Q}\mathbf{G}_I)^{-1}\mathbf{e} \quad (11)$$

and $\mathbf{P}(\mathbf{Q})$ is a projection matrix defined for any given matrix \mathbf{Q} by

$$\mathbf{P}(\mathbf{Q}) = \mathbf{I} - \mathbf{Q}\mathbf{G}_I(\mathbf{G}_I^T \mathbf{Q}\mathbf{G}_I)^{-1}\mathbf{G}_I^T \quad (12)$$

Note that for any matrix \mathbf{Q} , $\mathbf{G}_I^T \mathbf{P}(\mathbf{Q}) = \mathbf{0}$.

Applying the splitting (10) to the interface problem (8) leads to the alternative symmetric positive semi-definite interface problem

$$\mathbf{P}(\mathbf{Q})^T \mathbf{F} \mathbf{P}(\mathbf{Q}) \bar{\boldsymbol{\lambda}} = \mathbf{P}(\mathbf{Q})^T (\mathbf{d} - \mathbf{F} \boldsymbol{\lambda}^0) \quad (13)$$

which can be solved by a standard PCG algorithm.

Two different preconditioners have been proposed: the mathematically optimal Dirichlet preconditioner $\bar{\mathbf{F}}_I^{D^{-1}}$ introduced in [15], and the computationally economical lumped preconditioner $\bar{\mathbf{F}}_I^{L^{-1}}$ proposed in earlier works [12, 16]. If each subdomain stiffness matrix is partitioned as

$$\mathbf{K}^{(s)} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{ii}^{(s)} & \mathbf{K}_{ib}^{(s)} \\ \mathbf{K}_{ib}^{(s)T} & \mathbf{K}_{bb}^{(s)} \end{bmatrix} \quad (14)$$

where the subscripts i and b designate the subdomain interior and interface boundary d.o.f., respectively, then the Dirichlet preconditioner can be written as

$$\bar{\mathbf{F}}_I^{D^{-1}} = \mathbf{W} \left(\sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}^{(s)} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{S}_{bb}^{(s)} \end{bmatrix} \mathbf{B}^{(s)T} \right) \mathbf{W} \quad (15)$$

and the lumped preconditioner is given by

$$\bar{\mathbf{F}}_I^{L^{-1}} = \mathbf{W} \left(\sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}^{(s)} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}_{bb}^{(s)} \end{bmatrix} \mathbf{B}^{(s)T} \right) \mathbf{W} \quad (16)$$

In the above expressions of $\bar{\mathbf{F}}_I^{D^{-1}}$ and $\bar{\mathbf{F}}_I^{L^{-1}}$, \mathbf{W} is a diagonal matrix storing in each of its entries the inverse of the multiplicity of an interface d.o.f. [17, 14] — that is, the inverse of the number of subdomains to which an interface d.o.f. belongs — and $\mathbf{S}_{bb}^{(s)}$ is the following subdomain primal Schur complement

$$\mathbf{S}_{bb}^{(s)} = \mathbf{K}_{bb}^{(s)} - \mathbf{K}_{ib}^{(s)T} \mathbf{K}_{ii}^{(s)-1} \mathbf{K}_{ib}^{(s)} \quad (17)$$

Note that $\mathbf{K}_{ii}^{(s)}$ is non-singular since it corresponds to the system matrix with all interface boundaries fixed and thus $\mathbf{K}_{ii}^{(s)-1}$ exists. Both Dirichlet and lumped preconditioners have been recently extended in [29] for addressing more efficiently heterogeneous problems. In particular, it was shown in [29] that such extensions can be simply designed by redefining appropriately the scaling matrix \mathbf{W} .

The iterative FETI solver with $\mathbf{Q} = \mathbf{I}$ is summarized in Table I. A more detailed description of this algorithm can be found in [17].

Table I. The FETI PCPG algorithm

Initialize			
λ^0	=	$G_I (G_I^T G_I)^{-1} e$	
r^0	=	$d - F_I \lambda^0$	
Iterate $k = 1, 2, \dots$ until convergence			
Project	w^{k-1}	=	$P^T r^{k-1}$
Precondition	z^{k-1}	=	$\bar{F}_I^{-1} w^{k-1}$
Re-project	y^{k-1}	=	$P z^{k-1}$
Conjugate	ζ^k	=	$\frac{y^{k-1T} w^{k-1}}{y^{k-2T} w^{k-2}} \quad (\zeta^1 = 0)$
	p^k	=	$y^{k-1} + \zeta^k p^{k-1} \quad (p^1 = y^0)$
Minimize	η^k	=	$\frac{p^{k-1T} w^{k-1}}{p^{kT} F_I p^k}$
Update	λ^k	=	$\lambda^{k-1} + \eta^k p^k$
Compute residual	r^k	=	$r^{k-1} - \eta^k F_I p^k$

Remarks

- For most problems, the simplest choice $Q = I$ is computationally the most effective one. Choosing $Q = Q^D = \bar{F}_I^{D-1}$ or $Q = Q^L = \bar{F}_I^{L-1}$ is recommended for heterogeneous problems [17].
- From Eqs. (6,9,12) and Table I, it follows that

$$\begin{aligned}
\sum_{s=1}^{N_s} B^{(s)} u^{(s)} &= d - F_I \lambda + G_I \alpha \\
&= r + G_I \alpha \\
&= P^T r \\
&= w
\end{aligned} \tag{18}$$

which shows that at each iteration k , the projected residual w^{k-1} is equal to the jump of the $(k-1)$ -th iterate displacement field across the subdomain interfaces.

- At each FETI PCPG iteration, a matrix-vector product of the form $P^T r^{k-1}$ or $P z^{k-1}$ incurs the solution of an auxiliary problem of the form

$$(G_I^T G_I) x^{k-1} = b^{k-1} \tag{19}$$

Hence, the matrix $G_I^T G_I$ (and more generally the matrix $G_I^T Q G_I$) defines a coarse problem of size at most equal to $6N_s$, and whose solution couples all the subdomain computations, propagates the error globally, and accelerates convergence. It is because of this coarse problem that for second-order elasticity problems, when the Dirichlet preconditioner is used, the condition number of the FETI interface problem (13) can be bounded by a polylogarithmic function of H/h .

as follows

$$\kappa = O\left(1 + \log^2\left(\frac{H}{h}\right)\right) \quad (20)$$

where H and h denote the subdomain and mesh sizes, respectively. The above conditioning result also holds for fourth-order plate and shell problems when the coarse problem (19) is augmented with the so-called subdomain “corner” modes [14, 13, 24]. We remind the reader that a bound such as (20) proves the numerical scalability of the FETI method with respect to both the problem size and the number of subdomains [23, 24] — that is, its ability to solve larger problems using a larger number of subdomains in almost a constant number of iterations. The parallel scalability of the FETI method — that is, its suitability for massively parallel computing — has also been demonstrated on a large number of massively parallel processors for several realistic structural and structural dynamics problems [17, 13].

2.3. Relevance to contact problems

The subdomains $\Omega^{(s)}$ associated with the FETI method can be viewed as substructures in a state of “perfect” contact. This perfect contact is defined and governed by the compatibility equation (5), which states that the jumps across the substructure interfaces of both the normal and tangential components of the displacement field must vanish. In the FETI method, this perfect contact condition is enforced by discrete Lagrange multipliers whose values are determined by the PCPG algorithm summarized in Table I.

The above observations explain our motivation to extend the FETI method to the solution of contact problems whose governing laws are summarized next.

3. THE FRICTIONLESS CONTACT PROBLEM

Let Ω denote the initial state of a linear elastic body, $\partial\Omega_C$ the part of its boundary that is a potential area of contact, n_C the outward normal to $\partial\Omega_C$ at a point M , $\partial\Omega'_C$ the potential area of contact with $\partial\Omega_C$ located on the surface of a foundation or another linear elastic body, and $n'_C = -n_C$ the outward normal to $\partial\Omega'_C$ at the point M' facing point M (see Figure 2).

If u denotes the displacement field, the discontinuity of u in the normal direction at point $M \in \partial\Omega_C$ can be written as

$$\begin{aligned} \Delta u(M) &= u(M) \cdot n_C + u(M') \cdot n'_C = u(M) \cdot n_C - u(M') \cdot n_C \\ &= (u(M) - u(M')) \cdot n_C \end{aligned} \quad (21)$$

and the non-penetration condition can be expressed as

$$\Delta u(M) - c(M)^0 \leq 0 \quad (22)$$

where $c(M)^0$ denotes the initial clearance at point M of the undeformed body Ω (see Figure 3), and is assumed to be small.

Let σ denote the stress tensor, $t = \sigma(M)n$ the traction vector at point M , and $t_n = t \cdot n$ the normal component of t . If $\partial\Omega_C$ and $\partial\Omega'_C$ are in contact, the pressure at M is positive, and therefore $t_n \leq 0$ (Figure 4).

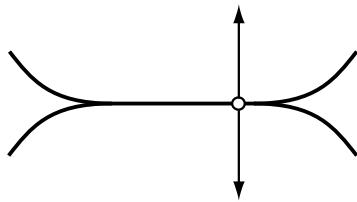


Figure 2. A contact problem

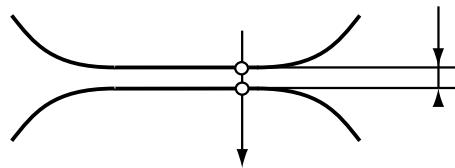
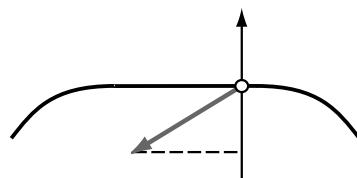


Figure 3. Initial clearance

Figure 4. Contact pressure: $t_n \leq 0$

The contact problem is defined by the unilateral conditions known as the *Signorini-Fichera* type of conditions

- if $\Delta u(M) - c(M)^0 = 0$ then $t_n \leq 0$ and the contact is said to be active.
 - if $\Delta u(M) - c(M)^0 < 0$ then $t_n = 0$ and the contact is said to be inactive.
- (23)

The above relations are equivalent to stating that on $\partial\Omega_C$, the following holds

$$\begin{aligned} t_n &\leq 0 \\ \Delta u(M) - c(M)^0 &\leq 0 \\ t_n \cdot (\Delta u(M) - c(M)^0) &= 0 \end{aligned} \quad (24)$$

4. THE FETI-C METHOD

Our objective is to develop a computationally efficient domain decomposition method for the solution of contact problems that is based on FETI. In this paper, we limit however our attention to frictionless problems. For most domain decomposition methods including FETI, the optimal number of subdomains is dictated by a compromise between several issues related to, among others, computational complexity, memory efficiency, and parallel processing. For this reason, we consider the general case where the number of subdomains N_s is larger than the given number of elastic bodies and foundations — that is, the case where each elastic body itself may be decomposed into several subdomains. This leads us to distinguishing between two types of subdomain interfaces: perfect contact interfaces (called perfect interfaces in the sequel), and potential contact interfaces. We construct the FETI-C method as a modified FETI algorithm that (a) distinguishes between perfect and potential contact interfaces, and (b) enforces the compatibility equation (5) on perfect interfaces and the non-penetration condition (22) as well as the *Signorini-Fichera* conditions (23) on contact interfaces, while (c) satisfying equilibrium and solvability in each subdomain $\Omega^{(s)}$.

4.1. Preliminaries

Let

$$\partial\Omega_P^{(s),p} = \partial\Omega^{(s)} \cap \partial\Omega^{(p)} \quad (25)$$

denote a perfect interface between subdomain $\Omega^{(s)}$ and neighboring subdomain $\Omega^{(p)}$,

$$\partial\Omega_C^{(s),q} = \partial\Omega^{(s)} \cap \partial\Omega^{(q)} \quad (26)$$

denote a potential contact interface between $\Omega^{(s)}$ and its neighbor $\Omega^{(q)}$,

$$\partial\Omega_P^{(s)} = \bigcup_{p=1}^{p=l} \partial\Omega_P^{(s),p} \quad (27)$$

denote the union of all the perfect interfaces attached to subdomain $\Omega^{(s)}$,

$$\partial\Omega_C^{(s)} = \bigcup_{q=1}^{q=m} \partial\Omega_C^{(s),q} \quad (28)$$

denote the union of all the potential contact interfaces attached to subdomain $\Omega^{(s)}$,

$$\Gamma_P = \bigcup_{s=1}^{s=N_s} \partial\Omega_P^{(s)} \quad (29)$$

denote the set of all the perfect interfaces associated with the domain decomposition,

$$\Gamma_C = \bigcup_{s=1}^{s=N_s} \partial\Omega_C^{(s)} \quad (30)$$

denote the set of all potential contact interfaces and is obtained from the initial configuration of the bodies, and

$$\Gamma_I = \bigcup_{s=1}^{s=N_s} \partial\Omega^{(s)} = \Gamma_P \cup \Gamma_C \quad (31)$$

denote the global interface associated with the domain decomposition of all given bodies. Using this notation, the edge-wise partition of the interface boundary $\partial\Omega^{(s)}$ of subdomain $\Omega^{(s)}$ can be written as

$$\begin{aligned}\partial\Omega^{(s)} &= \partial\Omega_P^{(s)} \cup \partial\Omega_C^{(s)} \\ &= \left\{ \bigcup_{p=1}^{p=l} \partial\Omega_P^{(s),p} \right\} \cup \left\{ \bigcup_{q=1}^{q=m} \partial\Omega_C^{(s),q} \right\}\end{aligned}\quad (32)$$

Let N_I denote the total number of kinematic equations defined on Γ_I for the given contact problem, $N_{s,p}$ denote the total number of displacement d.o.f. attached to the perfect interface $\partial\Omega_P^{(s),p}$, and $N_{s,q}$ the total number of displacement d.o.f. attached to the potential contact interface $\partial\Omega_C^{(s),q}$.

To each perfect interface $\partial\Omega_P^{(s),p}$, we associate the matrix $b_P^{(s),p} \in \mathcal{R}^{N_I \times N_{s,p}}$ defined by

$$b_P^{(s),p} v_P^{(s),p} = \begin{cases} \pm v_P^{(s),p} & \text{on } \partial\Omega_P^{(s),p} \\ 0 & \text{elsewhere on } \Gamma_I \end{cases}\quad (33)$$

where $v^{(s)}$ is a generic vector defined in subdomain $\Omega^{(s)}$, $v_P^{(s),p}$ denotes its trace on the perfect interface $\partial\Omega_P^{(s),p}$, and the sign (\pm) is defined by the orientation of the outward normal to $\partial\Omega_P^{(s),p}$. Hence, $b_P^{(s),p}$ is a signed Boolean matrix. For example, if all the interior d.o.f. of the subdomain $\Omega^{(s)}$ are numbered first, and all the interface boundary d.o.f. of this subdomain are numbered last according to the edge-wise partition (32), the signed Boolean matrix $B^{(s)}$ introduced in Section 2.1 for the case without contact can be written as

$$B^{(s)} = [\mathbf{0} \quad B_I^{(s)}] \quad (34)$$

where

$$B_I^{(s)} = [b_P^{(s),1} \quad \dots \quad b_P^{(s),l}] \quad (35)$$

To each potential contact interface $\partial\Omega_C^{(s),q}$, we associate the matrix $b_C^{(s),q} \in \mathcal{R}^{N_I \times N_{s,q}}$ defined by

$$(b_C^{(s),q} v_C^{(s),q})_M = \begin{cases} (\mathbf{n}_C^{(s),q^T})_M (v_C^{(s),q})_M & \text{on } \partial\Omega_C^{(s),q} \\ 0 & \text{elsewhere on } \Gamma_I \end{cases}\quad (36)$$

where $\mathbf{n}_C^{(s),q}$ denotes the vector of outward normals to $\partial\Omega_C^{(s),q}$ at each point $M \in \partial\Omega_C^{(s),q}$, and the subscript M designates the subvector or entry associated with node M . In Eq. (36) and throughout this paper, the subscript M also implies that the stated relation holds at each relevant point M . Note that $b_C^{(s),q}$ is not a Boolean matrix, except when $\partial\Omega_C^{(s),q}$ is parallel to a reference axis.

Hence, for contact problems, we generalize the matrix $B^{(s)}$ introduced in Eq. (3) to account for the zones of potential contact, and therefore transform Eq. (35) into

$$B_I^{(s)} = \left[[b_P^{(s),1} \quad \dots \quad b_P^{(s),l}] \quad [b_C^{(s),1} \quad \dots \quad b_C^{(s),m}] \right] \quad (37)$$

At each node $M \in \partial\Omega_C^{(s),q}$, and for each interface $\partial\Omega_C^{(s),q'}$ that has the potential of getting in contact with $\partial\Omega_C^{(s),q}$, we introduce one potential Lagrange multiplier along the normal direction $n_C^{(s),q}$ to $\partial\Omega_C^{(s),q}$. Such a Lagrange multiplier represents a contact force in the direction $n_C^{(s),q}$.

In the case of contact, the governing subdomain equations (4,5) become

$$\mathbf{K}^{(s)} \mathbf{u}^{(s)} = \mathbf{f}^{(s)} - \tilde{\mathbf{B}}^{(s)T} \boldsymbol{\lambda} \quad s = 1, \dots, N_s \quad (38)$$

$$\sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}^{(s)} \mathbf{u}^{(s)} - \mathbf{c}^0 \geq \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_I \quad (39)$$

where $\tilde{\mathbf{B}}^{(s)}$ differs from $\mathbf{B}^{(s)}$ only when at least one zone of potential contact is inactive (see next section for further details), and \mathbf{c}^0 denotes the extended vector of initial clearances — that is, \mathbf{c}^0 is defined on both Γ_P and Γ_C but set to zero on the perfect interfaces. Note that this definition of \mathbf{c}^0 is chosen so that Eq. (39) contain the expected compatibility relation on the perfect interfaces

$$\sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}^{(s)} \mathbf{u}^{(s)} = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_P \quad (40)$$

From Eq. (39) and Eq. (38), it follows that for contact problems, the jump \mathbf{w} of the displacement field across the subdomain interfaces (see Eq. (18)) is

$$\mathbf{w} = \sum_{s=1}^{N_s} (\mathbf{B}^{(s)} \mathbf{K}^{(s)+} \mathbf{f}^{(s)} - \mathbf{B}^{(s)} \mathbf{K}^{(s)+} \tilde{\mathbf{B}}^{(s)T} \boldsymbol{\lambda}) + \mathbf{G} \boldsymbol{\alpha} - \mathbf{c}^0 \quad (41)$$

In summary, using the notation introduced in this section, we can re-write the contact conditions (24) on each potential contact interface $\partial\Omega_C^{(s),q}$ in terms of FETI variables as follows

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\lambda}_M &\geq 0 \\ \mathbf{w}_M &\leq 0 \\ \boldsymbol{\lambda}_M \mathbf{w}_M &= 0 \end{aligned} \quad (42)$$

Remark

- At a crosspoint between four subdomains, six Lagrange multipliers are usually introduced by the standard FETI method to connect together what has been defined in this paper as perfect interfaces. However, from the presentation made above, it follows that at a crosspoint between four subdomains characterized by four potential contact interfaces, only four Lagrange multipliers can be introduced to represent the potential contact forces (Figure 5).

Next, we lay the foundations of the FETI-C method.

4.2. Discrete maximization problem

The standard FETI dual interface problem (8) can be reformulated as follows

$$\max_{\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{R}^{N_I}, \boldsymbol{\beta} \in \mathcal{R}^{N_R}} \mathcal{C}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\beta}) = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{F}_I \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{d} + \boldsymbol{\beta}^T (\mathbf{G}_I^T \boldsymbol{\mu} - \mathbf{e}) \quad (43)$$

where $\mathcal{C}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\beta})$ is a complementary energy-like functional, N_I has the same meaning as in the previous subsection, and N_R is the total number of subdomain rigid body modes. Indeed, differentiating $\mathcal{C}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\beta})$ with respect to $\boldsymbol{\mu}$ and $\boldsymbol{\beta}$ and computing $(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\alpha})$ as the solution of $(\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial \boldsymbol{\mu}} = 0, \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0)$ leads to the same equations as in (8).

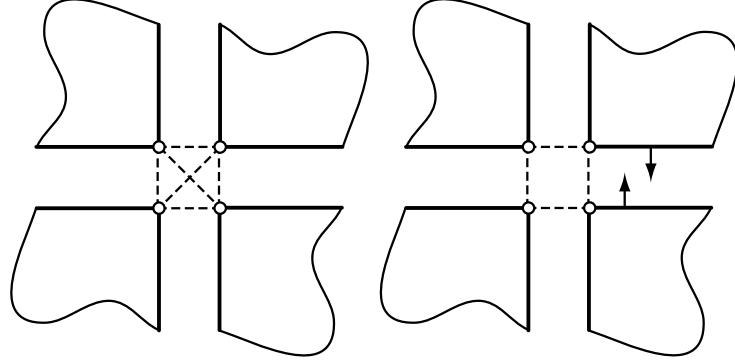


Figure 5. Corner Lagrange multipliers: perfect interfaces (left), contact interfaces (right)

From Eqs. (42), it follows that the standard FETI maximization problem (43) must be modified as follows in order to address contact problems

$$\max_{\tilde{\Gamma}_C, \mu \in \mathcal{R}^{N_I}, \mu_M \geq 0, \beta \in \mathcal{R}^{N_R}} C(\mu, \beta) = -\frac{1}{2} \mu^T \tilde{\mathbf{F}} \mu + \mu^T \mathbf{d} + \beta^T (\tilde{\mathbf{G}}_I^T \mu - \mathbf{e}) \quad (44)$$

where

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{F}} &= \sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}^{(s)} \mathbf{K}^{(s)+} \tilde{\mathbf{B}}^{(s)T} \\ \mathbf{d} &= \sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}^{(s)} \mathbf{K}^{(s)+} \mathbf{f}^{(s)} - \mathbf{c}^0 \\ \tilde{\mathbf{G}}_I &= \left[\begin{array}{ccc} \tilde{\mathbf{B}}^{(1)} \mathbf{R}^{(1)} & \dots & \tilde{\mathbf{B}}^{(N_s)} \mathbf{R}^{(N_s)} \end{array} \right] \end{aligned} \quad (45)$$

$\tilde{\Gamma}_C$ is the set of active contact interfaces — that is, the interfaces where $\mu_M > 0$ — and therefore $\tilde{\Gamma}_C$ verifies

$$\tilde{\Gamma}_C \subset \Gamma_C \quad (46)$$

$\mathbf{B}^{(s)}$ has the same pattern as in Eq. (34), $\mathbf{B}_I^{(s)}$ is given in Eq. (37),

$$\tilde{\mathbf{B}}^{(s)} = \left[\begin{array}{cc} \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{B}}_I^{(s)} \end{array} \right] \quad (47)$$

$$\tilde{\mathbf{B}}_I^{(s)} = \left[\begin{array}{cccc} [b_P^{(s),1} & \dots & b_P^{(s),l}] & [\tilde{b}_C^{(s),1} & \dots & \tilde{b}_C^{(s),m}] \end{array} \right] \quad (48)$$

and

$$(\tilde{\mathbf{b}}_C^{(s),q} \mathbf{v}_C^{(s),q})_M = \begin{cases} (b_C^{(s),q} \mathbf{v}_C^{(s),q})_M & \text{if } M \in \tilde{\Gamma}_C \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (49)$$

Let \tilde{w} be defined as follows

$$\tilde{w} = \begin{cases} w & \text{on } \Gamma_P \cup \tilde{\Gamma}_C \\ \langle w_M \rangle_+ & \text{on } \Gamma_C \setminus \tilde{\Gamma}_C \end{cases} \quad (50)$$

where w is the jump of the displacement field across the subdomain interfaces as expressed in Eq. (41), and

$$\langle a \rangle_+ = \begin{cases} a & \text{if } a > 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (51)$$

From the second of Eqs. (42), it follows that if λ is solution of the maximization problem (44), and the corresponding subdomain displacement fields $u^{(s)}$ computed from the equilibrium equations (38) satisfy $\tilde{w} = 0$, then $(\lambda, \{u^{(s)}\}_{s=1}^{N_s})$ is the domain decomposed solution of the given contact problem.

The FETI-C method we introduce next is a FETI-like method which finds the zone of active contact $\tilde{\Gamma}_C$ and computes the elastic state of each substructure, by solving the maximization problem (44) that embeds the equilibrium equations (38), while ensuring that $\tilde{w} = 0$.

Remarks

- The operator \tilde{F}_l introduced in Eq. (45) is unsymmetric. However, from Eqs. (37,48,49), it follows that the set of admissible Lagrange multipliers on which \tilde{F}_l operates is such that

$$\tilde{B}^T \lambda = B^T \lambda \quad (52)$$

and therefore a PCG algorithm can be applied to the solution of the maximization problem (44).

- From Eqs. (9,45) and Eq. (52), it also follows that

$$\tilde{G}_l^{(s)T} \lambda = G_l^{(s)T} \lambda \quad (53)$$

4.3. One-shot iterative procedure

As highlighted in the previous sections, the discrete maximization problem (44) associated with contact problems has many similarities with its counterpart (43) for standard structural mechanics problems. For this reason, a good starting point for solving problem (44) is the FETI PCPG algorithm summarized in Table I. However, a major difference between the two maximization problems (44) and (43) is that the former one is non-linear, whereas the latter one is linear. Another difference pertains to the admissibility of the Lagrange multipliers. For standard structural mechanics problems, the Lagrange multipliers must satisfy the self-equilibrium condition (7) in each floating subdomain. For contact problems, the Lagrange multipliers must also satisfy the additional positivity condition stated in the first of Eqs. (42). Hence, our idea here is to construct a non-linear solution algorithm for solving the discrete maximization problem (44) that mimics the FETI PCPG linear solver, while addressing the differences between perfect and contact interfaces. The resulting non-linear scheme, FETI-C, is a FETI-like iterative procedure where both the contact and equilibrium conditions are updated simultaneously. Hence, FETI-C does not involve any linearization and therefore unlike the standard FETI solver summarized in Table I, it cannot be interpreted as a classical PCG algorithm. This new extension of the FETI method is presented in the following subsections in a step-by-step approach.

4.3.1. Initialization step. Consider the FETI-PCPG algorithm summarized in Table I. Suppose that the initialization step

$$\lambda^0 = \mathbf{G}_I(\mathbf{G}_I^T \mathbf{G}_I)^{-1} \mathbf{e} \quad (54)$$

is performed using

$$\tilde{\Gamma}_C^0 = \Gamma_C \quad (55)$$

In that case, \mathbf{G}_I denotes an initialization of $\widetilde{\mathbf{G}}_I$ (45) where each subdomain matrix $\widetilde{\mathbf{B}}_I^{(s)}$ (48) is constructed by assuming that all potential contact interfaces are initially active. In other words, $\mathbf{G}_I^T \mathbf{G}_I$ is based on Γ_P and Γ_C . If the given problem does not have any global rigid body mode, $\mathbf{G}_I^T \mathbf{G}_I$ is non-singular [17]. On the other hand, if the given problem has one or several global rigid body modes, $\mathbf{G}_I^T \mathbf{G}_I$ is singular, but Eq. (54) admits at least one solution if the external loads are self-equilibrated. In any case, the initial value λ^0 as computed in Eq. (54) is not guaranteed to be admissible for the maximization problem (44) — that is, λ^0 is not guaranteed to satisfy $\lambda_M^0 > 0$ on Γ_C .

For this reason, we propose to apply after the initialization step a “planing” procedure aimed at enforcing the positiveness of λ^0 in the sense defined in the first of Eqs. (42), without for that purpose destroying the self-equilibrium of any floating subdomain (see Eq. (7)). This planning step is represented by the following transformation

$$\lambda \longleftarrow \mathcal{P}(\lambda) \quad (56)$$

where \mathcal{P} denotes the two-step iterative procedure described in Table II. In each first step of the n -th iteration of this planing procedure, the positiveness of the iterate λ^n is enforced simply by setting to zero the negative Lagrange multipliers acting on the zone of contact Γ_C , and the active zone of contact $\tilde{\Gamma}_C$ and matrices $\widetilde{\mathbf{B}}_I^{(s)}$ are updated accordingly and denoted by $\tilde{\Gamma}_C^n$ and $\widetilde{\mathbf{B}}_I^{(s)^n}$, respectively. In each second step, the self-equilibrium of the floating subdomains is restored by applying to λ^n the following projector

$$\widetilde{\mathbf{P}}^n = \mathbf{I} - \widetilde{\mathbf{G}}_I^n (\widetilde{\mathbf{G}}_I^{n^T} \widetilde{\mathbf{G}}_I^n)^{-1} \mathbf{G}_I^{n^T} \quad (57)$$

and translating the result by the constant vector $\widetilde{\mathbf{G}}_I^n (\widetilde{\mathbf{G}}_I^{n^T} \widetilde{\mathbf{G}}_I^n)^{-1} \mathbf{e}$. Indeed, from Eq. (57) and Eq. (53), it follows that

$$\widetilde{\mathbf{G}}_I^{n^T} (\widetilde{\mathbf{P}}^n \lambda^n + \widetilde{\mathbf{G}}_I^n (\widetilde{\mathbf{G}}_I^{n^T} \widetilde{\mathbf{G}}_I^n)^{-1} \mathbf{e}) = (\widetilde{\mathbf{G}}_I^{n^T} - \mathbf{G}_I^{n^T}) \lambda^n + \mathbf{e} = \mathbf{e} \quad (58)$$

Note that the projector (57) is similar to the projector (12) equipped with $\mathbf{Q} = \mathbf{I}_2$ but differs from it in the fact that it accounts for the change in the active zone of contact from $\tilde{\Gamma}_C^{n-1}$ to $\tilde{\Gamma}_C^n$. Experience shows that in general, the planing procedure described in Table II converges after a small number of planing subiterations (see Section 5).

Note also that Step 2.(a) of the planing procedure incorporates a coarse problem of the form

$$(\widetilde{\mathbf{G}}_I^{n^T} \widetilde{\mathbf{G}}_I^n) \mathbf{x}^n = \mathbf{b}^n \quad (59)$$

This coarse problem is called here a coarse “contact” problem because, as shown in Table II, it influences the updating of the active zone of contact.

Table II. The planing procedure

Iterate $n = 1, 2, \dots$ until convergence	
1.(a) Positiveness:	$\lambda^n \leftarrow \begin{cases} \lambda^n & \text{on } \Gamma_P \\ \langle \lambda_M^n \rangle_+ & \text{on } \Gamma_C \end{cases}$
1.(b) Active contact:	determine $\tilde{\Gamma}_C^n$ from λ^n and update $\tilde{B}_I^{(s)^n}, \tilde{G}_I^n$
1.(c) Test self-equilibrium:	if $\tilde{G}_I^{n^T} \lambda^n = e$ end.
2.(a) Self-equilibrium:	$\lambda^n \leftarrow (I - \tilde{G}_I^{n^T} (\tilde{G}_I^n \tilde{G}_I^{n^T})^{-1} G_I^{n^T}) \lambda^n + \tilde{G}_I^n (\tilde{G}_I^{n^T} \tilde{G}_I^n)^{-1} e$
2.(b) Test positiveness:	if $\exists M \in \Gamma_C / \lambda_M^n < 0$ go to 1.(a)

4.3.2. Evaluation of the projected residual. As noted in Section 4.2, for contact problems, it is the modified projected residual \tilde{w} defined in Eq. (50) and not the projected residual w (18) that must be driven to zero. For this reason, at each iteration k , after $w^{k-1} = \tilde{P}^{k-1} r^{k-1}$ is evaluated, \tilde{w}^{k-1} is computed and the preconditioner is applied to \tilde{w}^{k-1} rather than w^{k-1} . For the same reason, \tilde{w}^{k-1} and \tilde{w}^{k-2} are used in FETI-C wherever w^{k-1} and w^{k-2} are used in FETI.

The re-projection step is similar to that of the standard FETI PCPG solver and can be written as $y^{k-1} = \tilde{P}^{k-1} z^{k-1}$, where $z^{k-1} = \tilde{F}_I^{-1} \tilde{w}^{k-1}$, and \tilde{F}_I^{-1} is the preconditioner discussed next.

4.3.3. Preconditioning step. The straightforward extension to contact problems of the Dirichlet (15) preconditioner calls for substituting the matrices $B^{(s)}$ in Eqs. (15,16) by the matrices $\tilde{B}^{(s)^k}$ associated with the k -th iterate active zone of contact $\tilde{\Gamma}_C^k$, and updating the definition of the interior (subscript i) and interface boundary (subscript b) d.o.f. accordingly. However, in order to avoid non-desirable oscillations in the enforcement of the non-penetration condition (second of Eqs. (42)), we propose to precondition only the equations corresponding to the d.o.f. where the modified projected residual \tilde{w} is non-zero. Hence, we propose the following “Dirichlet-like” preconditioner

$$\tilde{F}_I^{D-1^k} = W \left(\sum_{s=1}^{N_s} \tilde{B}^{(s)^k} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & S_{bb}^{(s)} \end{bmatrix} \tilde{B}^{(s)^k T} \right) W \quad (60)$$

where $\tilde{B}^{(s)^k}$ is the restriction of $B^{(s)}$ to the d.o.f. of Γ_P and to the d.o.f. of Γ_C^k where the effective residual \tilde{w}^{k-1} is non-zero. For simplicity, we refer in the sequel to the Dirichlet-like preconditioner introduced above as the Dirichlet preconditioner.

At each iteration k , the above Dirichlet preconditioner changes because the d.o.f. on Γ_C where $\tilde{w}^{k-1} \neq 0$ change. However, only the matrices $\tilde{B}^{(s)}$ are updated. The Schur complement $S_{bb}^{(s)}$ is computed once based on the initial configuration — that is, on $\Gamma_P \cup \tilde{\Gamma}_C^0 = \Gamma_P \cup \Gamma_C$ — and is frozen throughout all iterations. This strategy is chosen to maximize computational efficiency.

Note that the fact that the above preconditioner changes at each iteration k is a direct consequence of the choice we have made to design a non-linear FETI-C solution algorithm that does not require any linearization of the non-linear maximization problem (44).

4.3.4. Conjugation and maximization steps. The derivation and explanation of the conjugation and maximization (or minimization) steps that characterize a PCG algorithm are usually performed for a linear problem. In general, these steps are not required for a non-linear problem. Nevertheless, we enforce them in the FETI-C solver in order to avoid as much as possible numerical oscillations. However, in this case and even in the absence of round-off errors, the conjugation step enforces the orthogonality of the current search direction only to the previous one.

4.3.5. Planing step. At each iteration k , the planing procedure (56) (or planing step) is applied to the updated Lagrange multipliers in order to enforce both the positiveness of the contact pressure and the self-equilibrium of the floating subdomains. Note that at the end of each k -th application of the planing procedure, a possibly new active zone of contact $\tilde{\Gamma}_C^{k+1}$ is predicted, and therefore is available for updating the matrices $\tilde{\mathbf{B}}^{(s)}$ to become $\tilde{\mathbf{B}}^{(s)^k}$, and the projector $\tilde{\mathbf{P}}$ and the preconditioner $\tilde{\mathbf{F}}_I^{-1}$ to become $\tilde{\mathbf{P}}^k$ and $\tilde{\mathbf{F}}_I^{-1^{k+1}}$, respectively.

4.3.6. Evaluation of the residual. In the sequel, we define a “status change” as the event where any node on the potential zone of contact Γ_C changes status from active to inactive, or vice-versa, during a FETI-C iteration. A status change affects the evaluation of the residual.

Indeed, we first note that the residual can be computed only after the planing step, and that after each planing step the predicted active zone of contact is updated. If a status change occurs during this update, $\tilde{\mathbf{F}}$ is modified, which prevents evaluating the residual as in a classical CG algorithm. Instead, if a status change occurs, this residual must be re-computed as follows

$$\mathbf{r}^k = \mathbf{d} - \tilde{\mathbf{F}}_I^{k+1} \boldsymbol{\lambda}^k \quad (61)$$

where the notation $\tilde{\mathbf{F}}_I^{k+1}$ means $\tilde{\mathbf{F}}_I^{k+1} = \tilde{\mathbf{F}}(\tilde{\Gamma}_C^{k+1})$ and emphasizes the fact that $\tilde{\mathbf{F}}$ depends on the predicted active zone of contact $\tilde{\Gamma}_C$ via the matrices $\tilde{\mathbf{B}}^{(s)}$ (see Eqs. (45–49)). On the other hand, if no status change occurs during the updating of the active zone of contact, the residual can be computed as in the classical CG algorithm.

4.4. The FETI-C solver

The FETI-C solver for frictionless contact problems is summarized in Table III. Convergence is checked by monitoring $\tilde{\mathbf{w}}^{k-1}$ and declared when

$$\|\tilde{\mathbf{w}}^{k-1}\| \leq \varepsilon \left(\left\| \sum_{s=1}^{N_s} \mathbf{B}^{(s)} \mathbf{K}^{(s)+} \mathbf{f}^{(s)} \right\| + \|\mathbf{c}^0\| \right) \quad (62)$$

where ε is a user-specified tolerance, and the triangular inequality has been applied to $\|\mathbf{d}\|$ (45) to avoid potential numerical difficulties.

5. NUMERICAL EXAMPLES

In this section, we assess the performance of the FETI-C solver and investigate its numerical scalability properties. For this purpose, we apply this algorithm, with and without preconditioning, to the solution

Table III. The FETI-C non-linear solution algorithm

Initialize	
$\tilde{\Gamma}_C^0$	$= \Gamma_C$
$\bar{\lambda}^0$	$= G_I (G_I^T G_I)^{-1} e$
λ^0	$= \mathcal{P}(\bar{\lambda}^0)$
\tilde{P}^0	$= \tilde{P}(\tilde{\Gamma}_C^1)$
r^0	$= d - \tilde{F}_I^1 \lambda^0$
Iterate $k = 1, 2, \dots$ until convergence	
Project	$w^{k-1} = \tilde{P}^{k-1T} r^{k-1}$
	$\tilde{w}^{k-1} = \begin{cases} w^{k-1} & \text{on } \Gamma_P \\ \langle w_M^{k-1} \rangle_+ & \text{on } \tilde{\Gamma}_C^k \end{cases}$
Precondition	$z^{k-1} = \tilde{F}_I^{-1} \tilde{w}^{k-1}$
Re-project	$y^{k-1} = \tilde{P}^{k-1} z^{k-1}$
Conjugate	$\zeta^k = \frac{y^{k-1T} \tilde{w}^{k-1}}{y^{k-2T} \tilde{w}^{k-2}} \quad (\zeta^1 = 0)$
	$p^k = y^{k-1} + \zeta^k p^{k-1} \quad (p^1 = y^0)$
Maximize	$\eta^k = \frac{p^{k-1T} \tilde{w}^{k-1}}{p^{k-1T} \tilde{F}_I^k p^k}$
Update	$\bar{\lambda}^k = \lambda^{k-1} + \eta^k p^k$
Apply planing	$\lambda^k = \mathcal{P}(\bar{\lambda}^k)$
	$\tilde{P}^k = \tilde{P}(\tilde{\Gamma}_C^{k+1})$
Compute residual	$r^k = \begin{cases} r^{k-1} - \eta^k \tilde{F}_I^k p^k & \text{if no status change} \\ d - \tilde{F}_I^{k+1} \lambda^k & \text{if status change} \end{cases}$

of several two- and three-dimensional frictionless contact problems. In all cases we monitor its convergence as described in (62) with $\epsilon = 10^{-7}$.

Furthermore, we use the performance of the optimal FETI method as a reference to evaluate the numerical efficiency of the FETI-C solver, in the following manner. For each contact problem, after the FETI-C solver has converged and the active zone of contact has been determined, we “lock” the substructures in their final configuration — that is, we consider each determined active contact interface as a perfect interface in the normal direction — and perform a standard stress analysis of that configuration under the given external loads, using the standard FETI method as a solver. We compare the dependence on a few key parameters of the number of FETI iterations associated with this stress analysis to that of the number of FETI-C iterations performed during the solution of the underlying contact problem.

5.1. Two-dimensional applications

Here, we consider a series of two-dimensional contact problems between 2 to 6 substructures. Each one of this problem features a different challenging aspect of contact. We assume that all substructures are

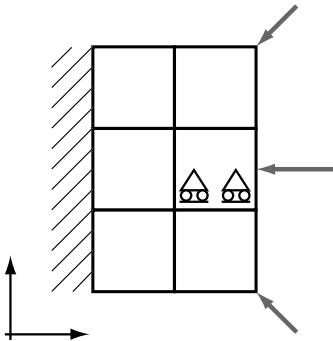


Figure 6. A 6-block problem with 7 contact interfaces

made of the same linear elastic material characterized by a Young modulus $E = 2.05 \cdot 10^3$ MPa, and a Poisson ratio $\nu = 0.3$. We discretize all substructures by four-noded plane stress elements, design small meshes with 1,364 d.o.f. as well as larger ones with up to 175,692 d.o.f., and vary the total number of subdomains between 6 and 150.

5.1.1. A multi-block problem. First, we consider the problem graphically depicted in Figure 6, with $F = 10^4$ N. In this problem, 6 blocks sharing 7 contact interfaces are pushed against each other by a set of external forces. The two simple supports drawn in one of the blocks mean that the interface boundary nodes of that block can move only in the horizontal (x) direction. This condition ensures that the contact problem is well-posed and has a unique solution.

We construct three different domain decompositions with 6 ($H = 1/2$), 54 ($H = 1/6$), and 150 ($H = 1/10$) subdomains (Figure 7). In each subdomain, we generate a suite of $(1/h) \times (1/h)$ uniform meshes with $10 \leq (H/h) \leq 60$. For each domain decomposition and each mesh size, we report in Table IV the performance results of the FETI-C solver. These consist of the number of FETI-like iterations N_{itr} , the total number of planing subiterations N_{pln} , and the total number of status changes N_{stc} . We denote by N_{dof} the total number of d.o.f. associated with a given mesh, and by N_{itr}^{lock} the number of FETI iterations obtained for the solution of the locked configuration of this contact problem with Dirichlet preconditioner.

The performance results summarized in Table IV show that

- The Dirichlet preconditioner reduces the number of FETI-C iterations by a factor ranging between 2 and 3.
- The FETI-C solver equipped with the Dirichlet preconditioner is numerically scalable with respect to both the problem size and the number of subdomains.
- For this contact problem, the FETI-C solver equipped with the Dirichlet preconditioner performs an amazingly small number of planing subiterations. Furthermore, for large-scale meshes and mesh partitions, it requires a number of iterations that is comparable to that of the FETI method applied to the standard stress analysis of the locked configuration of this problem.

The third observation formulated above can be explained by Figure 8 where the displacement solution of this contact problem using the coarsest mesh is displayed on the left, and the distribution

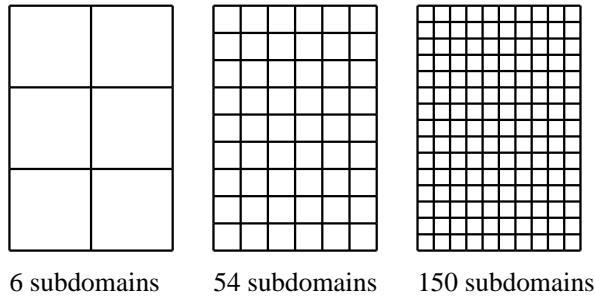


Figure 7. Domain decomposition

Table IV. Multi-block contact problem: performance results of the FETI-C solver

$H(N_s)$	H/h	N_{dof}	preconditioner	N_{itr}	N_{pln}	N_{stc}	N_{lock}^{itr}
1/2 (6)	10	1,452	I	23	0	0	
1/2 (6)	20	5,292	I	31	2	2	
1/2 (6)	40	19,200	I	43	4	3	
1/2 (6)	60	44,652	I	50	4	3	
1/6 (54)	10	11,532	I	52	3	2	
1/6 (54)	20	44,652	I	68	6	3	
1/6 (54)	40	175,692	I	88	11	5	
1/10 (150)	10	31,212	I	57	8	5	
<hr/>							
1/2 (6)	10	1,452	Dirichlet	8	0	0	7
1/2 (6)	20	5,292	Dirichlet	11	0	0	7
1/2 (6)	40	19,200	Dirichlet	13	0	0	6
1/2 (6)	60	44,652	Dirichlet	13	1	1	7
1/6 (54)	10	11,532	Dirichlet	30	0	0	24
1/6 (54)	20	44,652	Dirichlet	34	0	0	26
1/6 (54)	40	175,692	Dirichlet	36	3	1	29
1/10 (150)	10	31,212	Dirichlet	34	5	3	30

of the contact Lagrange multipliers is graphically depicted using arrows on the right. In this figure, the reader can observe that almost all contact interfaces are active, which explains why few planing subiterations are required and N_{itr} is close to N_{lock}^{itr} . The deformed shape shown on the left in Figure 8 also illustrates the reason why, at a crosspoint, no Lagrange multiplier should be introduced between two subdomains that share only one node in two-dimensions, or on edge in three-dimensions (see the remark in Section 4.1).

5.1.2. A contact problem with pre-stress. Next, we consider a frictionless contact problem where a square elastic body is forced into the cavity of another U-shaped elastic body, as shown in Figure 9 with $c^0 = -10^{-6}$ m and $F = 100$ N. This problem has only 3 potential contact interfaces. However, it has the same topology as the previous problem. For this reason, we use the same meshes and same domain decompositions as for the previous problem (see Figure 7). We report in Table V and Figure

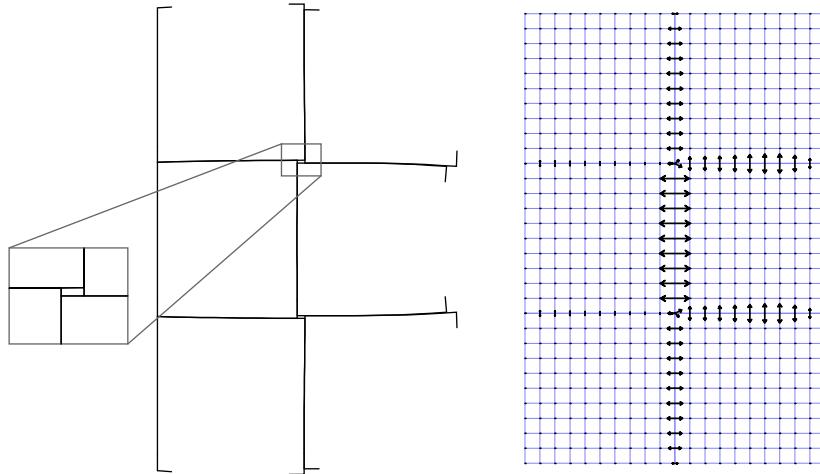


Figure 8. Multi-block contact problem: deformed interfaces (left) and corresponding Lagrange multipliers (right, arrows)

10 the performance results obtained for the FETI-C solver.

The reported values of N_{itr}^{lock} suggest that, even for a standard linear configuration, this problem is intrinsically “harder” to solve by a FETI method than the previous one. This explains why the FETI-C method performs more iterations for solving this problem than for solving the previous one. Nevertheless, the performance results summarized in Table V also show that the FETI-C solver equipped with the Dirichlet preconditioner: (a) is numerically scalable with respect to both the problem size and the number of subdomains, and (b) performs *on average* only 1 or 2 planing subiterations per iteration. The latter observation suggests that the coarse contact problem (59) is effective at reducing the oscillations that are usually observed when determining the active contact zone by an iterative procedure. Figure 11 reports on the evolution of the relative projected residual (62), number of planing subiterations, and number of nodes that experience a status change throughout the iterations, for the case with 54 subdomains, $H/h = 40$, and the Dirichlet preconditioner. The reader can observe that after a few iterations, no status change occurs and therefore the evaluation of the residual becomes as economical as in a classical CG algorithm.

The solution of this contact problem with pre-stress is graphically depicted in Figure 12. The gap between the deformed interfaces of the two elastic bodies is due to the fact that the binding c^0 has been prescribed with respect to the undeformed configuration.

5.2. A three-dimensional contact problem

In order to test the behavior of the planing procedure (56) on two-dimensional interfaces, we finally consider the three-dimensional frictionless contact problem shown in Figure 13. In this problem — which is a three-dimensional version of the contact problem described in Section 5.1.1 — the translation in the z direction is restrained for all of substructures 4, 5, and 6, and the translation in the y direction as well as the rotation around the x axis are restrained for substructure 5. The loading is identical to that of the multi-block problem shown in Figure 6, but only 80% of the potential contact

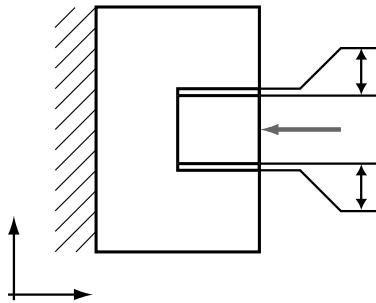


Figure 9. A contact problem with a pre-stressed block

Table V. Contact problem with a pre-stressed block: performance results of the FETI-C solver

$H(N_s)$	H/h	N_{dof}	preconditioner	N_{itr}	N_{pln}	N_{stc}	N_{itr}^{lock}
1/2 (6)	10	1,364	I	53	21	7	
1/2 (6)	20	5,124	I	62	43	9	
1/2 (6)	40	19,844	I	84	32	11	
1/2 (6)	60	44,164	I	105	43	17	
1/6 (54)	10	11,284	I	63	14	4	
1/6 (54)	20	44,164	I	89	58	11	
1/6 (54)	40	174,724	I	121	80	14	
1/10 (150)	10	30,804	I	68	29	8	
			Dirichlet	59	21	7	17
			Dirichlet	59	38	6	18
			Dirichlet	69	49	12	20
			Dirichlet	66	55	11	20
			Dirichlet	47	16	7	35
			Dirichlet	71	41	10	39
			Dirichlet	73	37	13	45
			Dirichlet	55	40	6	38

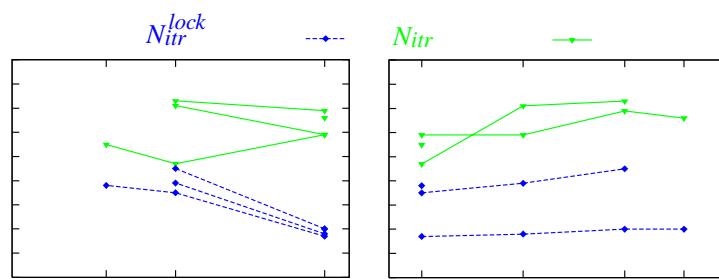


Figure 10. Contact problem with a pre-stressed block: performance results of the FETI-C solver equipped with the Dirichlet preconditioner

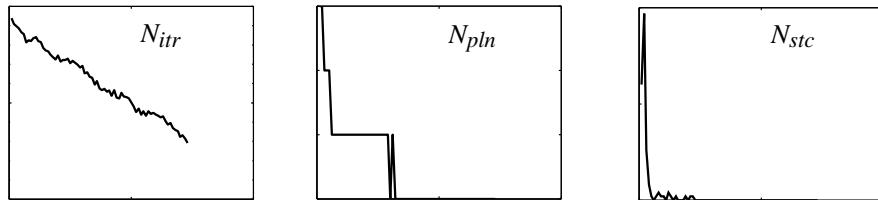


Figure 11. Convergence behavior of the FETI-C solver for the contact problem with a pre-stressed block

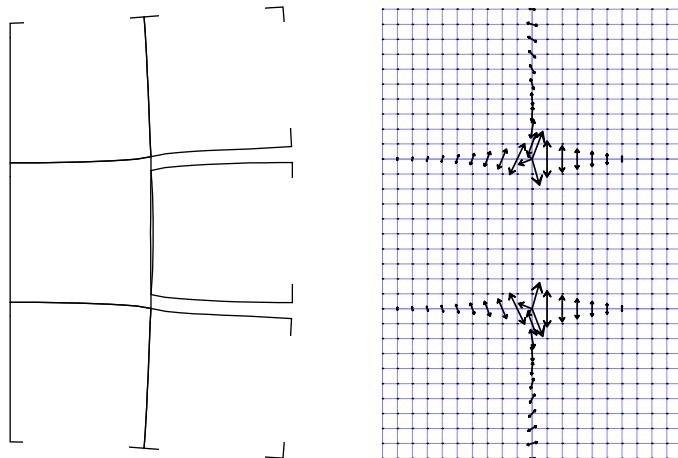


Figure 12. Contact problem with a pre-stressed block: deformed interfaces (left) and corresponding Lagrange multipliers (right, arrows)

nodes turn out to be active in this problem.

We generate two different meshes corresponding to discretizing each substructure by $4 \times 4 \times 4$ and $12 \times 12 \times 12$ 8-noded brick elements. Hence, the first mesh contains 2,250 d.o.f., and the second one 39,546 d.o.f. We treat each substructure as one subdomain. We report in Table VI the performance results of the FETI-C solver applied to this contact problem. Once again, these results show that the FETI-C solver equipped with the Dirichlet preconditioner performs on average about 2 planing subiterations per iteration, and is scalable with respect to both the size of the problem and the number of subdomains.

5.3. On the solution of the coarse contact problem

The implementation on sequential and parallel computing platforms of the FETI-C solver presented in this paper is similar to that of the FETI method. It will be discussed in details in a forthcoming paper,

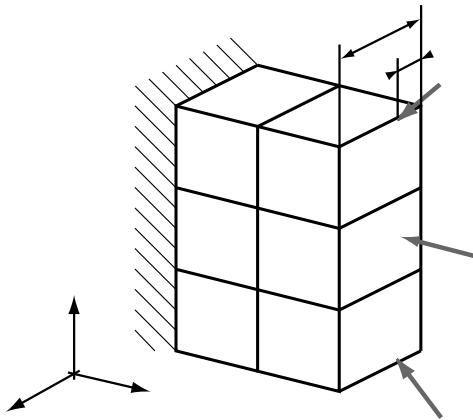


Figure 13. A three-dimensional 6-block contact problem

Table VI. Three-dimensional 6-block contact problem: performance results of the FETI-C solver

$H(N_s)$	H/h	N_{dof}	preconditioner	N_{itr}	N_{pln}	N_{stc}	N_{lock}^{itr}
1/2 (6)	4	2,250	I	18	11	3	
1/2 (6)	12	39,546	I	15	18	13	
1/2 (6)	4	2,250	Dirichlet	11	6	3	6
1/2 (6)	12	39,546	Dirichlet	8	17	7	5

which will also report on CPU performance results. Here, we make only one comment on the solution of the coarse contact problem (59). When the number of potential contact interfaces can be expected to be a small fraction of the total number of interfaces — for example, when only a few bodies are in contact and a large number of subdomains is employed — we recommend that the contribution of the perfect interfaces to $(\widetilde{G}_I^{nT} \widetilde{G}_I^n)$ be eliminated once for all by a static condensation procedure, before starting the FETI-C iterations. In that case, at each planing subiteration of a given FETI-C iteration, the cost of solving the coarse contact problem (59) becomes negligible compared to the other computational costs of the FETI-C method.

6. SUMMARY AND CONCLUSIONS

The FETI-C method is a FETI-based substructuring method with Lagrange multipliers aimed for the iterative solution of general contact problems. As a first step, it is developed in this paper for frictionless problems. It is organized around a single iteration loop that updates both the contact and equilibrium conditions. A distinctive feature of the FETI-C method is an iterative planing procedure which enforces at each FETI-C iteration the positiveness of the contact pressure while preserving the self-equilibrium

of each floating subdomain. This planing procedure incorporates an auxiliary coarse problem which not only guides the prediction of the active zone of contact, but most importantly appears to be effective at reducing the oscillations that are usually observed when determining the active contact zone by an iterative procedure. The computational cost of each planing subiteration is a minor fraction of the computational cost of a FETI-C iteration. Furthermore, extensive numerical experiments reveal that the FETI-C method performs on average less than 2 planing subiterations per iteration. Extensive numerical experiments with two- and three-dimensional frictionless contact problems also suggest that the FETI-C method is numerically scalable with respect to both the number of subdomains, and the size of the problem. The extension of this method to contact problems with friction necessitates (a) modifying the admissibility condition on the Lagrange multipliers introduced at the contact interfaces to account for friction, and (b) superposing to the current residuals additional terms that account for the tangential components of the jumps of the displacement field. These issues will be dealt with in a forthcoming paper.

ACKNOWLEDGEMENTS

The first author acknowledges partial support by the Service des Relations Internationales of the ENS Cachan. The second author acknowledges the support by the Sandia National Laboratories under Contract No. BD-2435.

REFERENCES

1. P. Alart and A. Curnier. A mixed formulation for frictional contact problems prone to Newton like solution methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 92:253–375, 1991.
2. F. Armero and E. Petöcz. Formulation and analysis of conserving algorithms for dynamic contact / impact problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, (158):269–300, 1998.
3. J. S. Arora, A. I. Chahande, and J. K. Paeng. Multiplier methods for engineering optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 32:1485–1525, 1991.
4. K. J. Arrow, L. Hurwicz, and H. Uzawa. *Studies in nonlinear programming*. University Press, Stanford, CA, 1958.
5. M. Barboteu, P. Alart, and F. Lebon. Une méthode de décomposition de domaine pour une structure multicontact. In *4e Colloque National en Calcul des Structures*, volume 1, pages 159–164, 1999.
6. P. Chabrand, F. Dubois, and M. Raous. Various numerical methods for solving unilateral contact problems with friction. In Rodin and Shillor [30], pages 97–108.
7. L. Champaney, J.-Y. Cognard, D. Dureisseix, and P. Ladevèze. Large scale applications on parallel computers of a mixed domain decomposition method. *Computational Mechanics*, (19):253–263, 1997.
8. L. Champaney, J.-Y. Cognard, and P. Ladevèze. Modular analysis of assemblages of three-dimensional structures with unilateral contact conditions. *Computers & Structures*, (73):249–266, 1999.
9. A. Curnier, editor. *Proceedings of the Contact Mechanics International Symposium*. Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, 1992.
10. G. Dilintas, P. Laurent-Gengoux, and D. Trystram. A conjugate projected gradient method with preconditioning for unilateral contact problems. *Computers & Structures*, 29(4):675–680, 1988.
11. Z. Dostal, A. Friedlander, and S. Santos. Solution of coercive and semicoercive contact problems by FETI domain decomposition. *Contemporary Mathematics*, 218:82–93, 1998.
12. C. Farhat. A Lagrange multiplier based divide and conquer finite element algorithm. *Journal of Computing Systems in Engineering*, 2:149–156, 1991.
13. C. Farhat, P. S. Chen, J. Mandel, and F. X. Roux. The two-level FETI method - Part II: extension to shell problems, parallel implementation and performance results. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 155:153–180, 1998.
14. C. Farhat and J. Mandel. The two-level FETI method for static and dynamic plate problems - Part I: an optimal iterative solver for biharmonic systems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 155:129–152, 1998.
15. C. Farhat, J. Mandel, and F. X. Roux. Optimal convergence properties of the FETI domain decomposition method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 115:367–388, 1994.
16. C. Farhat and F.-X. Roux. A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 32:1205–1227, 1991.

17. C. Farhat and F.-X. Roux. Implicit parallel processing in structural mechanics. In J. T. Oden, editor, *Computational Mechanics Advances*, volume 2. North-Holland, June 1994.
18. N. D. Hung and G. De Saxce. Frictionless contact of elastic bodies by finite element method and mathematical programming technique. *Computers & Structures*, 11:55–67, 1980.
19. N. Kikuchi. Penalty/finite element approximations of a class of unilateral contact problems. In *Penalty method and finite element method*. ASME, New York, 1982.
20. N. Kikuchi and J. T. Oden, editors. *Contact problems in elasticity: a study of variational inequalities and finite element methods*. SIAM, Philadelphia, 1988.
21. A. Klarbring. A mathematical programming approach to three-dimensional contact problems with friction. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 58:175–200, 1986.
22. A. Klarbring. Mathematical programming and augmented lagrangian methods for frictional contact problems. In Curnier [9], pages 409–422.
23. J. Mandel and R. Tezaur. Convergence of a substructuring method with Lagrange multipliers. *Numerische Mathematik*, 73:473–487, 1996.
24. J. Mandel, R. Tezaur, and C. Farhat. A scalable substructuring method by Lagrange multipliers for plate bending problems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 36:1370–1391, 1999.
25. H.-O. May. The conjugate gradient method for unilateral problems. *Computers & Structures*, 12(4):595–598, 1986.
26. B. Radi, O. A. Baba, and J. C. Gelin. Treatment of the frictional contact via a Lagrangian formulation. In Rodin and Shillor [30], pages 407–412.
27. M. Raous and S. Barbarin. Conjugate gradient for frictional contact. In Curnier [9].
28. M. Raous, M. Jean, and J.-J. Moreau, editors. *Proceedings of the Second Contact Mechanics International Symposium*, New York, 1995. Plenum Press.
29. D. Rixen and C. Farhat. A simple and efficient extension of a class of substructure based preconditioners to heterogeneous structural mechanics problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46:501–534, 1998.
30. E. Y. Rodin and M. Shillor, editors. *Mathematical and computer modelling*. Number 28. Pergamon Press, 1998.
31. J. Simo and T. A. Laursen. An augmented Lagrangian treatment of contact problem involving friction. *Computers & Structures*, 42:97–116, 1992.
32. P. Wriggers. Finite element algorithms for contact problems. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 2:1–49, 1995.
33. P. Wriggers *et al.* Penalty and augmented Lagrangian formulations for contact problems. In *Proc. NUMETA Conf.*, Swansea, 1985.
34. Z. Zhong and J. Mackerle. Static contact problems — a review. *Engineering Computations*, 9:3–37, 1992.

Bilan et perspectives. Les travaux précédents sur le traitement des problèmes de contact sont une première illustration du cas de non-linéarités d'interface. Bien entendu, nombre d'autres comportements présentent un intérêt certain. Par exemple, l'endommagement (délaminage) pour les composites, qui doit parfois aussi être couplé à l'oxydation dans le cas des matériaux "cicatrisants".

Une particularité des approches précédentes est d'éviter d'introduire deux niveaux imbriqués d'itérations (résolution du contact autour de la résolution du problème sous-structuré) mais de traiter l'ensemble comme un comportement d'interface dans les itérations principales.

Parmi les travaux en cours, citons la comparaison des deux méthodes (mixte et duale) citées précédemment, ainsi que l'extension de FETI-C au contact avec frottement, et son intégration dans la version FETI-DP qui a déjà pu être mentionnée.

2^e partie : vers le multiphysique

La prise en compte de phénomènes couplés dans la simulation des systèmes ou des composants va manifestement connaître un essor grandissant, la modélisation de chaque phénomène indépendant étant assez bien établie. Parmi les premiers champs d'application dans ce domaine, les interactions fluide-structure ont certainement été les premiers à être traité à grande échelle (et continuent à être développées ; citons par exemple le *coupled fields grand challenge* supporté par la NSF et toujours en activité) ; on pourra se reporter à [Felippa *et al.* 01] pour retracer un historique.

La taille importante des problèmes à résoudre constitue alors un terrain friand de stratégies de calcul visant à réduire le coût des simulations. Les techniques que l'on peut développer ne sont pas sans rapport avec les techniques de décomposition de domaine, et les acteurs de ce dernier domaine sont souvent des intervenants dans le premier. En effet, une décomposition en sous-domaines peut être vue comme une technique visant à récupérer les effets de *couplage* entre les sous-structures, l'analyse directe élémentaire étant découpée sur chacune d'entre elles. Dans l'esprit, cela s'apparente donc aux techniques *staggered* et de partitionnement utilisées en interaction fluide-structure.

Dans une grande partie des cas traités aujourd'hui, l'interaction fluide-structure est réalisée entre un domaine fluide et un domaine solide bien distincts, par l'intermédiaire de la frontière. On a coutume de parler d'interaction faible. Cependant, comme dans les applications qui vont être présentées par la suite, le couplage fort en volume est aussi présent.

4 Cas d'un problème couplé vitesse-pression en (quasi-)incompressible : décomposition de domaine avec la méthode FETI

Un exemple de problème couplé (à défaut d'être *réellement* multiphysique) est celui de l'écoulement d'un polymère incompressible, obtenu, par exemple, lors du procédé d'injection de matières plastiques. Sans revenir sur la nécessité d'utiliser une formulation mixte couplant la vitesse et la pression (en particulier pour obtenir une solution de bonne qualité en pression, [Ladeveze *et al.* 92]), notons que celle-ci entraîne l'utilisation d'éléments finis mixtes pour lesquels la condition inf-sup ou LBB, ou à défaut, la vérification de *patch tests*, est un garde-fou permettant d'éviter certains problèmes

numériques, [Brezzi et Fortin 91, Zienkiewicz *et al.* 86].

Formulation mixte couplée. La formulation mixte employée dans le cas présent renvoie, dans le cas des structures, à Herrmann [Herrmann 65] (pour l'élasticité linéaire isotrope).

La relation de comportement peut s'écrire $\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\boldsymbol{\epsilon} + \lambda(\text{Tr}\boldsymbol{\epsilon})\mathbf{1}$ où λ et μ sont les coefficients de Lamé. Dans le cas quasi-incompressible ou incompressible, λ est très grand ou infini, et $\text{Tr}\boldsymbol{\epsilon}$ est très petit ou nul. Le terme $H = \lambda \text{Tr}\boldsymbol{\epsilon}$ a donc de grandes chances d'être erroné. En prenant ce terme comme inconnue de premier plan, cette difficulté est surmontée, et le problème devient mixte : il consiste à déterminer les champs de déplacement $\underline{\mathbf{U}} \in \mathcal{U}$ cinématiquement admissibles et la variable d'Herrmann H rendant stationnaire :

$$\int_{\Omega} \left(\mu \text{Tr}[\boldsymbol{\epsilon}(\underline{\mathbf{U}})\boldsymbol{\epsilon}(\underline{\mathbf{U}})] - \frac{1}{2\lambda} H^2 + H \text{Tr}\boldsymbol{\epsilon}(\underline{\mathbf{U}}) \right) d\Omega - \int_{\Omega} \underline{\mathbf{f}}_d \cdot \underline{\mathbf{U}} d\Omega + \int_{\partial\Omega} \underline{\mathbf{F}}_d \cdot \underline{\mathbf{U}} ds$$

Il s'agit donc d'un problème couplé en $\underline{\mathbf{U}} - H$. Sa résolution est bien entendu plus coûteuse que le problème en déplacement seul.

Les stratégies de résolution de ce type de problème sont variées. Il peut s'agir par exemple d'un partitionnement entre les deux quantités $\underline{\mathbf{U}}$ et H (on aura l'occasion de revenir plus loin sur ce type de partitionnement) ou d'un partitionnement plus classique en espace, de type décomposition de domaine, mais portant sur des problèmes mixtes et assurant un couplage sur la frontière entre les sous-domaines. Ceci peut être rapproché des techniques de partitionnement en fluide-structure où une interface géométrique entre deux domaines est aussi une interface entre deux physiques différentes (domaine fluide et domaine solide).

La décomposition de domaine peut être réalisée sur un tel problème, chaque sous-domaine étant lui-même sujet à être traité par la formulation mixte déplacement-pression (ou vitesse-pression pour un problème d'écoulement fluide incompressible). La question est alors celle du comportement des interfaces pour raccorder la solution.

Le cas où la pression est discontinue à la traversée des interfaces (par exemple avec une discrétisation par des éléments finis discontinus en pression) est particulièrement aisé à traiter. Ceci a été réalisé par Benoît Vereecke pendant son stage de DEA [Vereecke 01], co-encadré par Amine Ammar, Henri Bavestrello et moi-même, par une extension de la méthode FETI aux cas (quasi-)incompressibles. En effet, seule la continuité du déplacement et l'équilibre des efforts sont nécessaires comme comportement des interfaces (parfaites). La formulation mixte discrétisée par sous-domaine est de la forme :

$$\mathbf{K}_H \begin{bmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{C} \\ \mathbf{C}^T & \mathbf{R} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{B}^T \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \boldsymbol{\lambda}$$

où $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ en incompressible et où $\boldsymbol{\lambda}$ est le multiplicateur de Lagrange correspondant à la contrainte de raccord en déplacement aux interfaces

$$[\mathbf{B} \quad \mathbf{0}] \begin{bmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \mathbf{0}$$

D'où le problème dual condensé aux interfaces :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{F}_H & -\mathbf{G} \\ -\mathbf{G}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\lambda} \\ \boldsymbol{\alpha} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{d}_H \\ -\mathbf{e} \end{bmatrix}$$

avec les termes particuliers au cas traité

$$\mathbf{F}_H = [\mathbf{B} \quad \mathbf{0}] \mathbf{K}_H^+ \begin{bmatrix} \mathbf{B}^T \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad \mathbf{d}_H = [\mathbf{B} \quad \mathbf{0}] \mathbf{K}_H^+ \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

où \mathbf{K}_H^+ est une inverse généralisée de \mathbf{K}_H . Les autres termes sont classiques pour la méthode FETI. D'une propriété de \mathbf{F}_H de continuer à être semi-défini positif, on tire l'utilisation possible d'un gradient conjugué (préconditionné) projeté pour résoudre le problème. L'application de la méthode FETI-DP à ce même problème ne pose pas non plus de problème particulier, et a été réalisé.

Résultats obtenus. L'optimalité et l'extensibilité ont été montrées en (quasi-)incompressible par comparaison des performances avec le cas compressible traité de façon standard.

Un dernier point, dans le cas purement incompressible, est la possibilité d'utiliser le cadre classique de l'augmentation des algorithmes précédents en *imposant au cours des itérations* une contrainte que vérifie la solution, ici d'être à volume constant par sous-domaine intérieur (*i.e.* entièrement entouré d'autres sous-domaines). Ceci est réalisé par l'utilisation d'un multiplicateur de Lagrange homogène à une pression constante par sous-domaine, que l'on choisit comme faisant partie intégrante des inconnues du problème grossier. Au passage, il est alors loisible d'utiliser un préconditionneur incompressible. Il en résulte une accélération de la convergence, que l'on paye par un problème macro lui aussi mixte, puisqu'il porte sur les mouvements de solide rigides des sous-domaines flottants ainsi que sur les modes de pression constante des sous-domaines intérieurs.

Ceci tend à appuyer l'argument qui consiste à tirer parti des caractéristiques mécaniques du problème à résoudre pour bâtir un algorithme dédié (moins généraliste) mais plus performant.

Perspectives. Le cas précédent ne se place pas dans le cadre d'une discréétisation avec pression continue, ce qui peut demander, si l'on souhaite avoir une discréétisation du problème indépendante de la décomposition en sous-domaine, de traiter le raccord en pression sur les interfaces. Ce cas fait actuellement l'objet de travaux à l'ONERA Châtillon, et la comparaison des différentes stratégies fait l'objet d'une collaboration récemment engagée avec François-Xavier Roux.

L'outil mis en place peut être considéré comme un solveur en parallèle pour les problèmes incompressibles. Son domaine d'utilisation concerne bien entendu l'analyse de structure de type élastomère incompressible, mais tout aussi bien le procédé d'injection de polymère, ou l'écoulement externe ou interne basse vitesse.

Son utilisation dans le cas d'une analyse incrémentale transitoire linéaire fait intervenir des résolutions successives avec différents seconds membres ; son utilisation

en non-linéaire demande quant à elle des résolutions avec membres de gauche différents. Dans ces deux cas, le fait d'utiliser une résolution itérative permet de tirer parti des précédentes résolutions, par exemple par la réutilisation des espaces de Krylov générés, démarche actuellement assez standard dans ce type de méthodes. Plus encore, le type de problèmes résolus s'insère souvent comme un maillon dans une simulation plus complexe, par exemple dans une boucle incluant la réactualisation de fronts d'injection, une analyse thermique ... c'est-à-dire dans une analyse faisant souvent intervenir des phénomènes physiques différents, plus ou moins couplés. Dans un tel cas, il peut être intéressant de viser à intégrer plus profondément les différents aspects du problème à résoudre dans une même stratégie de décomposition de domaine, plutôt de se restreindre à une technique conçue pour chaque étapes en "boîte noire".

Une telle démarche est, du point de vue numérique comme de celui de la modélisation, encore grandement ouverte. Il s'agit bien de la construction de stratégies de calcul pour une analyse multiphysique. La section suivante concerne une première démarche en ce sens, appliquée au cas relativement simple de la poroélasticité. Cette fois-ci, la trame des méthodes LATIN est utilisée pour bâtir un algorithme adapté au couplage entre physiques différentes.

5 Stratégie de calcul multiphysique avec la méthode LATIN : application à la poroélasticité

Un exemple caractéristique d'un problème multiphysique couplé est celui de la poroélasticité saturée (couplage fort fluide-structure dans le volume) que l'on peut notamment trouver en mécanique des sols.

Décrivons brièvement un problème typique de ce genre. Tout d'abord, un VER est constitué d'une part d'un squelette solide connecté, et d'autre part d'un fluide saturant remplissant toute la porosité connectée. La description du comportement homogénéisé de ce VER fait intervenir les quantités "solides" macroscopiques telles que la contrainte σ et la déformation ϵ , et les quantités "fluides" telles que la pression interstitielle du fluide saturant p et sa vitesse de Darcy \dot{w} . On notera par commodité l'opposé de la vitesse de Darcy $\underline{W} = -\dot{w}$, Z le gradient de pression et q le taux d'accumulation de fluide dans le VER.

Le comportement dans le cas le plus simple (linéaire) est constitué

- de la loi de Hooke : $\sigma = \mathbf{D}\epsilon - pb\mathbf{1}$ où \mathbf{D} est l'opérateur de Hooke du squelette drainé, et b le coefficient de Biot ;
- de la loi de Darcy : $\underline{W} = \mathbf{H}\underline{Z}$ où \mathbf{H} est lié à la perméabilité du milieu homogénéisé ;
- de l'influence de la compressibilité : $q = \frac{1}{Q}\dot{p} + b \text{Tr } \dot{\epsilon}$ où Q est le module de Biot.

Enfin, les équation de conservations sont découpées (au moins dans le volume) : équilibre des contraintes et compatibilité des déformations pour la partie solide, conservation de la masse fluide et compatibilité fluide. La figure 1 illustre la nature des différentes équations mises en jeu.

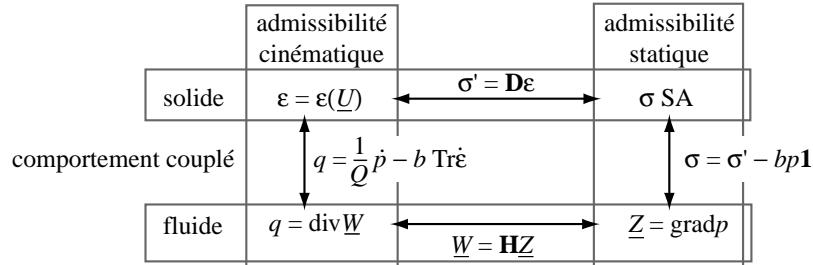


FIG. 1 – Couplages en poroélasticité

Principes. Sans encore parler de sous-structuration, la résolution directe couplée (appelée résolution monolithique), comme dans le cas de la formulation vitesse-pression en incompressible, amène à résoudre un problème (ici de type diffusion) de grande taille, à largeur de bande importante. Il devient donc rapidement coûteux.

D'un point de vue numérique, par similitude avec la décomposition de domaine, le partitionnement des degrés de liberté conduit à une approche itérative. Le choix de ce partitionnement n'est pas trivial ; il pourrait s'agir d'un partitionnement géométrique (sous-structuration) ou physique (partie fluide / partie solide). C'est cette dernière approche qu'on se propose d'utiliser ici. La technique consiste à généraliser le concept d'interface géométrique entre sous-structures à une interface entre physiques différentes. Dans le comportement de cette interface doivent donc se trouver les relations de comportement couplées. La trame de la LATIN est bien adaptée à ce traitement :

- la séparation des difficultés conduit à placer dans Γ les relations de comportement locales et éventuellement couplées, et dans \mathbf{A}_d , les équations découpées, éventuellement globales ;
- le choix de la forme des directions de recherche est important, en particulier pour assurer la convergence de l'algorithme ; c'est de ce choix que l'on va discuter dans la suite ;
- une représentation adaptée des inconnues pour avoir une bonne efficacité numérique.

Les principes et l'utilisation des deux premiers points a fait l'objet d'une communication [Dureisseix *et al.* 01b]. Les comparaisons avec une autre technique de partitionnement, et l'utilisation du dernier point a été présenté dans [Dureisseix *et al.* 01a] et dans un article soumis pour publication, dont le *preprint* est inclus dans ce document [Dureisseix *et al.*].

Choix des directions de recherche. Dans le cas de figure où on n'utilise pas de représentation, et où les directions de recherche sont constantes, une démonstration de convergence peut être établie en suivant la démarche de [Ladevèze 96]. Elle se base sur des propriétés de stabilité vérifiées par le matériau. En notant l'ensemble des champs décrivant l'état de la structure $\mathbf{s} = (\dot{\varepsilon}, p, \underline{Z}, \sigma, q, \underline{W})$, et en définissant la forme linéaire

“travail” suivante :

$$\langle \mathbf{s}, \mathbf{s}' \rangle = \int_0^T \left(1 - \frac{t}{T} \right) \int_{\Omega} (\text{Tr}[\boldsymbol{\sigma} \dot{\boldsymbol{\epsilon}}'] + \text{Tr}[\boldsymbol{\sigma}' \dot{\boldsymbol{\epsilon}}] + \underline{W} \cdot \underline{Z}' + \underline{W}' \cdot \underline{Z} + qp' + q' p) d\Omega dt$$

ses propriétés remarquables utilisées sont :

- pour tous \mathbf{s} , \mathbf{s}' et \mathbf{s}'' de \mathbf{A}_d , $\langle \mathbf{s} - \mathbf{s}', \mathbf{s} - \mathbf{s}'' \rangle = 0$
- pour tous \mathbf{s} et \mathbf{s}' de Γ , $\langle \mathbf{s} - \mathbf{s}', \mathbf{s} - \mathbf{s}' \rangle \geq 0$

À partir de ce moment, la convergence est assurée en prenant des directions de recherche entre les membres des couples de grandeurs duales $(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}, \boldsymbol{\sigma})$, $(\underline{Z}, \underline{W})$ et (p, q) . C'est le cas quand on prend comme direction de recherche à l'étape locale

$$\begin{aligned} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{L}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}} - \dot{\boldsymbol{\epsilon}}) &= 0 \\ (\hat{\underline{W}} - \underline{W}) + \mathbf{H}(\hat{\underline{Z}} - \underline{Z}) &= 0 \\ (\hat{q} - q) + r(\hat{p} - p) &= 0 \end{aligned}$$

et la direction conjuguée à l'étape linéaire :

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) - \mathbf{L}(\dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \hat{\boldsymbol{\epsilon}}) &= 0 \\ (\underline{W} - \hat{\underline{W}}) - \mathbf{H}(\underline{Z} - \hat{\underline{Z}}) &= 0 \\ (q - \hat{q}) - r(p - \hat{p}) &= 0 \end{aligned}$$

Bien entendu, les paramètres de ces directions, \mathbf{L} , \mathbf{H} et r doivent être définis positifs.

Cette démarche de choix peut être mise en œuvre pour toute une gamme de couplages physiques. Prenons par exemple un autre type de couplage fort : celui de la piézoélectricité. Dans le cas des équations quasi-statiques de Maxwell, en négligeant les effets magnétiques, les équations d'admissibilité statique contiennent, outre l'équilibre mécanique, les équations de conservation de charge pour un isolant (Gauss électrique) pour l'induction électrique \underline{D} :

$$\text{div } \underline{D} = 0 \quad \text{dans } \Omega \quad \underline{D} \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{sur } \partial_4 \Omega$$

et pour l'admissibilité cinématique, outre la compatibilité des déformations, un champ électrique \underline{E} irrotationnel dérivant du potentiel électrique Φ (Maxwell-Faraday) :

$$\begin{aligned} \underline{E} &= -\underline{\text{grad}} \Phi \quad \text{dans } \Omega \\ \Phi &= \Phi_d \quad \text{sur } \partial_3 \Omega \end{aligned}$$

$\partial_3 \Omega$ et $\partial_4 \Omega$ sont les parties du bord du domaine sur lesquelles le potentiel, et respectivement le flux, sont imposés. Le couplage électro-mécanique est exprimé par les relations de comportement. Avec le potentiel d'état $\Psi(\boldsymbol{\epsilon}, \underline{E}) = \frac{1}{2} \text{Tr}[\boldsymbol{\epsilon} \mathbf{D} \boldsymbol{\epsilon}] - \frac{1}{2} \underline{E} \cdot \mathbf{P} \underline{E} - \underline{E} \cdot \boldsymbol{\zeta} \boldsymbol{\epsilon}$ où \mathbf{P} est le tenseur diélectrique et $\boldsymbol{\zeta}$ le tenseur piézoélectrique, les lois d'état couplées sont :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} = \mathbf{D} \boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\zeta}^T \underline{E} \\ \underline{D} &= -\frac{\partial \Psi}{\partial \underline{E}} = \mathbf{P} \underline{E} + \boldsymbol{\zeta} \boldsymbol{\epsilon} \end{aligned}$$

La stabilité du comportement est obtenue avec la positivité de la somme de l'énergie mécanique et électrique : $\text{Tr}[\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\epsilon}] + \underline{D} \cdot \underline{E} \geq 0$. Dans ce cas, la forme linéaire s'écrit :

$$\langle \mathbf{s}, \mathbf{s}' \rangle = \int_{\Omega} (\text{Tr}[\boldsymbol{\sigma}\dot{\boldsymbol{\epsilon}}'] + \text{Tr}[\boldsymbol{\sigma}'\dot{\boldsymbol{\epsilon}}] + \underline{D} \cdot \underline{E}' + \underline{D}' \cdot \underline{E}) d\Omega$$

et les directions de recherche seront donc du type :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} - \hat{\boldsymbol{\sigma}} &= \mathbf{D}(\boldsymbol{\epsilon} - \hat{\boldsymbol{\epsilon}}) \\ \underline{D} - \hat{\underline{D}} &= \mathbf{P}(\underline{E} - \hat{\underline{E}}) \end{aligned}$$

Cette fois-ci, il ne s'agit plus d'un problème d'évolution, mais d'un problème statique, et le temps n'intervient plus. Comme, sur cet exemple, le comportement était linéaire, les paramètres de la direction de recherche sont simplement les coefficients matériau.

Représentation des inconnues. Cette technique est un point clé pour gagner en performances. Il s'agit de tirer parti des propriétés de la solution approchée fournie à chaque itération de la LATIN. En effet, ces solutions sont définies sur tout le domaine Ω et tout l'intervalle de temps étudié $[0, T]$. Une représentation de cette solution adaptée à la qualité qu'on peut en attendre à une itération courante permet de réduire les coûts de calcul. En ce sens, il s'agit d'une technique adaptative puisqu'au fur et à mesure des itérations, la solution doit être représentée de plus en plus finement.

Pour les problèmes de type viscoélasticité en statique, une représentation qui s'est avérée bien adaptée est celle de la superposition de *chargements radiaux*. Pour représenter ainsi une quantité admissible $\mathbf{s}(M, t)$, la forme choisie est

$$\mathbf{s}(M, t) = s_0(t)\mathbf{S}_0(M) + \sum_{i=1}^N s_i(t)\mathbf{S}_i(M)$$

où $\mathbf{S}_0(M)$ est un champ particulier admissible, et les $\mathbf{S}_i(M)$ des champs admissibles à 0 ; les s_0, s_i sont de simples fonctions scalaires du temps. Le nombre de couples (s_i, \mathbf{S}_i) peut ainsi être augmenté au cours des itérations (typiquement, 1 couple peut être ajouté à chaque itération).

La mise en œuvre de la LATIN comme une stratégie de calcul multiphysique est plus détaillée dans le *preprint* suivant qui a été soumis pour publication [Dureisseix *et al.*]. Ces travaux sont réalisés en collaboration avec Bernhard A. Schrefler de l'Université de Padoue, Italie. Cette stratégie a été utilisée pour servir de base aux stages de DEA [Bois et Hentz 01, Néron 01]. Une thèse a récemment débuté sur ce sujet, celle de David Néron, co-encadrée par Pierre Ladevèze et moi-même.

A computational strategy for multiphysics problems — application to poroelasticity

D. Dureisseix^{1,*}, P. Ladevèze¹ and B. A. Schrefler²

¹ *LMT-Cachan (École Normale Supérieure de Cachan/CNRS/Université Paris 6)
61 Avenue du Président Wilson, F-94235 Cachan CEDEX, FRANCE*

² *Department of Structural and Transportation Engineering (University of Padova)
Via Marzolo 9, 35131 Padova, ITALY*

SUMMARY

Multiphysics phenomena and coupled-field problems usually lead to analyses which are computationally intensive. Strategies to keep the cost of these problems affordable are of special interest. For coupled fluid-structure problems, for instance, partitioned procedures and staggered algorithms are often preferred to direct analysis. In this paper, we describe a new strategy for solving coupled multiphysics problems which is built upon the LArge Time INcrement (LATIN) method. The proposed application concerns the consolidation of saturated porous soil, which is a strongly coupled fluid-solid problem. The goal of this paper is to discuss the efficiency of the proposed approach, especially when using an appropriate time-space approximation of the unknowns for the iterative resolution of the uncoupled global problem. The use of a set of radial loads as an adaptive approximation of the solution during iteration will be validated and a strategy for limiting the number of global resolutions will be tested on multiphysics problems. Copyright © 2000 John Wiley & Sons, Ltd.

KEY WORDS: multiphysics; coupled field; LATIN; porous media; fluid-structure interaction; consolidation

1. INTRODUCTION

Partitioned procedures and staggered algorithms [9, 8, 14, 16, 18, 20, 7] are often preferred (in the case of coupled fluid-structure problems, for instance) to direct analysis (also called the monolithic approach) from the point of view of computational efficiency. Moreover, partitioning strategies allow the use of different analyzers for different subsystems, thus helping to keep the software manageable.

Recently, a mixed domain decomposition method was developed for parallel computing environments [4]. A multi-level approach involving a homogenization procedure makes this method suitable for highly heterogeneous problems [13]. Here, we describe a new strategy for the resolution of coupled multiphysics problems: we use the LArge Time INcrement method (LATIN, see [12, 11]) to build a suitable approach by generalizing the concept of geometric interface between substructures to that of interface between different physics.

*Correspondence to: LMT-Cachan, 61 Avenue du Président Wilson, F-94235 Cachan CEDEX, FRANCE

The LATIN method was originally developed for nonlinear time-dependent problems, such as plasticity and viscoplasticity problems. However, its concept has been successfully applied to dynamic problems, finite deformations, post-buckling analysis, etc. The LATIN method is a nonincremental iterative approach: at each iteration, the algorithm provides an approximation of the solution over the entire domain and the entire time interval considered. It is based on the following three principles:

- The first principle consists of separating the difficulties. For coupled-field problems, a first set of equations \mathbf{A}_d contains the so-called admissibility conditions (compatibility of strains and pressure gradients, equilibrium and flow conservation). To avoid treating a global and a coupled problem simultaneously, the remaining equations are grouped into a separate set of equations Γ which are local with respect to the space variables; usually, these are the constitutive relations describing the coupling between the fluid and the structure. In order to find the solution, i.e. the set of fields belonging to both \mathbf{A}_d and Γ , an iterative procedure is used.
- The second principle of the method consists of using search directions to build approximate solutions to \mathbf{A}_d and to Γ alternatively until a sufficient level of convergence has been reached. Each iteration comprises 2 stages. The linear stage uses an initial search direction to provide an element of \mathbf{A}_d once an element of Γ is known. This search direction is chosen in such a way that the structural and the fluid problems remain independent. Then, the local stage uses a second search direction, usually conjugate to the first, to find an element of Γ , i.e. a solution which satisfies the coupling equations only locally in the domain.
- The third principle consists of using the fact that the successive approximations are defined over both the entire domain and the entire time interval in order to represent the solution in terms of a basis of radial loads.

Section 2 describes the reference problem. Section 3 describes the basic LATIN approach [6], while Section 4 validates the algorithm and compares it to another partitioned strategy. Section 5 proposes the use of an *ad hoc* approximation to search for the solution [5]. Finally, Section 6 concludes on the feasibility and the performance of the strategy.

2. THE REFERENCE PROBLEM

We consider the isothermal evolution over the time interval $[0, T]$ of a structure Ω made of a saturated porous material and subjected to small perturbations, see [20, 3]. The loading consists of a prescribed displacement \underline{U}_d on part of the boundary $\partial_1\Omega$ and a traction force \underline{F}_d on the complementary part $\partial_2\Omega$, plus a fluid flux on another part $\partial_3\Omega$ and, finally, a prescribed fluid pore pressure p_d on the complementary part $\partial_4\Omega$ of $\partial_3\Omega$ (see the example in Figure 1). For the sake of simplicity, no body forces \underline{f}_d are considered.

For solid entities, the strain is designated by ε and the stress by σ . For fluid entities, the pore pressure gradient is designated by \underline{Z} , Darcy's velocity by $\underline{\psi}$ and, in order to have positive material characteristics, the notation \underline{W} is used for the opposite of $\underline{\psi}$; finally, q designates the rate of accumulation of fluid in each representative elementary volume.

The state of the structure is described by the set of fields $\mathbf{s} = (\varepsilon, p, \underline{Z}, \sigma, q, \underline{W})$ defined on the whole structure Ω and the time interval $[0, T]$ considered. The mathematical framework consists of searching the different fields in their respective spaces: $\underline{U} \in \mathcal{U}^{[0,T]}$, $\sigma \in \mathcal{S}^{[0,T]}$, $p \in \mathcal{P}^{[0,T]}$, $q \in \mathcal{Q}^{[0,T]}$, $\underline{W} \in \mathcal{W}^{[0,T]}$; the problem is to find \mathbf{s} , in the corresponding space $\mathbf{S}^{[0,T]}$, which verifies at each time step:

Solid part	Fluid part
<p>prescribed force $\sigma \underline{n} = \underline{F}_d$</p> <p>prescribed displacement $\underline{U} = \underline{U}_d$</p>	<p>prescribed pore pressure $p = p_d$</p> <p>prescribed fluid flux $\underline{W} \cdot \underline{n} = w_d$</p>

Figure 1. The reference problem

- for the solid, stress equilibrium and strain compatibility:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \sigma &= 0 \quad \text{on } \Omega \quad \text{and} \quad \sigma \underline{n} = \underline{F}_d \quad \text{on } \partial_2 \Omega \\ \underline{U} &\in \mathcal{U}^{[0,T]} \quad \text{and} \quad \varepsilon = \varepsilon(\underline{U}) \end{aligned} \quad (1)$$

$\mathcal{U}^{[0,T]}$ being the set of finite-energy displacement fields on $\Omega \times [0, T]$ which are equal to \underline{U}_d on $\partial_1 \Omega$.

- for the fluid, flow conservation for Darcy's velocity $\dot{\underline{w}} = -\underline{W}$:

$$\begin{aligned} q &= \operatorname{div} \underline{W} \quad \text{on } \Omega \quad \text{and} \quad \underline{W} \cdot \underline{n} = w_d \quad \text{on } \partial_4 \Omega \\ \underline{Z} &= \operatorname{grad} p \quad \text{on } \Omega \quad \text{and} \quad p \in \mathcal{P}^{[0,T]} \end{aligned} \quad (2)$$

$\mathcal{P}^{[0,T]}$ being the set of finite-energy pressure fields on $\Omega \times [0, T]$, which are equal to p_d on $\partial_3 \Omega$.

- the constitutive relations:

- Hooke's law: the macroscopic stress σ is related to the strain ε and coupled with the pore pressure p so that:

$$\sigma = \mathbf{D}\varepsilon - b p \mathbf{1} \quad (3)$$

where \mathbf{D} is Hooke's tensor of the drained skeleton and b is Biot's coefficient. The latter is obtained from the bulk moduli of the drained skeleton (or framework) K_t and of the solid phase (solid grains) K_s as $b = 1 - \frac{K_t}{K_s}$;

- Darcy's law relates Darcy's velocity to the pore pressure gradient

$$\underline{W} = \frac{K}{\mu_w} \underline{Z} \quad (4)$$

K being the intrinsic macroscopic permeability and μ_w the dynamic viscosity of the saturation fluid. In all the following, the operator $\frac{K}{\mu_w} \mathbf{1}$ will be designated by \mathbf{H} ;

- the influence of compressibility relates the rate of fluid accumulation to the pressure rate and couples them with the rate of volume change:

$$q = \frac{1}{Q} \dot{p} + b \operatorname{Tr} \dot{\varepsilon} \quad (5)$$

Q being Biot's modulus. For saturated soils, it is related to the porosity n and to the bulk moduli of the drained skeleton K_s and of the fluid K_w by: $\frac{1}{Q} = \frac{n}{K_w} + \frac{b-n}{K_s}$.

One can observe that if Biot's coefficient b equals 0, the solid problem and the fluid problem are uncoupled. For the steady-state problem, $\dot{p} = 0$, $\text{Tr}\dot{\epsilon} = 0$, $q = 0$ and the two problems are partially uncoupled, since the fluid problem can be solved independently.

3. THE LATIN COMPUTATIONAL STRATEGY

The LArge Time INcrement method (LATIN, see [12]) is a nonincremental iterative approach originally developed for nonlinear time-dependent problems. However, its concept has been successfully applied to dynamic problems, post-buckling analysis, etc. At each iteration, this method produces an approximation of the solution on the whole domain and over the entire time interval considered. It is based on three principles of which the first two are briefly described in this section. For multiphysics problems, these two principles lead to a basic approach [6]. The last principle, whose use is required to gain high efficiency [5], will be described in Section 5.

3.1. Variational form of the reference problem

Let us first restate the reference problem using a variational formulation. The state of the structure \mathbf{s} is governed by two sets of equations. The first set, designated by \mathbf{A}_d , contains the linear and uncoupled equations (possibly global over the entire structure): the so-called *admissibility* conditions (1,2). It consists, on the one hand, of $\underline{U} \in \mathcal{U}^{[0,T]}$ and $\sigma \in S^{[0,T]}$ such that:

$$\forall t \in [0, T], \quad \forall \underline{U}^* \in \mathcal{U}_0, \quad \int_{\Omega} \text{Tr}[\sigma \epsilon(\underline{U}^*)] d\Omega = \int_{\partial_2 \Omega} \underline{F}_d \cdot \underline{U}^* dS \quad (6)$$

where \mathcal{U}_0 is the set of finite-energy displacement fields on Ω which vanish on $\partial_1 \Omega$. It also consists, on the other hand, of $p \in \mathcal{P}^{[0,T]}$, $q \in Q^{[0,T]}$ and $\underline{W} \in \mathcal{W}^{[0,T]}$ such that:

$$\forall t \in [0, T], \quad \forall p^* \in \mathcal{P}_0, \quad \int_{\Omega} (qp^* + \underline{W} \cdot \underline{\text{grad}} p^*) d\Omega = \int_{\partial_4 \Omega} w_d p^* dS \quad (7)$$

where \mathcal{P}_0 is the set of finite-energy pressure fields on Ω which vanish on $\partial_3 \Omega$.

Finally, the second set of equations, designated by Γ , contains the equations which are local with respect to the space variables. This latter group of equations represents the constitutive relations (3,4,5) which couple the solid and fluid fields locally in the domain. Since the reference problem is time-dependent, it requires initial conditions which are also chosen as belonging to Γ .

Thus, the solution $\bar{\mathbf{s}}$ to the reference problem is $\bar{\mathbf{s}} = \mathbf{A}_d \cap \Gamma$. The fundamental bilinear form on $\mathbf{S}^{[0,T]}$ is the following:

$$\langle \mathbf{s}, \mathbf{s}' \rangle = \int_0^T \left(1 - \frac{t}{T}\right) \int_{\Omega} (\text{Tr}[\sigma \epsilon'] + \text{Tr}[\sigma' \epsilon] + \underline{W} \cdot \underline{Z}' + \underline{W}' \cdot \underline{Z} + qp' + q' p) d\Omega dt$$

and its remarkable properties are:

- as long as \mathbf{s} , \mathbf{s}' and \mathbf{s}'' belong to \mathbf{A}_d , $\langle \mathbf{s} - \mathbf{s}', \mathbf{s} - \mathbf{s}'' \rangle = 0$
- as long as \mathbf{s} and \mathbf{s}' belong to Γ , $\langle \mathbf{s} - \mathbf{s}', \mathbf{s} - \mathbf{s}' \rangle \geq 0$

3.2. Separating the difficulties

The first principle of the LATIN method consists of avoiding the treatment of a global and a coupled problem simultaneously. Therefore, the solution to the problem is searched alternatively on Γ and on \mathbf{A}_d .

The second principle of the LATIN method uses an iterative procedure involving search directions. Recalling the main objective, which is to avoid treating a global and a coupled problem simultaneously, this step is performed with a specific choice for the search directions; this choice is also a feature of the LATIN method, see Figure 2.

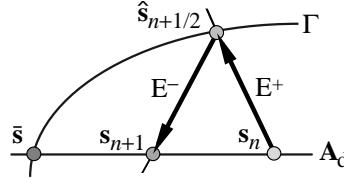


Figure 2. 2-stage LATIN iteration number $n + 1$

3.3. A two-stage iterative strategy

Each iteration of the LATIN method contains 2 stages. In the linear stage, knowing an element of Γ , we find an element of \mathbf{A}_d using an initial search direction. In the local stage, we find an element of Γ , i.e. a solution which verifies the coupling equations only locally in the domain, using a second search direction, usually conjugate to the previous one.

Local stage at iteration $n + 1$. At this stage, the constitutive relations as well as the initial conditions are verified exactly. Once the previous stage has produced a solution $\mathbf{s}_n \in \mathbf{A}_d$, the problem is to find $\hat{\mathbf{s}}_{n+1/2} \in \Gamma$. $\hat{\mathbf{s}}_{n+1/2} - \mathbf{s}_n$ must also lie on the search direction at the local stage:

$$\begin{aligned} (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1/2} - \boldsymbol{\sigma}_n) + \mathbf{L}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1/2} - \boldsymbol{\varepsilon}_n) &= 0 \\ (\hat{\mathbf{W}}_{n+1/2} - \underline{\mathbf{W}}_n) + \mathbf{H}(\hat{\mathbf{Z}}_{n+1/2} - \underline{\mathbf{Z}}_n) &= 0 \\ (\hat{q}_{n+1/2} - q_n) + r(\hat{p}_{n+1/2} - p_n) &= 0 \end{aligned} \quad (8)$$

\mathbf{L} and r are two parameters of the method; they do not modify the solution once convergence has been reached. However, their values modify the convergence rate of the algorithm. In a dimensional analysis, they can be chosen of the form:

$$\mathbf{L} = t_m \mathbf{D} \quad \text{and} \quad r = \frac{1}{Qt_h} \quad (9)$$

where t_m and t_h are two characteristic times.

With the constitutive relations (3,4,5), the local stage leads, at each integration point, to the resolution of a small ODE system which is local with respect to the space variable:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}\hat{\boldsymbol{\dot{\varepsilon}}} + \mathbf{D}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - b\hat{p}\mathbf{1} &= \mathbf{A}_n(t) \\ \frac{1}{Q}\hat{p} + r\hat{p} + b\text{Tr } \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} &= \alpha_n(t) \end{aligned} \quad (10)$$

where $\mathbf{A}_n = \boldsymbol{\sigma}_n + \mathbf{L}\boldsymbol{\dot{\varepsilon}}_n$ and $\alpha_n = q_n + rp_n$ are known quantities at the local stage $n + 1$ and with the initial conditions on the pressure and the strain fields.

Linear stage at iteration $n+1$. Once $\hat{\mathbf{s}}_{n+1/2} \in \Gamma$ is known, the linear stage consists of finding $\mathbf{s}_{n+1} \in \mathbf{A}_d$. \mathbf{s}_{n+1} must verify admissibility relations and is defined along a search direction conjugate to the previous one, so that the mechanical and the hydraulic problems remain uncoupled:

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma}_{n+1} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1/2}) - \mathbf{L}(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1} - \hat{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}_{n+1/2}) &= 0 \\ (\underline{\mathbf{W}}_{n+1} - \hat{\underline{\mathbf{W}}}_{n+1/2}) - \mathbf{H}(\underline{\mathbf{Z}}_{n+1} - \hat{\underline{\mathbf{Z}}}_{n+1/2}) &= 0 \\ (q_{n+1} - \hat{q}_{n+1/2}) - r(p_{n+1} - \hat{p}_{n+1/2}) &= 0 \end{aligned} \quad (11)$$

The global yet uncoupled admissibility equations (6,7) must be solved by finite element discretization. Using the search direction, one obtains, on the one hand, the mechanical problem with the velocity $\underline{\mathbf{U}}$ as the unknown:

$$\forall t \in [0, T], \quad \forall \underline{\mathbf{U}}^* \in \mathcal{U}_0, \quad \int_{\Omega} \text{Tr}[\boldsymbol{\varepsilon}(\dot{\underline{\mathbf{U}}}) \mathbf{L} \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{\mathbf{U}}^*)] d\Omega = \int_{\Omega} \text{Tr}[\hat{\mathbf{A}}_{n+1/2}(t) \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{\mathbf{U}}^*)] d\Omega + \int_{\partial_2 \Omega} \underline{\mathbf{F}}_d \cdot \underline{\mathbf{U}}^* dS \quad (12)$$

$\hat{\mathbf{A}}_{n+1/2} = -\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{n+1/2} + \mathbf{L}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1/2}$ being a known quantity when dealing with the solid part of the linear stage at iteration $n+1$.

One also obtains, on the other hand, the hydraulic problem with the pore pressure p as the unknown:

$$\forall t \in [0, T], \quad \forall p^* \in \mathcal{P}_0, \quad \int_{\Omega} \underline{\text{grad}} p \cdot \mathbf{H} \underline{\text{grad}} p^* d\Omega + \int_{\Omega} p r p^* d\Omega = \int_{\Omega} \hat{\alpha}_{n+1/2}(t) p^* d\Omega + \int_{\partial_4 \Omega} w_d p^* dS \quad (13)$$

$\hat{\alpha}_{n+1/2} = -\hat{q}_{n+1/2} + r\hat{p}_{n+1/2}$ being also a known quantity at this stage.

Equations (12,13) are two uncoupled global problems with time t as parameter. Once $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1} = \boldsymbol{\varepsilon}(\dot{\underline{\mathbf{U}}})$ and p_{n+1} have been obtained, the search direction (11) is used to recover static quantities such as the stress field $\boldsymbol{\sigma}_{n+1}$ and the fluid accumulation q_{n+1} .

Error indicator for termination of the algorithm. Unlike classical incremental techniques, the LATIN method produces at each iteration an approximation of the solution over the entire structure Ω and the entire time interval $[0, T]$. Several error indicators can be used to stop the iterations, i.e. to decide when the solution is sufficiently accurate. For instance, one can use the error indicator based on the difference between an element \mathbf{s} of \mathbf{A}_d , and an element $\hat{\mathbf{s}}$ of Γ :

$$\hat{\eta} = \frac{e(\hat{\mathbf{s}} - \mathbf{s})}{\frac{1}{2}e(\hat{\mathbf{s}} + \mathbf{s})} \quad (14)$$

with

$$\begin{aligned} e_t^2(\hat{\mathbf{s}} - \mathbf{s}) &= \frac{1}{2}\|\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} - \boldsymbol{\varepsilon}\|_{\mathbf{D}}^2 + \frac{1}{2}\|\hat{p} - p\|_{Q^{-1}}^2 & e^2(\hat{\mathbf{s}} - \mathbf{s}) &= \|e_t(\hat{\mathbf{s}} - \mathbf{s})\|_T^2 \\ \|\boldsymbol{\varepsilon}\|_{\mathbf{D}}^2 &= \int_{\Omega} \text{Tr}[\boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}] d\Omega & \|p\|_{Q^{-1}}^2 &= \int_{\Omega} p Q^{-1} p d\Omega & \|\alpha\|_T^2 &= \int_0^T \alpha^2 dt \end{aligned}$$

Convergence. The convergence of the method can be proved by following [12], thanks to the properties of the bilinear form previously designated as $\langle \mathbf{s}, \mathbf{s}' \rangle$ and as long as the search directions are such that \mathbf{L} , \mathbf{H} and r are symmetric and positive definite.

4. TEST CASE

4.1. Problem description and discretization

The proposed test case is the 2D plane strain problem described in Figure 3; it corresponds to the same boundary partition as in Figure 1. The time interval is $T = 36$ s, with $t_1 = T/10$ and the pressures are $p_1 = 1.54$ GPa and $p_d = 380$ MPa; the initial condition is $p(t = 0) = p_d$.

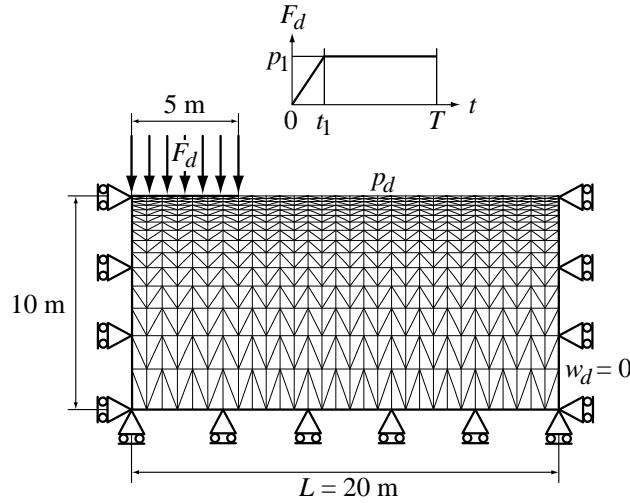


Figure 3. The test problem

The material characteristics in Table I correspond to a Berea sandstone and have been identified in [10]. Due to significant differences in the orders of magnitude of the material characteristics, an

Porosity	$n = 0.19$	Young's modulus	$E = 14.4$ GPa
Poisson's coeff.	$\nu = 0.2$	Biot's modulus	$Q = 13.5$ GPa
Biot's coeff.	$b = 0.78$	Permeability	$\frac{K}{\mu_w} = 2 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3 \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$

Table I. water-saturated Berea sandstone poroelastic material characteristics

adimensionalization has been carried out.

The space discretization uses P2 elements (6-node triangles) for the displacement and P1 linear interpolation (also continuous throughout the elements) for the pore pressure, see [24, 2]. Seven Gauss points were used for the integration and the representation of field quantities such as those in \mathbf{s} , [25].

Concerning the time discretization, the time step chosen was $\Delta t = T/120$. The integration scheme used was the θ -method with a linear variation of the variables over a time step: $X_{i+1} = X_i + \Delta t \dot{X}_{i+\theta}$ (with the notation $\dot{X}_{i+\theta} = \theta \dot{X}_{i+1} + (1 - \theta) \dot{X}_i$) and the associated derivation scheme was:

$$\dot{X}_{i+1} = \frac{1}{\theta \Delta t} (X_{i+1} - X_i) - \frac{1 - \theta}{\theta} \dot{X}_i$$

The version used here was $\theta = 1$ (fully implicit).

In order to compare the proposed approach with the Iterated Standard Parallel Procedure (ISPP) described in [15], a reference solution was required. To produce that reference solution, we used the so-called direct monolithic scheme, which is briefly described below.

4.2. The monolithic solution scheme

The previous variational forms (6,7) along with the material behavior lead to the kinematic formulation of the 2-field problem with the displacement field and the pressure field as unknowns: $\underline{U} \in \mathcal{U}^{[0,T]}$, $p \in \mathcal{P}^{[0,T]}$ and $\forall t \in [0, T]$

$$\begin{aligned} \forall \underline{U}^* \in \mathcal{U}_0, \quad & \int_{\Omega} \text{Tr}[\varepsilon(\underline{U}) \mathbf{D}\varepsilon(\underline{U}^*)] d\Omega - \int_{\Omega} b p \text{Tr}\varepsilon(\underline{U}^*) d\Omega = \int_{\partial_2 \Omega} \underline{F}_d \cdot \underline{U}^* dS \\ \forall p^* \in \mathcal{P}_0, \quad & \int_{\Omega} \underline{\text{grad}} p \cdot \mathbf{H} \underline{\text{grad}} p^* d\Omega + \int_{\Omega} \dot{p} \frac{1}{Q} p^* d\Omega + \int_{\Omega} b p^* \text{Tr}\dot{\varepsilon} d\Omega = \int_{\partial_4 \Omega} w_d p^* dS \end{aligned}$$

Using the previous space discretization, this leads to the coupled global system of equations at each time step:

$$\begin{aligned} KU - Np &= f_d \\ Hp + S\dot{p} + N^T \dot{U} &= g_d \end{aligned}$$

K , H and S are the stiffness, permeability and compressibility matrices; N is the coupling term, f_d are the generalized forces corresponding to \underline{F}_d and g_d is the generalized flux corresponding to w_d . The previous formulation is symmetrized by derivating the first group of equations with respect to time, leading to:

$$\begin{bmatrix} K & -N \\ -N^T & -S \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{U} \\ \dot{p} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -H \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dot{f}_d \\ -g_d \end{bmatrix}$$

With the same integration scheme, this diffusion-type incremental problem at time step t_{i+1} is:

$$\begin{bmatrix} K & -N \\ -N^T & -S - \theta \Delta t H \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ p \end{bmatrix}_{i+1} = C_i \quad (15)$$

with the given right-hand side:

$$C_i = \Delta t \begin{bmatrix} \dot{f}_d \\ -g_d \end{bmatrix}_{i+\theta} + \begin{bmatrix} K & -N \\ -N^T & -S + (1-\theta)\Delta t H \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ p \end{bmatrix}_i$$

Note that the iteration matrix depends on the time step Δt ; even for a linear problem, the use of a variable time step requires some refactorization of this matrix. The cost increase for a direct coupled simulation is also apparent on this matrix: it is due, on the one hand, to the number of degrees of freedom, which include both the displacement and the pore pressure unknowns, and, on the other hand, to the increase in bandwidth, even with a good renumbering scheme.

The time interval studied corresponds effectively to the transient part of the soil response: Figure 4 shows the evolution of the maximum pore pressure over the time interval $[0, T]$.

4.3. Iterated Standard Parallel Procedure

This section briefly recalls the ISPP strategy [15], in order to compare it to the LATIN strategy.

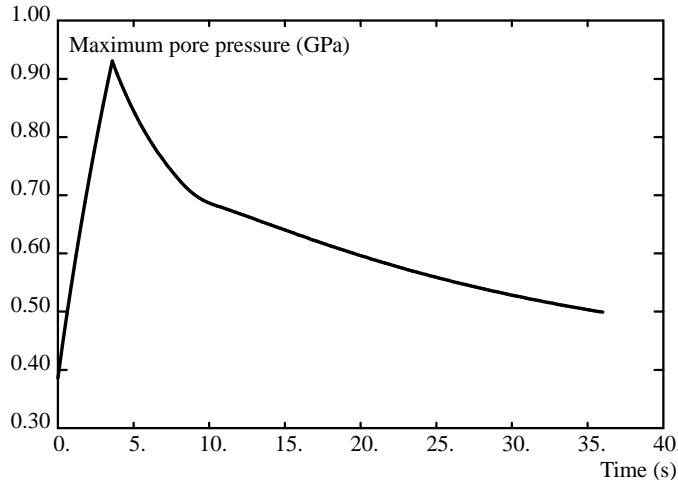


Figure 4. Maximum pore pressure for the transient evolution

Using the so-called monolithic formulation (15), the scheme consists of partitioning the iteration matrix, in Gauss-Seidel fashion, into diagonal and off-diagonal blocks (coupling terms). Using the predictor

$$\begin{bmatrix} U \\ p \end{bmatrix}_{i+1}^p = \begin{bmatrix} U \\ p \end{bmatrix}_i$$

the uncoupled partitioned problem is:

$$\begin{bmatrix} K & 0 \\ 0 & -S - \theta \Delta t H \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ p \end{bmatrix}_{i+1} = \begin{bmatrix} 0 & N \\ N^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ p \end{bmatrix}_{i+1}^p + C_i \quad (16)$$

Convergence is achieved by subiteration using the new evaluation of the solution at t_{i+1} as the new predictor; this is required to recover the consistency of the scheme. With an inconsistent scheme, keeping the mesh size constant while reducing the time step would cause the algorithm to converge toward an incorrect solution (see, for instance, [21]).

Another interesting property of a partitioned scheme is its unconditional stability. It is possible to stabilize several schemes with dedicated techniques, such as in [17, 23], or by condensing one type of unknown onto the others; (for further description see, for instance, [15, 19]). These latter techniques suffer from high computational cost because of the condensation step which destroys the sparsity of the operators. Finally, a good convergence rate is a key to computational efficiency.

Typically, the ISPP scheme is a consistent, yet conditionally stable, algorithm. To improve convergence of this fixed-point method with strong coupling, one needs to apply relaxation at each subcycle, transforming the Gauss-Seidel technique into a Successive OverRelaxation (SOR) technique (see, for instance, [1]).

The method's parameters are the number of subiterations n_{sub} and the relaxation parameter ω .

4.4. First results and comparison

The monolithic approach, the ISPP and the LATIN method were all implemented into the industrial FE code Cast3M (formerly Castem 2000) [22] developed at the CEA in Saclay, France. To compare a

given solution \mathbf{s} obtained using the LATIN method or the ISPP with the reference solution $\bar{\mathbf{s}}$ obtained using the monolithic incremental approach, the following error was used:

$$\eta(\mathbf{s}) = \frac{e(\mathbf{s} - \bar{\mathbf{s}})}{e(\bar{\mathbf{s}})}$$

As a first test, the calculation was performed using the LATIN method without time-space representation of the unknowns. The search direction parameters (9) were optimized and set to $t_m = 0.015t_c$ and $t_h = 0.030t_c$, where t_c is a characteristic time obtained from dimensional analysis: $t_c = L^2/(QH)$ where L is the width of the structure. In the present example, $t_c = 148$ s.

Figure 5 shows the influence of the choice of the parameters on the convergence rate, with the evolution of the previous error η versus iteration number n_{it} . It is more sensitive to the fluid parameter t_h than the solid one t_m . As a good search direction cannot be chosen in practise by testing the convergence this way, an automatic evaluation of the parameters t_m and t_h would be of interest.

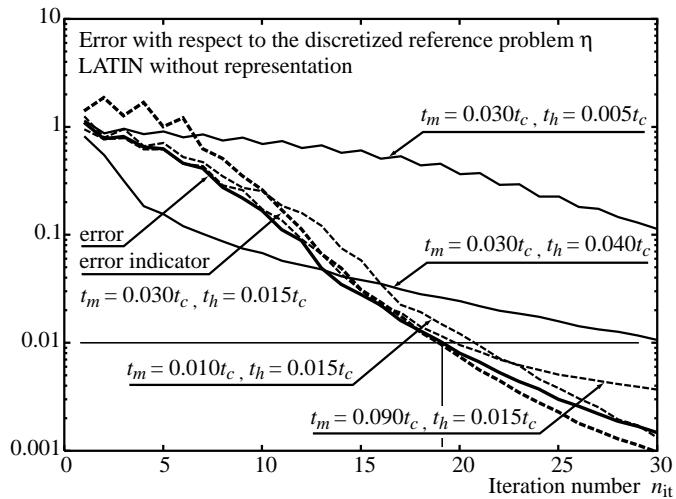


Figure 5. Convergence of the LATIN method without representation

With the same discretization as for the monolithic approach, a linear stage of the LATIN method consists of solving, at each time step t_i , the two independent problems (12,13):

$$\begin{aligned} L\dot{U}_i &= B_u^T \hat{\mathbf{A}}_i + f_{di} \\ [H + R]p_i &= B_p^T \hat{\alpha}_i + g_{di} \end{aligned}$$

Matrices L and R arise from the search directions and, with the particular form (9), one gets $L = t_m K$ and $R = \frac{1}{t_h} S$. Note that the time step Δt does not appear on the left-hand sides; therefore, each of the matrices L and $[H + R]$ requires only one factorization, whether an adaptive time step is used or not. Finally, the right-hand sides are calculated in such a way that:

$$U^T B_u^T \hat{\mathbf{A}} = \int_{\Omega} \text{Tr}[\hat{\mathbf{A}} \varepsilon(\underline{U})] d\Omega \quad \text{and} \quad p^T B_p^T \hat{\alpha} = \int_{\Omega} \hat{\alpha} p d\Omega$$

The local stage is performed by integrating in time the small ODE system (10) at each Gauss point of each element.

Concerning the ISPP, Figure 6 shows the influence of the relaxation parameter ω , with the evolution of the error η versus the number of subcycling per time step n_{sub} . At each subcycling, the ISPP solves the two independant problems in (16). In this test case, a constant time step is used, so the left hand side is only factorized once. An optimum value exists near $\omega = 0.5$, whereas large values (close to 1) impair convergence.

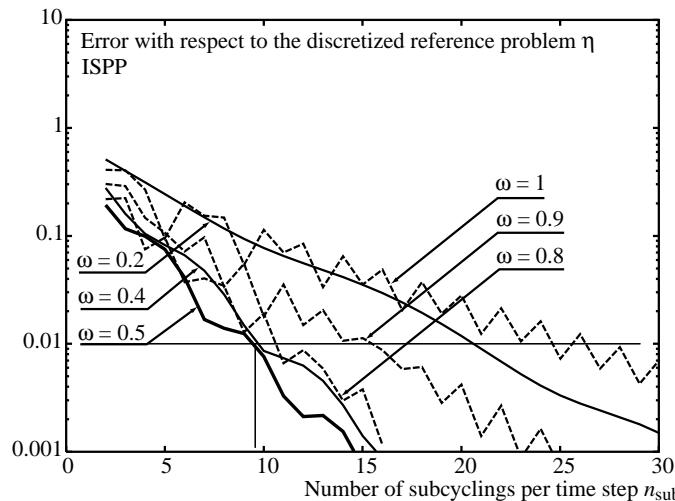


Figure 6. Convergence of the ISPP

To compare the optimal cases for the LATIN method and the ISPP, one has to notice that in both cases, the number of uncoupled global resolutions is equal to the iteration number n_{it} or the subcycling number n_{sub} multiplied by the number of time steps (120 in this example) for the solid part as well as for the fluid part. For this example, the number of global, linear and uncoupled resolutions needed to achieve a given level of accuracy of the solution is about twice for the LATIN method that required by the ISSP approach.

This result validates the feasibility of the proposed approach, but the efficiency is not good enough for this strategy to be competitive. To achieve better efficiency, the third principle of the LATIN method, described in the next section, is required.

5. REPRESENTATION OF THE UNKNOWN

The third principle of the LATIN method concerns the use of an appropriate, mechanics-based representation of the unknowns (for instance, the superimposition of radial loads used also for plasticity and viscoplasticity problems). This last principle is required to achieve high computational efficiency, see [12]. This section describes the use of such a representation in multiphysics problems and its potential efficiency. The example presented in the next section was used to validate this approach.

The unknowns of \mathbf{A}_d are sought in the form of sums of products of a scalar time function by a field which depends only on the space variables. For instance, the strain rate is approximated by $\dot{\epsilon}(M, t) = v_0(t)\epsilon(\underline{V}_0) + \sum_j v_j(t)\epsilon(\underline{V}_j)$, where the pairs $(v_k(t), \underline{V}_k(M))$ must be determined automatically by the algorithm. Throughout the iterations, additional pairs may be added if necessary for accuracy;

otherwise, the current space vectors \underline{V}_k remain unchanged and only the time functions v_k are updated. For this purpose, a preliminary stage must be added to the algorithm before the linear stage is applied. In either case, at iteration $n+1$, a correction to the previous approximation must be determined, i.e.: $\mathbf{s}_{n+1} = \mathbf{s}_n + \Delta\mathbf{s}$.

A first version of this principle is described below. It consists of using a representation for the admissible kinematic corrections while the static corrections are calculated along the search direction. Consequently, the static quantities are not strictly admissible unless convergence has been reached. Computing admissible static quantities would require an additional numerical effort [12].

5.1. Linear stage with representation at iteration $n+1$

The objective of this stage is to add one pair (for the sake of simplicity) to the previous set of radial loads which represents the kinematic unknowns.

Solid part. The *strain correction* is sought in the approximate form $\Delta\varepsilon = v\varepsilon(\underline{V})$, where $v(t)$ is a scalar time function and $\underline{V}(M) \in \mathcal{U}_0$. In order to determine the pair (v, \underline{V}) uniquely, a normalization is enforced, e.g. $\|\varepsilon(\underline{V})\|_{\mathbf{L}}^2 = 1$. Once the strain correction has been obtained, the stress is computed along the search direction (11):

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{L}\dot{\varepsilon}_{n+1} - \hat{\mathbf{A}}_{n+1/2} = \mathbf{L}\Delta\varepsilon - \Delta\hat{\mathbf{A}} \quad \text{with} \quad \Delta\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}_{n+1/2} - \mathbf{L}\dot{\varepsilon}_n$$

The unknown pair (v, \underline{V}) is sought such that the stress is weakly admissible, i.e.:

$$\forall \underline{U}^* = v^*\underline{V} + v\underline{V}^* \in \mathcal{U}_0^{[0,T]}, \quad \int_0^T \int_{\Omega} \text{Tr}[\boldsymbol{\sigma}\varepsilon(\underline{U}^*)] d\Omega dt = \int_0^T \int_{\partial_2\Omega} \underline{F}_d \cdot \underline{U}^* dS dt$$

With the proposed normalization, (v, \underline{V}) is such that:

$$v|_t = \int_{\Omega} \text{Tr}[\Delta\hat{\mathbf{A}}\varepsilon(\underline{V})] d\Omega + \int_{\partial_2\Omega} \underline{F}_d \cdot \underline{V} dS$$

$$\forall \underline{V}^* \in \mathcal{U}_0, \quad \int_{\Omega} \text{Tr}[\varepsilon(\underline{V}) \mathbf{L}\varepsilon(\underline{V}^*)] d\Omega = \int_0^T \frac{v}{\|v\|_T^2} \left(\int_{\Omega} \text{Tr}[\Delta\hat{\mathbf{A}}\varepsilon(\underline{V}^*)] d\Omega + \int_{\partial_2\Omega} \underline{F}_d \cdot \underline{V}^* dS \right) dt$$

This coupled system of equations is solved with a fixed-point method and the number of substeps is usually small. The global system is no more solved at each time step, but only once for each given weighting time function $v(t)$.

Once discretized in space, these equations become:

$$V^T L V = 1 \tag{17}$$

$$v|_t = V^T (B_u^T \Delta\hat{\mathbf{A}} + f_d) \tag{18}$$

$$L V = \int_0^T \frac{v}{\|v\|_T^2} (B_u^T \Delta\hat{\mathbf{A}} + f_d) dt \tag{19}$$

where superscript T designates transposition and, as previously, $B_u^T \Delta\hat{\mathbf{A}}$ are the generalized forces that balance the field $\Delta\hat{\mathbf{A}}$. The usual initial guess for the time function in order to initialize the fixed point is the error indicator in time from the previous iteration. Several indicators may be used to stop the fixed point. For instance, one can monitor the stationarity of the fixed-point method: if (v_0, \underline{V}_0) is the

previous pair and (v, \underline{V}) the current pair, an appropriate indicator is:

$$\xi^2 = \frac{\frac{1}{2} \int_0^T \|v\varepsilon(\underline{V}) - v_0\varepsilon(\underline{V}_0)\|_{\mathbf{L}}^2 dt}{\frac{1}{2} \int_0^T \|v\varepsilon(\underline{V})\|_{\mathbf{L}}^2 dt} = \frac{\frac{1}{2} (\|v\|_T^2 + \|v_0\|_T^2) - \int_0^T vv_0 dt V_0^T LV}{\frac{1}{2} \|v\|_T^2}$$

The algorithm corresponding to the solid linear stage is described in Table II.

Calculate the right-hand side	$\hat{f} \leftarrow B_u^T (\mathbf{L}\hat{\varepsilon}_{n+1/2} - \hat{\sigma}_{n+1/2} - \mathbf{L}\varepsilon_n) + f_d$
Initialize the time function	$v \leftarrow \ \hat{\varepsilon}_{n+1/2} - \varepsilon_n\ _{\mathbf{L}}$
Loop on the fixed point	
Solve	$LV = \int_0^T \frac{v}{\ v\ _T^2} \hat{f} dt = \tilde{f}$
Normalize	$\beta \leftarrow (\tilde{f}^T V)^{1/2}$
	$V \leftarrow \beta^{-1} V$
	$v \leftarrow \beta v$
Stopping criteria	for the pair (v, V)
Recalculate the time function	$v \leftarrow V^T \hat{f}$
End of loop	

Table II. The solid linear stage algorithm at iteration $n+1$

Fluid part. The previous scheme for the solid part of the multiphysics problem must be extended to the hydraulic components (p, \underline{Z}) and (q, \underline{W}) in the same way.

For instance, the *pressure correction* has the following approximate expression: $\Delta p = \pi P$ and $\Delta \underline{Z} = \pi \underline{\text{grad}} P$, where $\pi(t)$ is a scalar time function and $P(M) \in \mathcal{P}_0$. This time, the useful normalization is $\|P\|_r^2 + \|\underline{\text{grad}} P\|_{\mathbf{H}}^2 = 1$.

The corresponding static unknowns are obtained with the search direction (11):

$$\begin{aligned} \underline{W} &= (\hat{W}_{n+1/2} - \mathbf{H}\hat{\underline{Z}}_{n+1/2}) + \mathbf{H}\underline{Z}_{n+1} = \mathbf{H}\underline{Z}_{n+1} = \mathbf{H}\Delta \underline{Z} + \mathbf{H}\underline{Z}_n \\ q &= rp_{n+1} - \hat{\alpha}_{n+1/2} = r\Delta p - \hat{\alpha}_{n+1/2} + rp_n \end{aligned}$$

The best pair (π, P) is the one which achieves weak static admissibility:

$$\forall P^* = \pi^* P + \underline{\text{grad}} P^* \in \mathcal{P}_0^{[0,T]}, \quad \int_0^T \int_{\Omega} (\underline{W} \cdot \underline{\text{grad}} p^* + qp^*) d\Omega dt = \int_0^T \int_{\partial_4 \Omega} w_d p^* dS dt$$

With the proposed normalization, (π, P) is such that:

$$\pi|_t = \int_{\partial_4 \Omega} w_d P dS + \int_{\Omega} (\hat{\alpha}_{n+1/2} - rp_n) P d\Omega - \int_{\Omega} \underline{Z}_n \mathbf{H} \underline{\text{grad}} P d\Omega$$

and

$$\begin{aligned} \forall P^* \in \mathcal{P}^0, \quad \int_{\Omega} (PrP^* + \underline{\text{grad}} P \cdot \mathbf{H} \underline{\text{grad}} P^*) d\Omega &= \\ &= \int_0^T \frac{\pi}{\|\pi\|_T^2} \left(\int_{\partial_4 \Omega} w_d P^* dS + \int_{\Omega} (\hat{\alpha}_{n+1/2} - rp_n) P^* d\Omega - \int_{\Omega} \underline{Z}_n \mathbf{H} \underline{\text{grad}} P^* d\Omega \right) dt \end{aligned}$$

This can be solved with another fixed-point method. Using spatial discretization, the problem to be solved is:

$$P^T[H + R]P = 1 \quad (20)$$

$$\pi = P^T(B_p^T \hat{\alpha}_{n+1/2} - [H + R]p_n + g_d) \quad (21)$$

$$[H + R]P = \int_0^T \frac{\pi}{\|\pi\|_T^2} (B_p^T \hat{\alpha}_{n+1/2} - [H + R]p_n + g_d) dt \quad (22)$$

As previously, $B_p^T \hat{\alpha}_{n+1/2}$ is the generalized flux that balances the field $\hat{\alpha}_{n+1/2}$. Both the initialization and the termination criteria are similar to the previous ones.

The algorithm for the fluid linear stage described in Table III is very similar to its solid counterpart.

Calculate the right-hand side	$\hat{g} \leftarrow B_p^T(r\hat{p}_{n+1/2} - \hat{q}_{n+1/2}) - [H + R]p_n + g_d$
Initialize the time function	$\pi \leftarrow \ \hat{p}_{n+1/2} - p_n\ _{Q^{-1}}$
Loop on the fixed point	
Solve	$[H + R]P = \int_0^T \frac{\pi}{\ \pi\ _T^2} \hat{g} dt = \tilde{g}$
Normalize	$\beta \leftarrow (\tilde{g}^T P)^{1/2}$
	$P \leftarrow \beta^{-1}P$
	$\pi \leftarrow \beta\pi$
Stopping criteria	for the pair (π, P)
Recalculate the time function	$\pi \leftarrow P^T \hat{g}$
End of loop	

Table III. The fluid linear stage algorithm at iteration $n + 1$

Efficiency of the representations. The space fields are determined by solving a small number of global systems (19,22) (within the fixed-point subiterations), while the time functions are calculated by integrating a small number of differential equations (moreover, in the linear case treated here, these equations are explicit (18,21)). If the convergence rate is similar to that of the case without representation, significant performance improvement can be expected. This will be illustrated on the example of the following section.

In order to prevent degeneration of the sets of space fields, orthonormalization may be performed so that $V_i^T L V_j = \delta_{ij}$ for the solid fields and $P_i^T [H + R] P_j = \delta_{ij}$ for the fluid fields. During this orthonormalization process, if the latest fields generated are too dependent on the previous ones, they may be skipped.

5.2. Initial solution

To start the algorithm using the same kind of representation for s_0 , let us observe that this initial solution can be represented as the superimposition of as many radial loads as there are loading parameters.

Indeed, if (for the sake of simplicity) the loading depends on only one parameter, i.e. if $\underline{F}_d = \lambda(t)\underline{F}(M)$ and $w_d = \mu(t)\underline{G}(M)$, the initial solution for the solid part is obtained with $\underline{U} = v_0(t)\underline{V}_0(M) \in \mathcal{U}^{[0,T]}$ and

$$\forall t \in [0, T], \quad \forall \underline{V}^* \in \mathcal{U}_0, \quad \int_{\Omega} \text{Tr}[\varepsilon(\underline{U}) \mathbf{L} \varepsilon(\underline{V}^*)] d\Omega = \int_{\partial_2 \Omega} \lambda \underline{F} \cdot \underline{V}^* ds$$

Therefore, $v_0 = \lambda$ and $LV_0 = f$, where f are the generalized forces corresponding to \underline{F} .

Then, $\sigma_0 = v_0 \mathbf{L} \underline{\varepsilon}(\underline{V}_0)$. Let us note that since there are as many pairs as there are loading parameters the initial stress field is statically admissible.

The initial solution for the fluid part is obtained with $p = \pi_0 P_0 \in \mathcal{P}^{[0,T]}$ and

$$\forall t \in [0, T], \quad \forall P^* \in \mathcal{P}_0, \quad \int_{\Omega} (prP^* + \underline{\text{grad}} p \cdot \mathbf{H} \underline{\text{grad}} P^*) d\Omega = \int_{\partial_4 \Omega} \mu G P^* dS$$

Therefore, $\pi_0 = \mu$ and $[H + R]P_0 = g$, where g is the generalized flux corresponding to G .

Similarly, $\underline{W}_0 = \pi_0 \mathbf{H} \underline{\text{grad}} P_0$ and $q_0 = \pi_0 r P_0$ are statically admissible.

5.3. Preliminary stage at iteration $n + 1$

The objective of the preliminary stage is to update the time functions of the various representations. This stage is much simpler if the space functions are orthogonalized each time a new space function is added to the previous set.

Strain correction. In the preliminary stage, the update is sought through a correction of the form $\Delta \dot{\varepsilon} = \sum_j w_j \underline{\varepsilon}(\underline{V}_j)$, where w_j are the time functions to be determined while \underline{V}_j , at this stage, are known. As noted above, if the space fields are orthonormalized, i.e. if $V_j^T L V_k = \delta_{jk}$, the unknown time functions are solutions of the uncoupled system:

$$w_j = V_j^T (B_u^T \Delta \hat{\mathbf{A}} + f_d)$$

An equivalent scheme is to recalculate the time functions directly, i.e. $v_j + w_j$, instead of their correction. In this case, the problem is to have $\sum_j v_j \mathbf{L} \underline{\varepsilon}(\underline{V}_j) - \hat{\mathbf{A}}_{n+1/2}$ weakly homogeneously admissible; this leads to:

$$v_j = V_j^T B_u^T \hat{\mathbf{A}}_{n+1/2}$$

Pressure correction. The update for the fluid part is also sought through a correction of the form $\Delta p = \sum_j \mu_j P_j$, where μ_j are the time functions to be determined whereas P_j are known at this stage. Once again, if the space fields are orthonormalized, i.e. if $P_j^T [H + R] P_k = \delta_{jk}$, the unknown time functions are solutions of the uncoupled system:

$$\mu_j = P_j^T (B_p^T \hat{\alpha}_{n+1/2} - [H + R] p_n + g_d)$$

The same remark as for the solid part applies: the problem is equivalent to modifying the time functions with:

$$\pi_j = P_j^T B_p^T \hat{\alpha}_{n+1/2}$$

6. EXAMPLE AND COMPARISON OF EFFICIENCIES

Let us consider again the plane strain problem of Section 4. With the proposed representation, the algorithm is modified as described in Table IV.

Solid initialization	solve a global mechanical problem to get (v_0, V_0)
Fluid initialization	solve a global hydraulic problem to get (π_0, P_0)
Loop on iterations	
Local stage	solve the local differential systems to get $(\hat{\varepsilon}, \hat{\sigma}), (\hat{p}, \hat{q})$
Stopping criteria	compute error indicators
Solid preliminary stage	update time functions v_j
If a new pair is required	
Solid linear stage	fixed point on the global mechanical problem to get (v, V)
Orthonormalization	modification of (v, V) and time functions v_j
End if	
Fluid preliminary stage	update time functions π_j
If a new pair is required	
Fluid linear stage	fixed point on the global hydraulic problem to get (π, P)
Orthonormalization	modification of (π, P) and time functions π_j
End if	
End of loop	

Table IV. The LATIN algorithm for multiphysics problem

In this test, the time-space representation of the admissible fields was added and, this time, solid and fluid linear stages always followed the preliminary stage. In other terms, at each iteration, one spatial field was added to the previous set for the solid part and one for the fluid part. Moreover, the number of fixed-point subiterations for each linear stage was set to 1; in this case, only one global mechanical problem and one global hydraulic problem were solved at each iteration. The same search direction parameters were used for this test case, as for the previous one.

Figure 7 shows the evolution of the error when such a representation is used compared to the previous case without representation. For this situation, using a representation does not impair the convergence rate at all. Thus, the representation is well-suited to this kind of problem. Throughout the following discussion, the number of subiterations is kept equal to 1 (only one global resolution for the fluid and one for the solid at each iteration).

In order to avoid the generation of worthless space functions, a criterion based on the efficiency of the preliminary step can be used. If the preliminary stage reduces the error with respect to the previous iteration significantly, one can expect that adding a new space function is not necessary. The error estimations provide such information. At iteration n , \tilde{s}_n designates the solution immediately after the preliminary stages and s_n the solution after the linear stages (if such stages are performed). The relevant indicators are designated by \tilde{e}_n^S , \tilde{e}_n^F , e_n^S and e_n^F , where superscripts 'S' and 'F' stand for the solid part and the fluid part respectively:

$$\begin{aligned} (\tilde{e}_n^S)^2 &= \frac{\int_0^T \|\tilde{\varepsilon}_n - \hat{\varepsilon}_{n-1/2}\|_{\mathbf{D}}^2 dt}{\frac{1}{2} \int_0^T \|\tilde{\varepsilon}_n + \hat{\varepsilon}_{n-1/2}\|_{\mathbf{D}}^2 dt} & (\tilde{e}_n^F)^2 &= \frac{\int_0^T \|\tilde{p}_n - \hat{p}_{n-1/2}\|_{Q^{-1}}^2 dt}{\frac{1}{2} \int_0^T \|\tilde{p}_n + \hat{p}_{n-1/2}\|_{Q^{-1}}^2 dt} \\ (e_n^S)^2 &= \frac{\int_0^T \|\varepsilon_n - \hat{\varepsilon}_{n-1/2}\|_{\mathbf{D}}^2 dt}{\frac{1}{2} \int_0^T \|\varepsilon_n + \hat{\varepsilon}_{n-1/2}\|_{\mathbf{D}}^2 dt} & (e_n^F)^2 &= \frac{\int_0^T \|p_n - \hat{p}_{n-1/2}\|_{Q^{-1}}^2 dt}{\frac{1}{2} \int_0^T \|p_n + \hat{p}_{n-1/2}\|_{Q^{-1}}^2 dt} \end{aligned}$$

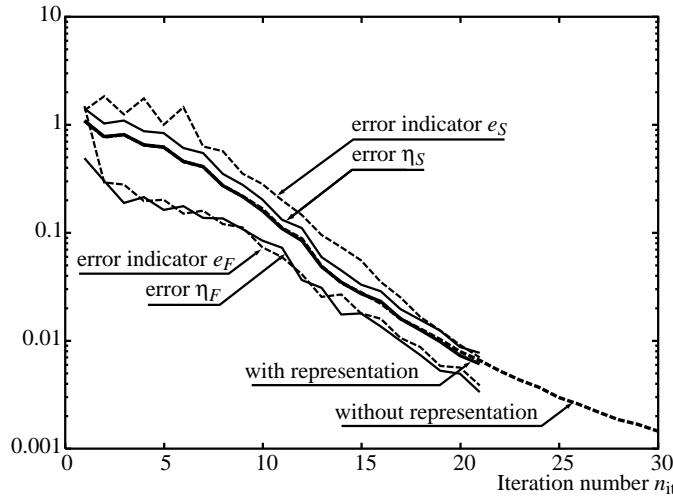
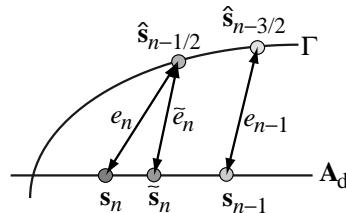
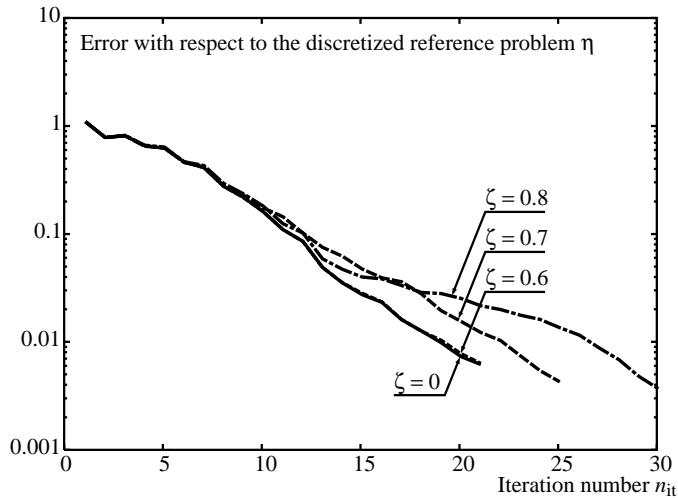


Figure 7. Evolution of the error and error indicators with the LATIN approach

Every time $\frac{\tilde{e}_n^S}{e_{n-1}^S} < \zeta$ the solid linear stage may be skipped. In the same way, if $\frac{\tilde{e}_n^F}{e_{n-1}^F} < \zeta$, the fluid linear stage may be skipped, see Figure 8. Figure 7 also shows the evolution of these various error indicators with the previous representation of the unknowns. The errors with respect to the reference solution η^S (for the solid) and η^F (for the fluid) are derived in the same way.

Figure 8. Indicators at iteration n

The overall results are illustrated in Figure 9, which shows the evolution of the error vs. iterations. Since the cost of the global mechanical problem and the cost of the global hydraulic problem are not the same, Figure 10 displays the error as a function of the number of strain space fields generated n_S and as a function of the number of pore pressure fields generated n_F for different values of the threshold ζ . In the most interesting case, when $\zeta = 0.8$, only 8 global mechanical resolutions and 16 global hydraulic resolutions are required to get an error η less than 1%. If $\zeta = 0$, i.e. if one pair for each physics is added at each iteration, 18 global resolutions are required for each physics. In comparison, the basic algorithm with no representation requires 18×120 global resolutions for the solid part and the same number for the fluid part in order to get the same accuracy, whereas the ISPP scheme requires 9×120 resolutions. Thus, in terms of number of global resolutions, there is a ratio of 90. Of course, there are other costs in the algorithm than those related to global resolutions, but for large-scale problems these

Figure 9. Evolution of the error for several thresholds ζ

b	ISPP n_{sub}	LATIN ($\zeta = 0$)	LATIN ($\zeta = 0.8$)		
		$n_{\text{it}} = n_S = n_F$	n_{it}	n_S	n_F
0.25	6	19	20	4	9
0.5	8	18	20	6	10
0.75	9	19	26	9	13
0.9	10	20	22	7	13
1	13	21	21	8	12

Table V. Comparative costs for the ISPP (with $\omega = 0.5$), and with the LATIN method (with $t_m = 0.015t_c$ and $t_h = 0.030t_c$) versus Biot's coefficient b

tend to dominate. Nevertheless, it would be interesting to perform a complexity analysis to quantify these costs more precisely.

The last test concerns the behaviour of the approaches with respect to the coupling coefficient b . Table V shows the number of subcyclings for the ISPP, and the number of space fields for the LATIN method, to reach convergence ($\eta \leq 1\%$). The cost of the ISPP clearly increases when the coupling is stronger. As the LATIN is somehow a self-adaptive strategy, the cost does not follow so clearly the coupling and is almost constant.

7. CONCLUSION

On the example above, using the basic LATIN approach with no mechanics-based approximation to solve the linear stage over the entire domain and the entire time interval, the number of global, linear uncoupled resolutions needed to achieve a given level of solution accuracy was about twice that required by the ISSP approach.

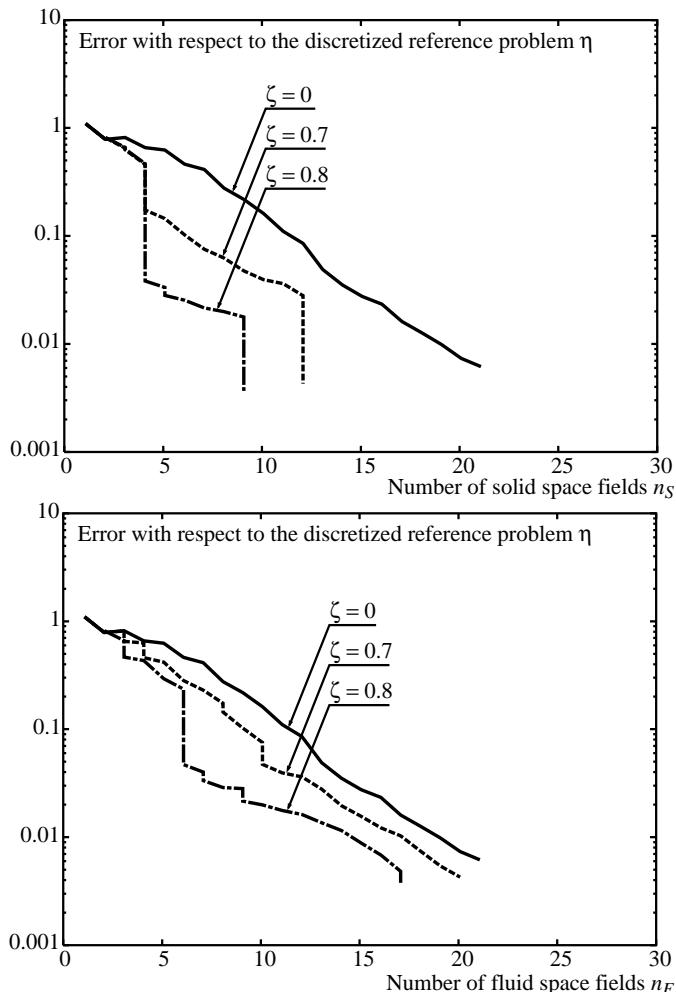


Figure 10. Evolution of the error versus the number of space fields generated

In this paper, the time-space approximation is tested and appears to be well suited to multiphysics problems. Since the use of such an approximation did not influence the convergence rate of the proposed algorithm, the efficiency was significantly improved, particularly with the adjunction of a strategy to limit the number of global resolutions. The number of constitutive relation integrations is always greater than with the ISSP scheme, but these involve only local computations at each integration point. Thus, the proposed strategy appears to be competitive from an efficiency point of view.

Nevertheless, other improvements, such as the automatic determination of the search direction parameters, would be welcome. The coupling between two different codes (one for each physical problem) can be developed extensively. The ability for the codes to exchange only the few pairs representing the solution during the iterative process seems attractive in that it reduces the amount of information interchange.

Let us also mention that a multiscale computational strategy similar to that used in [13] could be easily applied in this context with great potential benefit.

REFERENCES

1. R. Barrett, M. Berry, T. F. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, and H. V. der Vorst. *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*. SIAM, 1994.
2. F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*, volume 15 of *Computational Mathematics*. Springer, 1991.
3. O. Coussy. *Mechanics of porous continua*. John Wiley & Sons, 1995.
4. D. Dureisseix and P. Ladevèze. *A multi-level and mixed domain decomposition approach for structural analysis*, volume 218 of *Contemporary Mathematics, Domain Decomposition Methods 10*, pages 246–253. AMS, 1998.
5. D. Dureisseix, P. Ladevèze, and B. A. Schrefler. LATIN computational strategy for multiphysics problems. In *Proceedings of the 2nd European Conference on Computational Mechanics (ECCM)*, 2001.
6. D. Dureisseix, P. Ladevèze, and B. A. Schrefler. LATIN strategy for coupled fluid-solid problems in the domain. In K. J. Bathe, editor, *Proceedings of the First M.I.T. Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics*, pages 1143–1146. Elsevier, 2001.
7. C. Farhat and M. Lesoinne. Two efficient staggered algorithms for the serial and parallel solution of three-dimensional nonlinear transient aeroelastic problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 182:499–515, 2000.
8. C. A. Felippa and T. L. Geers. Partitioned analysis for coupled mechanical systems. *Engineering Computation*, 5:123–133, 1988.
9. C. A. Felippa and K. C. Park. Staggered transient analysis procedures for coupled mechanical systems: formulation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 24:61–111, 1980.
10. GRECO. Scientific report, GRECO Géomatériaux, 1990.
11. P. Ladevèze. Sur une famille d’algorithmes en mécanique des structures. In *Comptes-Rendus de l’Académie des Sciences*, volume 300 of *IIb*, pages 41–44, 1985.
12. P. Ladevèze. *Nonlinear Computational Structural Mechanics — New Approaches and Non-Incremental Methods of Calculation*. Springer Verlag, 1999.
13. P. Ladevèze and D. Dureisseix. A micro / macro approach for parallel computing of heterogeneous structures. *International Journal for Computational Civil and Structural Engineering*, 1:18–28, 2000.
14. R. W. Lewis, B. A. Schrefler, and L. Simoni. Coupling versus uncoupling in soil consolidation. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 15:533–548, 1991.
15. R. Matteazzi, B. Schrefler, and R. Vitaliani. *Comparisons of partitioned solution procedures for transient coupled problems in sequential and parallel processing*, pages 351–357. Advances in Computational Structures Technology. Civil-Comp Ltd, 1996.
16. R. Ohayon and J.-P. Morand. *Fluid-Structure Interaction: Applied Numerical Methods*. John Wiley & Sons, 1995.
17. K. C. Park. Stabilization of partitioned solution procedure for pore fluid-soil interaction analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 19:1669–1673, 1983.
18. S. Piperno, C. Farhat, and B. Larroutuou. Partitioned procedures for the transient solution of coupled aeroelastic problems. Part I: model problem, theory and two-dimensional application. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 124:79–112, 1995.
19. A. V. Saetta and R. V. Vitaliani. Unconditionally convergent partitioned solution procedure for dynamic coupled mechanical systems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 33:1975–1996, 1992.
20. B. A. Schrefler and R. W. Lewis. *The Finite Element Method in the Static and Dynamic Deformation and Consolidation of Porous Media*. Wiley, 2nd edition, 1998.
21. E. Turska and B. A. Schrefler. On convergence conditions of partitioned solution procedures for consolidation problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 106:51–63, 1993.
22. P. Verpeaux, T. Charras, and A. Millard. CASTEM 2000 : une approche moderne du calcul des structures. In J.-M. Fouet, P. Ladevèze, and R. Ohayon, editors, *Calcul des Structures et Intelligence Artificielle*, volume 2, pages 261–271. Pluralis, 1988.
23. O. C. Zienkiewicz, D. K. Paul, and A. H. C. Chan. Unconditionally stable staggered solution procedure for soil-pore fluid interaction problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 26:1039–1055, 1988.
24. O. C. Zienkiewicz, S. Qu, R. L. Taylor, and S. Nakazawa. The patch test for mixed formulations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 23:1873–1883, 1986.
25. O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor. *The finite element method*. Butterworth Heinemann, 5th edition, 2000.

Principaux résultats et perspectives. Sans utiliser *a priori* de décomposition de domaine, l'objectif était dans un premier temps d'avoir une stratégie adaptée au couplage multiphysique qui puisse être attrayante d'un point de vue coût. La faisabilité a été montrée, en utilisant une représentation particulière mais classique des inconnues. Bien entendu, la validation sur des cas plus représentatifs en terme de taille (notamment en tridimensionnel) reste à être effectuée. Néanmoins, la représentation adoptée semble bien adapté au type de problème traité.

L'autre aspect des techniques de partitionnement est la possibilité de faire réaliser chaque analyse physique différente par un code dédié, et à assurer les transferts d'information adéquats entre les deux. C'est la thématique du couplage de code. Minimiser la quantité d'information nécessaire pour itérer est donc intéressante, et les approches LATIN (avec représentation) permettent de réaliser cette minimisation, au prix de la duplication de l'étape locale, voir figure 1.

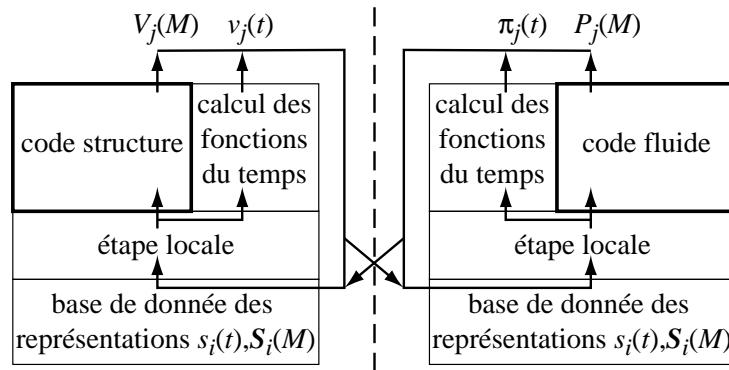


FIG. 1 – Illustration du couplage de code ; duplication de l'étape locale et de la base de donnée (ou partage de celle-ci)

Bien entendu, son utilisation conjointe avec l'aspect multiéchelle en espace en décomposition de domaine est l'étape suivante. Au vu du cadre employé, elle ne devrait pas poser de problème particulier, en ce sens que les performances des deux aspects (partitionnement physique et décomposition de domaine) devraient ajouter leurs performances.

Le deuxième volet est bien sur celui de la prise en compte des échelles de temps différentes. L'objectif est de bâtir une stratégie tirant parti de l'aspect multiéchelle en temps dans le problème. Ces aspects seront bien entendu mis en valeur lors du traitement de problèmes dynamiques où les effets des échelles en espace et en temps sont couplées par l'aspect propagatif de la solution, surtout en présence d'hétérogénéités. Dans cette thématique, on peut trouver les approches développées pour les matériaux hétérogènes [Fish et Chen 01] ainsi que les aspects couplages de schémas d'intégration à différents pas de temps [Gravouil et Combescure 01]. Un exemple inverse où le comportement à plusieurs échelles conduit à une modélisation multiphysique du problème est celui de la compaction et de la mise en forme des matériaux granulaires fins : le procédé employé superpose une action mécanique “lente” de compaction à une vibration

“rapide” produite par exemple par des secousses. À l’échelle macroscopique, cette dernière peut être modélisée comme un phénomène de diffusion de l’agitation [Pattofatto 01] qui agit fortement sur le comportement, en particulier par la brisure des “ponts” qui s’établissent dans ces matériaux assez atypiques.

Sur l’aspect multiéchelle en temps dans une stratégie de calcul multiphysique, la thèse de David Néron vient de débuter ; la question posée est celle de l’homogénéisation en temps, et du cas des non-linéarités matérielles.

Bien entendu, un grand nombre de problèmes multiphysiques couplés différents sont issus de problèmes pratiques : transfert en milieu poreux, vieillissement des matériaux et des structures sous l’action de leur environnement, oxydation des matériaux composites, électromagnétisme et aérodynamique dans les signatures radar, piézoélectricité magnétisme et viscosité des écoulements dans les MEMS (*Micro Electro Mechanical Systems*) ...

La question du contrôle de la qualité de la solution et celle de l’adaptivité sont encore plus présentes dans ce cadre de modèles différents couplés, que dans le cas du seul caractère hétérogène, comme cela a déjà été mentionné précédemment. Les techniques et les principes à mettre en œuvre sont encore une question largement ouverte.

Conclusions et perspectives

Les travaux qui ont été réalisés et présentés dans ce mémoire ont été menés à bien au LMT-Cachan, dans l'équipe “stratégies de calcul et parallélisme”, et plus largement dans le cadre du “pole parallélisme Île de France Sud”. Au travers de ces travaux, plusieurs collaborations ont été engagées (essentiellement avec Charbel Farhat et Bernhard Schrefler) et continuent à être actives. Ces collaborations, et plus généralement les comparaisons entre différentes approches ont permis de confronter, autant que cela était possible, les algorithmes développées à des algorithmes existants. Cette démarche, ainsi que celle qui a été suivie dans les travaux de thèse, consistant à replacer les méthodes dans le cadre pour lequel elles sont conçues (problèmes à grand nombre de degrés de liberté pour les décomposition de domaine), semble essentielle pour se forger une idée juste des performances attendues et des domaines d'utilisation des différentes démarches.

Comme cela a pu être montré dans ce mémoire, et illustré avec les méthodes de décomposition de domaine, la construction d'une stratégie en calcul de structure qui prenne en compte les particularités du problème traité permet d'augmenter les performances. Les approches proposées dans ce cadre sont par contre plus dédiées et moins généralistes. Dit de façon laconique, il faut se positionner entre généralité et efficacité. Dans le cas de l'approche micro-macro, cela s'est traduit par le couplage d'une méthode d'homogénéisation avec un algorithme de décomposition de domaine. Elle devient ainsi une méthode d'homogénéisation automatique qui prend en compte naturellement les effets de bord et peut traiter le cas des milieux non-périodiques. Le cadre posé permet d'intégrer les aspects multiéchelles en espace.

L'évolution de la démarche vers le traitement des problèmes multiphysiques est assez logique dans le sens où ceux-ci présentent des aspects multiéchelles à la fois en espace et en temps. Il faudra alors tirer parti de ces deux aspects pour obtenir des stratégies de calcul performantes. Du côté de la robustesse, il semble important d'intégrer les outils de contrôle de la qualité des solutions pour piloter l'algorithme, le modèle et la discrétisation.

Les domaines d'application potentiels sont très variés. On pourrait reprendre deux exemples d'illustration de nature assez différentes : du côté des composants, la biomécanique conduira à l'analyse couplée chimie-mécanique ; du côté des systèmes, l'intégration de fonctions à petite échelle dans les MEMS¹ conduit à des problèmes couplés piézo-magnéto-mécaniques avec frottement visqueux ... Mes affinités dans le domaine

1. *Micro Electro Mechanical Systems*

des applications, conformément à la facette “technologique” que j’ai notamment développée dans les activités d’enseignement, se portent sur les applications industrielles pour les composants, pièces ou systèmes mécaniques, et sur leurs procédés d’obtention respectifs. Comme cela a pu être souligné dans les exemples donnés dans ce mémoire, tous montrent manifestement une demande pour des outils de simulation multiphysiques, que se soit pour leur conception ou leur optimisation.

Le traitement des problèmes multiphysiques et bien sûr le développement des stratégies de calcul nécessitent l’utilisation d’un certain nombre d’outils. Un atout certain sera un outil informatique modulaire. Les développements requis sont en effet de nature algorithmique ; ils utilisent au niveau inférieur des techniques usuelles comme, dans les travaux réalisés, la résolution d’un problème éléments finis. Bien entendu, la problématique du couplage de code se pose dès que l’on cherche à utiliser des outils dédiés pour chacune des physiques mises en jeu. Le cadre nécessaire sera celui d’un “démonstrateur de performances”, pour tester les potentialités des approches développées et les comparer aux autres techniques disponibles.

Bibliographie

- [Alart et Lebon 93] Alart P. et Lebon F., Multigrid method applied to mixed formulation for frictional contact problem, *Contact Mechanics*, pp. 227–234, Computational mechanics publications, 1993.
- [Alart et al. 00] Alart P., Barboteu M., Le Tallec P. et Vidrascu M., Méthode de schwarz additive avec solveur grossier pour problèmes non symétriques, *Comptes Rendus à l'Académie des Sciences — Analyse numérique*, n° 331, 2000, pp. 399–404.
- [Babuska et al. 94] Babuska I., Strouboulis T., Upadhyay S. K. et Copps K., Validation of a posteriori error estimators by numerical approach, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 37, 1994, pp. 1073–1123.
- [Barboteu et al. 01] Barboteu M., Alart P. et Vidrascu M., A domain decomposition strategy for nonclassical frictional multi-contact problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 190, 2001, pp. 4785–4803.
- [Bois et Hentz 01] Bois C. et Hentz S., *Stratégie de calcul parallèle et multiphysique*, Rapport du DEA Solides, Structures et Systèmes Mécaniques, Université Paris 6 - ENS Cachan, 2001.
- [Bramble et al. 86] Bramble J. H., Pasciak J. E. et Schatz A. H., The construction of preconditioners for elliptic problems by substructuring, I, *Mathematics of Computation*, vol. 47, n° 175, 1986, pp. 103–134.
- [Brezzi et Fortin 91] Brezzi F. et Fortin M., *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*, Springer, 1991, *Computational Mathematics*, vol. 15.
- [Champaney et al. 96] Champaney L., Cognard J.-Y., Dureisseix D. et Ladevèze P., Numerical experimentations of parallel strategies in structural non-linear analysis, *Calculateurs Parallèles*, vol. 8, n° 2, 1996, pp. 245–249.
- [Champaney et al. 97] Champaney L., Cognard J.-Y., Dureisseix D. et Ladevèze P., Large scale applications on parallel computers of a mixed domain decomposition method, *Computational Mechanics*, n° 19, 1997, pp. 253–263.
- [Champaney et al. 99] Champaney L., Cognard J.-Y. et Ladevèze P., Modular analysis of assemblages of 3D structures with unilateral contact conditions, *Computers & Structures*, vol. 73, n° 1-5, 1999, pp. 249–266.
- [Chan et Goovaerts 92] Chan T. F. et Goovaerts D., On the relationship between overlapping and nonoverlapping domain decomposition methods, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, vol. 13, 1992, pp. 663–670.

- [Coffignal *et al.* 83] Coffignal G., Guezel D. et Ladevèze P., Sur une méthode d'encaissement du taux de restitution d'énergie, *Proceedings du 3ème Congrès Int. Meth. Num. de l'Ingénieur*, éd. par Pluralis, pp. 575–584, 1983.
- [Cognard *et al.* 96] Cognard J.-Y., Dureisseix D., Ladevèze P. et Lorong Ph., Expérimentation d'une approche parallèle en calcul de structures, *Revue Européenne des Éléments Finis*, vol. 5, 1996, pp. 197–220.
- [Dostal *et al.* 98] Dostal Z., Friedlander A. et Santos S., *Solution of coercive and semi-coercive contact problems by FETI domain decomposition*, pp. 82–93, AMS, 1998, *Contemporary mathematics*, vol. 218.
- [Dostal *et al.* 00] Dostal Z., Gomes Neto F. A. M. et Santos S. A., Solution of contact problems by FETI domain decomposition with natural coarse space projection, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 190, n° 13–14, 2000, pp. 1611–1627.
- [Dryja et Widlund 95] Dryja M. et Widlund O. B., Schwarz methods of neumann-neumann type for three-dimensional elliptic finite element problems, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 48, n° 2, 1995, pp. 121–155.
- [Duff 86] Duff I. S., Parallel implementation of multifrontal schemes, *Parallel Computing*, vol. 3, 1986, pp. 192–204.
- [Dureisseix 97] Dureisseix D., *Une approche multi-échelles pour des calculs de structures sur ordinateurs à architecture parallèle*, thèse, ENS de Cachan, janvier 1997.
- [Dureisseix 00] Dureisseix D., Quelques méthodes multi-échelles adaptées au calcul de structures, *Journée Φ2AS Tendances Nouvelles en Calcul de Structures*, vol. 24, n° 2, 2000.
- [Dureisseix et Champaney 00] Dureisseix D. et Champaney L., Calcul de structures et parallélisme : un bilan et quelques développements récents, *Mécanique et Industries*, vol. 1, 2000, pp. 43–60.
- [Dureisseix et Farhat 01] Dureisseix D. et Farhat C., A numerically scalable domain decomposition method for the solution of frictionless contact problems, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 50, 2001, pp. 2643–2666.
- [Dureisseix et Ladevèze 98a] Dureisseix D. et Ladevèze P., A 2-level and mixed domain decomposition approach for structural analysis, pp. 246–253, AMS, 1998, *Contemporary mathematics*, vol. 218.
- [Dureisseix et Ladevèze 98b] Dureisseix D. et Ladevèze P., Une approche parallèle et multi-échelles en calcul des structures : exemples et performances, *Revue Européenne des Éléments Finis*, vol. 7, 1998, pp. 73–87.
- [Dureisseix *et al.*] Dureisseix D., Ladevèze P. et Schrefler B. A., A computational strategy for multiphysics problems — application to poroelasticity, *Submitted to International Journal for Numerical Methods in Engineering*.
- [Dureisseix *et al.* 01a] Dureisseix D., Ladevèze P. et Schrefler B. A., Latin computational strategy for multiphysics problems, *Proceedings of the European Conference on Computational Mechanics*, 2001.
- [Dureisseix *et al.* 01b] Dureisseix D., Ladevèze P. et Schrefler B. A., Latin strategy for coupled fluid-solid problems in the domain, *Proceedings of the first MIT Conference*

- on Computational Fluid and Solid Mechanics*, éd. par Bathe K. J., pp. 1143–1146, Elsevier, 2001.
- [Escaig et al. 94] Escaig Y., Vayssade M. et Touzot G., Une méthode de décomposition de domaine multiftonale multiniveaux, *Revue Européenne des Éléments Finis*, vol. 3, 1994, pp. 311–337.
- [Farhat et Roux 91] Farhat C. et Roux F.-X., A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 32, 1991, pp. 1205–1227.
- [Farhat et al. 00] Farhat C., Pierson K. et Lesoinne M., The second generation FETI methods and their application to the parallel solution of large-scale linear and geometrically non-linear structural analysis problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 184, n° 2–4, 2000, pp. 333–374.
- [Farhat et al. 01] Farhat C., Lesoinne M., Le Tallec Patrick, Pierson K. et Rixen D., FETI-DP: a dual-primal unified FETI method - part I: a faster alternative to the two-level FETI method, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 50, n° 7, 2001, pp. 1523–1544.
- [Felippa et al. 01] Felippa C. A., Park K. C. et Farhat C., Partitioned analysis of coupled mechanical systems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 190, n° 24–25, 2001, pp. 3247–3270.
- [Fish et Belsky 95] Fish J. et Belsky V., Multigrid method for periodic heterogeneous media. Part 1 and part 2, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 126, 1995, pp. 1–38.
- [Fish et Chen 01] Fish J. et Chen W., Uniformly valid multiple spatial-temporal scale modeling for wave propagation in heterogeneous media, *Mechanics of Composite Materials and Structures*, vol. 8, 2001, pp. 81–99.
- [Fortin et Glowinski 82] Fortin M. et Glowinski R., Méthodes de lagrangien augmenté, *Méthodes Mathématiques de l'informatique*, éd. par Lions P.-L., 1982.
- [Glowinski et Le Tallec 90] Glowinski R. et Le Tallec P., Augmented lagrangian interpretation of the nonoverlapping Schwarz alternating method, *Third International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*, éd. par Chan T. F., Glowinski R., Péraux J. et Widlund O. B., pp. 224–231, SIAM, 1990.
- [Gravouil et Combescure 01] Gravouil A. et Combescure A., Multi-time-step explicit-implicit method for nonlinear structural dynamics, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 50, n° 1, 2001, pp. 199–226.
- [Herrmann 65] Herrmann L. R., Elasticity equations for incompressible and nearly incompressible materials by a variational theorem, *AIAA Journal*, vol. 3, 1965, pp. 1896–1900.
- [Hochard et al. 97] Hochard C., Ladevèze P. et Prostier L., A trefftz simplified method for the computation of elastic structures, *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences*, vol. 4, n° 2, 1997, pp. 383–396.
- [Klawonn et al. 01] Klawonn A., Widlund O. B. et Dryja M., *Dual-Primal FETI Methods for Three-Dimensional Elliptic Problems with Heterogeneous Coefficients*, Technical Report n° TR 815, Computer Science Department, Courant Institute of Mathematical Sciences, 2001, Submitted to SIAM Journal on Numerical Analysis.

- [Ladevèze 96] Ladevèze P., *Mécanique non-linéaire des structures — Nouvelle approche et méthodes de calcul non incrémentales*, Paris, Hermès, 1996.
- [Ladevèze et Dureisseix 97] Ladevèze P. et Dureisseix D., *Une nouvelle stratégie de calcul parallèle et micro / macro en mécanique non-linéaire*, Rapport Interne du LMT-Cachan n° 188, 1997.
- [Ladevèze et Dureisseix 99] Ladevèze P. et Dureisseix D., Une nouvelle stratégie de calcul micro/macro en mécanique des structures, *Comptes Rendus à l'Académie des Sciences — Mécanique des Solides et des Structures*, n° 327, 1999, pp. 1237–1244.
- [Ladevèze et Dureisseix 00] Ladevèze P. et Dureisseix D., A micro / macro approach for parallel computing of heterogeneous structures, *International Journal for Computational Civil and Structural Engineering*, vol. 1, 2000, pp. 18–28.
- [Ladeveze et al. 92] Ladeveze P., Marin P., Pelle J. P. et Gastine G. L., Accuracy and optimal meshes in finite element computation for nearly incompressible materials, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 94, 1992, pp. 303–315.
- [Ladevèze et al. 99] Ladevèze P., Rougeot P., Blanchard P. et Moreau J. P., Local error estimators for finite element linear analysis, vol. 176, 1999, pp. 231–246.
- [Ladevèze et al. 01] Ladevèze P., Loiseau O. et Dureisseix D., A micro-macro and parallel computational strategy for highly heterogeneous structures, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 52, n° 1–2, 2001, pp. 121–138.
- [Lassignardie et al. 99] Lassignardie J.-F., Escaig Y. et Marin P., Performances obtenues pour les problèmes linéaires et non linéaires avec une méthode de décomposition de domaine mult;niveau primaire, *Actes du 4e Colloque National en Calcul des Structures*, éd. par Guédra-Degeorges D., Ladevèze P. et Raous M., pp. 369–374, Teknea, 1999.
- [Le Tallec 94] Le Tallec P., Domain decomposition methods in computational mechanics, *Computational Mechanics Advances*, North-Holland, 1994.
- [Lions 90] Lions P.-L., On the Schwarz alternating method III: a variant for nonoverlapping subdomains, *Third International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*, éd. par Chan T. F., Glowinski R., Périoux J. et Widlund O. B., pp. 202–223, SIAM, 1990.
- [Loiseau 01] Loiseau O., *Une stratégie de calcul multiéchelle pour les structures hétérogènes*, thèse, ENS de Cachan, octobre 2001.
- [Mandel 93] Mandel J., Balancing domain decomposition, *Communications in Applied Numerical Methods*, vol. 9, 1993, pp. 233–241.
- [Mandel et Brezina 96] Mandel J. et Brezina M., Balancing domain decomposition for problems with large jumps in coefficients, *Mathematics of Computation*, vol. 65, 1996, pp. 1387–1401.
- [Meuer et al. 01] Meuer H. W., Strohmaier E., Dongarra J. J. et Simon H., Top500 supercomputer sites, *16th International Supercomputer Conference: Applications — Architectures — Trends*, 2001, <http://www.netlib.org/benchmark/top500.html>, <http://www.top500.org/>.

- [Moës et Dureisseix 99] Moës N. et Dureisseix D., A two-scale parallel strategy using a simplified structural analysis for the macro scale formulation, *5th U.S. National Congress on Computational Mechanics*, 1999.
- [Néron 01] Néron D., *Sur une stratégie de calcul parallèle et multiphysique*, Rapport du DEA Techniques Avancées en Calcul des Structures, ENS Cachan, 2001.
- [Noor 97] Noor A. K., New computing systems and future high performance computing environment and their impact on structural analysis and design, *Computers & Structures*, vol. 64, n° 1-4, 1997, pp. 1–30.
- [Oster et Sethian 88] Oster S. et Sethian J. A., Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on hamilton-jacobi formulations, *Journal of Computational Physics*, vol. 79, 1988, pp. 12–49.
- [Pattofatto 01] Pattofatto S., *Étude du comportement dynamique d'un béton frais sous vibrations. Application au procédé de fabrication des parpaings*, Rapport du DEA Procédés de Fabrication, ENSAM - ENS Cachan, 2001.
- [Pelle *et al.* 89] Pelle J.-P., Ladevèze P. et Rougeot P., *post-processeur de calcul d'erreur*, Rapport Interne du LMT-Cachan n° 91, 1989.
- [Rixen et Farhat 98] Rixen D. et Farhat C., A simple and efficient extension of a class of substructure based preconditioners to heterogeneous structural mechanics problems, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 46, 1998, pp. 501–534.
- [Sanchez-Palencia 80] Sanchez-Palencia E., *Non homogeneous media and vibration theory*, Springer Verlag, 1980, *Lecture Notes in Physics*, vol. 127.
- [Scardovelli et Zaleski 99] Scardovelli R. et Zaleski S., Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow, *Annual Reviews of Fluid Mechanics*, vol. 31, 1999, pp. 567–603.
- [Sethian 99] Sethian J. A., *Level set methods and fast marching methods*, Cambridge University Press, 1999, 2nd édition.
- [Tie *et al.* 99] Tie B., Aubry D. et Leclère J.-M., Méthode de décomposition de domaine à deux niveaux pour les éléments finis hiérarchiques en version h , *Actes du 4e Colloque National en Calcul des Structures*, éd. par Guédra-Degeorges D., Ladevèze P. et Raous M., pp. 363–368, Teknea, 1999.
- [Vemaganti et Oden 01] Vemaganti K. S. et Oden J. T., Estimation of local modeling error and goal-oriented adaptive modeling of heterogeneous materials. Part II, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 190, 2001, pp. 6089–6124.
- [Vereecke 01] Vereecke B., *Simulation des écoulements par décomposition de domaine*, Rapport du DEA Procédés de Fabrication, ENSAM - ENS Cachan, 2001.
- [Verpeaux *et al.* 88] Verpeaux P., Charras T. et Millard A., CASTEM 2000 : une approche moderne du calcul des structures, *Calcul des Structures et Intelligence Artificielle*, éd. par Fouet J.-M., Ladevèze P. et Ohayon R., pp. 261–271, Pluralis, 1988.
- [Zienkiewicz *et al.* 86] Zienkiewicz O. C., Qu S., Taylor R. L. et Nakazawa S., The patch test for mixed formulations, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 23, 1986, pp. 1873–1883.

[Zohdi *et al.* 01] Zohdi T. I., Wriggers P. et Huet C., A method of substructuring large-scale computational microcechanical problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 190, 2001, pp. 5639–5656.