



# Couplage de modèles multi-échelles pour la représentation de phénomènes localisés en dynamique transitoire explicite

Jérémy Marchais

## ► To cite this version:

Jérémy Marchais. Couplage de modèles multi-échelles pour la représentation de phénomènes localisés en dynamique transitoire explicite. Génie mécanique [physics.class-ph]. École normale supérieure de Cachan - ENS Cachan, 2014. Français. NNT : 2014DENS0023 . tel-01158988

**HAL Id: tel-01158988**

**<https://theses.hal.science/tel-01158988>**

Submitted on 2 Jun 2015

**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.

**THÈSE DE DOCTORAT  
DE  
L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE DE CACHAN**

Présentée par

**Jérémy MARCHAIS**

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE DE CACHAN**

Domaine

**MÉCANIQUE – GÉNIE MÉCANIQUE – GÉNIE CIVIL**

Sujet de la thèse

**Couplage de modèles multi-échelles pour la  
représentation de phénomènes localisés en dynamique  
transitoire explicite**

Soutenue à Cachan le 26 juin 2014 devant le jury composé de :

|                  |                                                  |                    |
|------------------|--------------------------------------------------|--------------------|
| Anthony Gravouil | Professeur des universités, INSA de Lyon         | Rapporteur         |
| Ivan Iordanoff   | Professeur des universités, ENSAM                | Rapporteur         |
| Arnaud Delaplace | Chargé de recherche, Lafarge                     | Examineur          |
| Julien Yvonnet   | Professeur des universités, Université Paris-Est | Examineur          |
| Hachmi Ben Dhia  | Professeur des universités, Ecole Centrale Paris | Examineur          |
| Christian Rey    | Professeur des universités, ENS Cachan           | Directeur de thèse |
| Ludovic Chamoin  | Maitre de conférences, ENS Cachan                | Co-encadrant       |

**LMT-Cachan**

ENS Cachan / CNRS / UPMC / PRES UniverSud Paris  
61, avenue du Président Wilson, F-94235 Cachan cedex, France



# Table des matières

|                                                                                    |           |
|------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Table des matières</b>                                                          | <b>i</b>  |
| <b>Table des figures</b>                                                           | <b>v</b>  |
| <b>Liste des tableaux</b>                                                          | <b>ix</b> |
| <b>Introduction</b>                                                                | <b>3</b>  |
| <b>1 État de l'art</b>                                                             | <b>9</b>  |
| 1 Méthodes de couplage multi-échelles en mécanique . . . . .                       | 10        |
| 1.1 Méthodes multi-échelles en espace sans recouvrement . . . . .                  | 11        |
| 1.2 Méthode <i>Quasi-continuum</i> . . . . .                                       | 13        |
| 1.3 Méthodes multi-échelles en espace avec recouvrement . . . . .                  | 14        |
| 1.4 Méthodes multi-échelles en temps . . . . .                                     | 22        |
| 2 Dissipation des ondes élastiques . . . . .                                       | 26        |
| 2.1 Dissipation par le schéma d'intégration . . . . .                              | 27        |
| 2.2 Conditions de frontières absorbantes . . . . .                                 | 31        |
| 3 Bilan du chapitre . . . . .                                                      | 35        |
| <b>2 Incompatibilités aux interfaces entre modèles discrets local et non-local</b> | <b>37</b> |
| 1 Formulation de la méthode <i>Quasi-Continuum</i> . . . . .                       | 39        |
| 1.1 Modèle de référence . . . . .                                                  | 39        |
| 1.2 Approximation ( <i>Quasi-Continuum</i> ) locale . . . . .                      | 40        |
| 1.3 La méthode Quasi-Non-Locale . . . . .                                          | 42        |
| 2 Formulation de type <i>Quasi-Continuum</i> consistante . . . . .                 | 44        |
| 2.1 Approximation de l'énergie géométriquement consistante . . . . .               | 44        |
| 2.2 Cas des interfaces planes . . . . .                                            | 46        |
| 2.3 Cas des interfaces présentant des coins . . . . .                              | 49        |
| 2.4 Applications numériques en statique . . . . .                                  | 52        |
| 3 Estimation d'erreur locale . . . . .                                             | 58        |
| 3.1 Définition . . . . .                                                           | 59        |
| 3.2 Illustration en 1D . . . . .                                                   | 60        |
| 3.3 Illustration en 2D . . . . .                                                   | 61        |
| 4 Étude comparative en dynamique transitoire . . . . .                             | 64        |



|          |                                                                                         |            |
|----------|-----------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 4.1      | Transmission d'ondes du domaine non-local vers le domaine local                         | 65         |
| 4.2      | Transmission d'ondes du domaine local vers le domaine non-local                         | 66         |
| 5        | Bilan du chapitre . . . . .                                                             | 68         |
| <b>3</b> | <b>Incompatibilités aux interfaces entre représentations à l'échelle micro et macro</b> | <b>71</b>  |
| 1        | Introduction . . . . .                                                                  | 73         |
| 1.1      | Sources d'incompatibilité micro/macro . . . . .                                         | 73         |
| 1.2      | Définition du problème . . . . .                                                        | 76         |
| 1.3      | Calculs de référence . . . . .                                                          | 79         |
| 2        | La <i>Perfectly Matched Layer</i> sélective . . . . .                                   | 80         |
| 2.1      | Objectif . . . . .                                                                      | 80         |
| 2.2      | Séparation des champs micro/macro . . . . .                                             | 80         |
| 2.3      | Dissipation des champs micro . . . . .                                                  | 82         |
| 2.4      | Analyse de stabilité . . . . .                                                          | 84         |
| 2.5      | Efficacité de l'effet dissipatif sur les phénomènes micro . . . . .                     | 85         |
| 3        | Discussion autour de la définition du projecteur $\mathbf{P}_m$ . . . . .               | 86         |
| 3.1      | Projecteur issu de la base modale . . . . .                                             | 87         |
| 3.2      | Projecteur issu de la discrétisation macro . . . . .                                    | 88         |
| 3.3      | Projecteur rigide : modes de corps rigide . . . . .                                     | 92         |
| 4        | Applications en dynamique transitoire . . . . .                                         | 93         |
| 4.1      | Mise en place de la démarche d'analyse . . . . .                                        | 93         |
| 4.2      | Étude comparative des projecteurs $\mathbf{P}_m$ . . . . .                              | 96         |
| 4.3      | Confrontation à d'autres méthodes . . . . .                                             | 98         |
| 5        | Bilan du chapitre . . . . .                                                             | 100        |
| <b>4</b> | <b>Modélisation et simulation d'un béton fibré en dynamique</b>                         | <b>103</b> |
| 1        | Introduction . . . . .                                                                  | 104        |
| 2        | Définition du modèle multi-échelle . . . . .                                            | 104        |
| 2.1      | Modèle micro . . . . .                                                                  | 104        |
| 2.2      | Modèle macro . . . . .                                                                  | 111        |
| 2.3      | Interfaces . . . . .                                                                    | 112        |
| 3        | Applications . . . . .                                                                  | 114        |
| 3.1      | Résolution . . . . .                                                                    | 114        |
| 3.2      | Résultats . . . . .                                                                     | 115        |
| 4        | Bilan du chapitre . . . . .                                                             | 122        |
|          | <b>Conclusions et perspectives</b>                                                      | <b>123</b> |
| <b>A</b> | <b>Démonstrations</b>                                                                   | <b>125</b> |
| 1        | Démonstration de la Proposition (2.28) : . . . . .                                      | 125        |
| 2        | Démonstration du corollaire de conservation de l'énergie : . . . . .                    | 129        |
| 3        | Démonstration du corollaire (2.32) : . . . . .                                          | 130        |

---

|          |                                                 |            |
|----------|-------------------------------------------------|------------|
| <b>B</b> | <b>Estimation d'erreur de modèle locale</b>     | <b>133</b> |
| <b>C</b> | <b>Analyse de stabilité de la PML sélective</b> | <b>135</b> |
|          | <b>Bibliographie</b>                            | <b>139</b> |



# Table des figures

|      |                                                                                                                                                                                                  |    |
|------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1    | Illustration de cas de rupture dans des éléments structuraux en béton fibré                                                                                                                      | 4  |
| 2    | Séparation des incompatibilités micro/macro (flèches noires) et local/non-local (flèches en pointillé) . . . . .                                                                                 | 5  |
| 3    | Introduction d'un modèle intermédiaire discret local (particules blanches) entre le modèle continu local discrétisé (maillage noir) et le modèle discret non-local (particules grises) . . . . . | 6  |
| 4    | Illustration de la stratégie en deux étapes . . . . .                                                                                                                                            | 6  |
| 1.1  | Exemples de modèles multi-échelles avec un modèle discret (particules grises) et un modèle continu discrétisé (maillage noir) . . . . .                                                          | 10 |
| 1.2  | Décomposition en deux sous-domaines sans recouvrement . . . . .                                                                                                                                  | 11 |
| 1.3  | Construction du modèle <i>Quasi-continuum</i> [Shenoy <i>et al.</i> , 1999] . . . . .                                                                                                            | 14 |
| 1.4  | Exemple de représentation multi-grilles en 2D . . . . .                                                                                                                                          | 15 |
| 1.5  | Décomposition de Schwarz du domaine $\Omega$ . . . . .                                                                                                                                           | 17 |
| 1.6  | Décomposition en deux sous-domaines avec recouvrement . . . . .                                                                                                                                  | 18 |
| 1.7  | Illustration de la décomposition de la méthode Bridging Scale en 2D . . . .                                                                                                                      | 20 |
| 1.8  | Décomposition de l'intervalle d'étude $[0; T]$ . . . . .                                                                                                                                         | 22 |
| 1.9  | Problème 1D avec sous-domaines micro et macro . . . . .                                                                                                                                          | 24 |
| 1.10 | Illustration des algorithmes de résolution multipas de temps [Prakash et Hjelmstad, 2004] . . . . .                                                                                              | 26 |
| 1.11 | Définition du domaine $\Omega_{simul}$ et de $\partial\Omega_{CLA}$ . . . . .                                                                                                                    | 32 |
| 1.12 | Définition de $\Omega_{PML}$ . . . . .                                                                                                                                                           | 33 |
| 2.1  | Exemples de domaine d'interaction $\mathcal{J}_i$ . . . . .                                                                                                                                      | 40 |
| 2.2  | Exemples de schéma de reconstruction . . . . .                                                                                                                                                   | 41 |
| 2.3  | Représentation de la zone de transition avec l'approximation QNL . . . . .                                                                                                                       | 42 |
| 2.4  | Configuration dans le cas d'une interface plane en 2D . . . . .                                                                                                                                  | 46 |
| 2.5  | Illustration du schéma de reconstruction $\mathbf{r}_i^q(j)$ par les particules $l_1$ et $l_2$ . .                                                                                               | 48 |
| 2.6  | Illustration du schéma de reconstruction mixte $\mathbf{r}_i^q(j)$ et $\mathbf{r}_i^L(j)$ . . . . .                                                                                              | 49 |
| 2.7  | Configuration dans le cas d'une interface présentant un angle . . . . .                                                                                                                          | 50 |
| 2.8  | Essais de traction sur une chaîne de particule 1D : approximation QC classique en haut et approximation NL2L/NL2L-loc en bas . . . . .                                                           | 52 |
| 2.9  | Champs de déplacement et déformation sur un cas de traction 1D . . . . .                                                                                                                         | 53 |

|      |                                                                                                                                                                     |    |
|------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 2.10 | Champs de déplacement et de déformation sur un cas de traction 1D lorsque les deux interfaces sont rapprochées . . . . .                                            | 53 |
| 2.11 | Représentation du problème couplé local/non-local en 2D . . . . .                                                                                                   | 54 |
| 2.12 | Log(erreur) sur le déplacement pour un chargement de traction . . . . .                                                                                             | 55 |
| 2.13 | Log(erreur) sur le déplacement pour un chargement de cisaillement . . . . .                                                                                         | 56 |
| 2.14 | Erreur normalisée, approximation QC classique . . . . .                                                                                                             | 57 |
| 2.15 | Erreur normalisée, approximation NL2L . . . . .                                                                                                                     | 57 |
| 2.16 | Erreur normalisée, approximation NL2L-loc . . . . .                                                                                                                 | 57 |
| 2.17 | Evolution des erreurs moyennes en fonction de la taille du domaine non-local . . . . .                                                                              | 58 |
| 2.18 | Définition du modèle de référence et des deux modèles approchés en 1D . . . . .                                                                                     | 59 |
| 2.19 | Champs de déplacement référence calculés avec un modèle entièrement non-local (1D) . . . . .                                                                        | 61 |
| 2.20 | Évolution de l'erreur locale en fonction de la taille du domaine non-local (1D) . . . . .                                                                           | 62 |
| 2.21 | Champs de déplacement référence calculés avec un modèle entièrement non-local (2D) . . . . .                                                                        | 63 |
| 2.22 | Évolution de l'erreur locale en fonction de la taille du domaine non-local (2D). . . . .                                                                            | 63 |
| 2.23 | Répartition de l'énergie dans le temps lors de la transition d'une onde du domaine non-local vers le domaine local ( $r_c = 8$ ) . . . . .                          | 65 |
| 2.24 | Part de l'énergie réfléchie en fonction de la longueur d'onde initiale lors de la transition d'une onde du domaine non-local vers le domaine local . . . . .        | 66 |
| 2.25 | Répartition de l'énergie dans le temps lors de la transition d'une onde du domaine local vers le domaine non-local ( $r_c = 8$ ) . . . . .                          | 67 |
| 2.26 | Part de l'énergie réfléchie en fonction de la longueur d'onde initiale lors de la transition d'une onde du domaine local vers le domaine non-local . . . . .        | 68 |
| 3.1  | Relations de dispersion du modèle discret et du modèle continu équivalent . . . . .                                                                                 | 75 |
| 3.2  | Modèle 1D avec sous-domaines micro et macro . . . . .                                                                                                               | 77 |
| 3.3  | Illustration des phénomènes de réflexion d'ondes hautes fréquences à l'interface micro/macro . . . . .                                                              | 78 |
| 3.4  | Définition des modèles permettant de définir les calculs de référence pour les sous-domaines $\Omega_1$ et $\Omega_2$ . . . . .                                     | 79 |
| 3.5  | Définition de $\Omega_{filtre}$ dans le modèle 1D . . . . .                                                                                                         | 80 |
| 3.6  | Discretisation associée à $\Omega_{filtre}$ . . . . .                                                                                                               | 81 |
| 3.7  | Premiers modes de $\Omega_{filtre}$ en 1D . . . . .                                                                                                                 | 88 |
| 3.8  | Mise en place d'une PML sélective définie par assemblage de zones PML sélectives élémentaires . . . . .                                                             | 89 |
| 3.9  | Définition des deux espaces d'approximation $\mathcal{V}^{h1}(\Omega_{filtre})$ et $\mathcal{V}^{h2}(\Omega_{filtre})$ du domaine $\Omega_{filtre}$ en 1D . . . . . | 90 |
| 3.10 | Construction de la matrice $\mathbf{N}_M$ à partir des fonctions de forme $\phi_k^M(\mathbf{X})$ . . . . .                                                          | 90 |
| 3.11 | PML en série . . . . .                                                                                                                                              | 93 |

|      |                                                                                                                                                                         |     |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 3.12 | Définition de la géométrie et du déplacement initial en 1D . . . . .                                                                                                    | 94  |
| 3.13 | Répartition de l'énergie dans le temps avec $\mathbf{P}_m = \mathbf{0}$ . . . . .                                                                                       | 95  |
| 3.14 | Parts de l'énergie réfléchie et transmise en fonction du paramètre $q$ . . . .                                                                                          | 95  |
| 3.15 | Répartition de l'énergie dans le temps avec $\mathbf{P}_m = \mathbf{P}_{macro}$ . . . . .                                                                               | 96  |
| 3.16 | Répartition de l'énergie dans le temps avec $\mathbf{P}_m = \mathbf{P}_{rigide}$ . . . . .                                                                              | 97  |
| 3.17 | Parts de l'énergie réfléchie et transmise en fonction du paramètre $q$ . . . .                                                                                          | 97  |
| 3.18 | Répartition de l'énergie dans le temps avec utilisation d'un schéma de Newmark dissipatif (Nwk $\alpha = 0,1$ ) . . . . .                                               | 99  |
| 3.19 | Répartition de l'énergie dans le temps avec un filtre du premier ordre (Krenk $\alpha = 0,5$ ) . . . . .                                                                | 100 |
| 3.20 | Parts de l'énergie réfléchie et transmise en fonction du paramètre $q$ . . . .                                                                                          | 100 |
| 3.21 | Évolutions de la part de l'énergie réfléchie et transmise en fonction de $q$ .                                                                                          | 101 |
| 4.1  | Grille et zone de tirage . . . . .                                                                                                                                      | 105 |
| 4.2  | Construction de la géométrie des grains du modèle particulaire . . . . .                                                                                                | 105 |
| 4.3  | Modélisation de la cohésion entre deux particules $i$ et $j$ par un modèle poutre . . . . .                                                                             | 106 |
| 4.4  | Modélisation d'une fibre . . . . .                                                                                                                                      | 108 |
| 4.5  | Modèle de comportement des fibres . . . . .                                                                                                                             | 108 |
| 4.6  | Grille de tirage des fibres pour la particule $i$ . . . . .                                                                                                             | 109 |
| 4.7  | Définition du modèle micro avec fibres (en bleu) . . . . .                                                                                                              | 110 |
| 4.8  | Définition du modèle micro avec fibres stochastiques représentées par des traits épais bleus, et fibres déterministes représentées par des traits fins rouges . . . . . | 111 |
| 4.9  | Exemple de géométrie non conforme à l'interface . . . . .                                                                                                               | 113 |
| 4.10 | Utilisation de l'approximation NL2L-loc à l'interface entre les deux modèles . . . . .                                                                                  | 113 |
| 4.11 | Modélisation multiéchelle d'un béton fibré en 2D . . . . .                                                                                                              | 116 |
| 4.12 | Composante suivant $\mathbf{e}_x$ du champ de déplacement sans PML sélective pour une onde longitudinale de longueur d'onde $\lambda = 8H$ . . . . .                    | 118 |
| 4.13 | Composante suivant $\mathbf{e}_x$ du champ de déplacement avec PML sélective pour une onde longitudinale de longueur d'onde $\lambda = 8H$ . . . . .                    | 118 |
| 4.14 | Répartition de l'énergie dans le temps pour une onde longitudinale de longueur d'onde $\lambda = 8H$ . . . . .                                                          | 118 |
| 4.15 | Composante suivant $\mathbf{e}_x$ du champ de déplacement sans PML sélective pour une onde longitudinale de longueur d'onde $\lambda = 48H$ . . . . .                   | 118 |
| 4.16 | Composante suivant $\mathbf{e}_x$ du champ de déplacement avec PML sélective pour une onde longitudinale de longueur d'onde $\lambda = 48H$ . . . . .                   | 119 |
| 4.17 | Répartition de l'énergie dans le temps pour une onde longitudinale de longueur d'onde $\lambda = 48H$ . . . . .                                                         | 119 |
| 4.18 | Composante suivant $\mathbf{e}_y$ du champ de déplacement sans PML sélective pour une onde transversale de longueur d'onde $\lambda = 10H$ . . . . .                    | 120 |

|      |                                                                                                                                             |     |
|------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 4.19 | Composante suivant $e_y$ du champ de déplacement avec PML sélective pour une onde transversale de longueur d'onde $\lambda = 10H$ . . . . . | 120 |
| 4.20 | Répartition de l'énergie dans le temps pour une onde transversale de longueur d'onde $\lambda = 10H$ . . . . .                              | 121 |
| 4.21 | Composante suivant $e_y$ du champ de déplacement sans PML sélective pour une onde transversale de longueur d'onde $\lambda = 48H$ . . . . . | 121 |
| 4.22 | Composante suivant $e_y$ du champ de déplacement avec PML sélective pour une onde transversale de longueur d'onde $\lambda = 48H$ . . . . . | 121 |
| 4.23 | Répartition de l'énergie dans le temps pour une onde transversale de longueur d'onde $\lambda = 48H$ . . . . .                              | 122 |
| A.1  | Système de coordonnées locales du réseau. . . . .                                                                                           | 128 |

# Liste des tableaux

|     |                                                                                     |     |
|-----|-------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 2.1 | Bilan des hypothèses effectuées sur la définition de l'énergie d'interaction        |     |
|     | $\phi_{ij}^{QC}$ . . . . .                                                          | 47  |
| 2.2 | Approximation NL2L des termes $\phi_{ij}^{QC}$ dans le cas d'un coin (partie 1) . . | 50  |
| 2.3 | Approximation NL2L des termes $\phi_{ij}^{QC}$ dans le cas d'un coin (partie 2) . . | 51  |
| 2.4 | Moyennes de l'erreur sur le déplacement : essai de traction . . . . .               | 55  |
| 2.5 | Moyennes de l'erreur sur le déplacement : essai de cisaillement . . . . .           | 56  |
| 4.1 | Algorithme de résolution . . . . .                                                  | 115 |





Je tiens particulièrement à remercier Ludovic et Christian de m’avoir proposé de travailler avec eux sur ce sujet. J’ai vraiment été heureux de travailler avec vous durant ces 3 années, toujours disponibles pour partager votre analyse et votre rigueur scientifique.

Je remercie également l’ensemble des membres du Jury. Jury qui a su se montrer incroyablement disponible malgré les délais très serrés que j’ai dû leur imposer avant la soutenance.

J’aimerais aussi remercier tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à créer une atmosphère de travail saine et joviale au sein du LMT et en dehors. Une pensée spéciale à ceux qui auront partagé mon “espace de travail” pendant ces 3 années et qui ont (pour la plupart) réussi à me supporter.

Et enfin, merci à ma famille d’avoir été présente quand il le fallait, même si vous n’avez toujours pas retenu le titre de ma thèse...



# Introduction

## Contexte

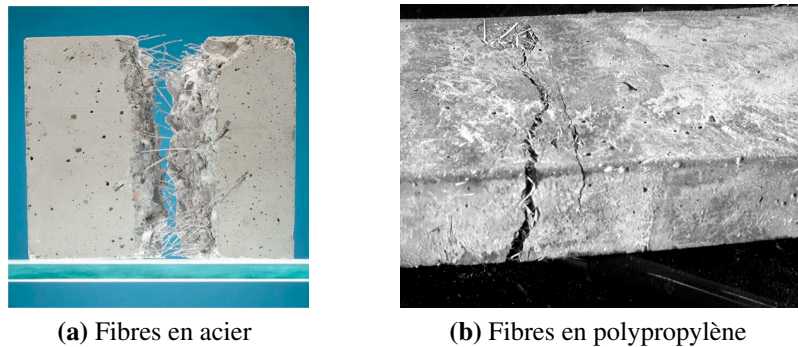
La part des simulations numériques dans la conception et le dimensionnement des systèmes ou structures complexes ne cesse de progresser. Elles ont pour but de fournir une alternative moins coûteuse et plus rapide aux essais mécaniques traditionnels en prédisant un certain nombre de résultats. L'objectif n'est certes pas de remplacer ces essais, mais d'en minimiser l'utilisation à tous les niveaux, aussi bien à l'échelle de la structure complète qu'à celle du plus petit élément qui la compose. Les avancées technologiques et les réglementations en matière de sécurité imposent de contrôler de plus en plus finement les mécanismes mis en jeu lors de la vie d'une structure. Ainsi le modèle poutre d'un pylône en béton est suffisant pour vérifier un critère en statique dans le domaine élastique, mais ce modèle macroscopique devient caduc lorsqu'il s'agit de représenter la propagation d'une fissure. Il est alors nécessaire d'employer des modèles beaucoup plus riches et précis pour prendre en compte ces mécanismes à une échelle plus fine.

Parmi les modèles micro, on retiendra les modèles discrets qui modélisent, par exemple, le béton à l'aide de particules liées entre elles par des interactions afin de traduire la cohésion du matériau. Ces interactions peuvent être non-locales, c'est à dire, avoir lieu entre deux particules qui ne sont pas en contact, principe que l'on trouve initialement dans les modèles atomistiques et largement détaillés dans la littérature. L'utilisation de tels modèles représente un coût non négligeable lorsqu'il s'agit de modéliser des structures de grande dimension. De plus, les phénomènes physiques nécessitant d'avoir recours à ces modèles sont confinés dans des zones restreintes du problème ; il est donc peu pertinent de les employer sur l'ensemble de la structure simulée.

Les modèles multi-échelles sont alors une alternative judicieuse en permettant d'allier la précision du modèle discret dans les zones d'intérêt (lieux des fissures, impacts...) et le coût modéré d'un modèle plus macro dans le reste du problème. Ils aspirent alors à représenter à la fois des phénomènes à une échelle micro et macro (voir [Curtin et Miller, 2003] pour un exemple de modèle atomique/continu). **L'objectif de cette démarche est d'obtenir, par l'intermédiaire d'un modèle multi-échelle, un comportement tout aussi pertinent que celui obtenu avec un modèle entièrement micro mais à moindre**

coût.

Le modèle micro retenu pour la suite est un modèle discret non-local permettant de simuler la rupture et la décohésion dans une poutre en béton fibré (FIG.1).



**FIGURE 1** – Illustration de cas de rupture dans des éléments structuraux en béton fibré

## Problématiques

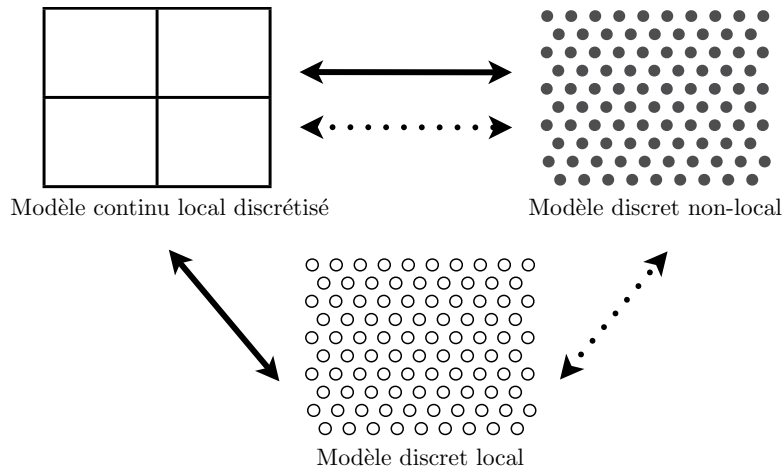
L'approche par modèles multi-échelles soulève néanmoins de nombreuses difficultés. Il convient dans un premier temps de déterminer le modèle macro équivalent au modèle micro. Une procédure d'homogénéisation peut alors être nécessaire afin de définir le modèle macro. On citera à titre d'exemple : l'homogénéisation périodique, asymptotique, par identification sur un volume élémentaire... Cette première étape, indispensable et loin d'être évidente, est source en soi de nombreuses difficultés. Dans le cadre de ces travaux, nous supposons que le modèle macro est déjà identifié, et qu'il est assimilé à un modèle continu local.

La seconde étape consiste à coupler les modèles micro et macro afin de définir le modèle multi-échelle à proprement parler. De nombreuses méthodes ont ainsi été développées dans le but de coupler plusieurs modèles, parmi celles-ci : la méthode *Arlequin*, la *Bridging Scale Method*... Cependant, elles présentent des défauts de construction aux interfaces entre modèles. Ces défauts sont particulièrement préjudiciables dans les simulations en dynamique, car ils génèrent des phénomènes de réflexion d'onde.

Les réflexions se produisent au niveau des interfaces entre modèles et vont modifier le comportement du modèle micro en empêchant la propagation d'énergie du modèle micro vers le modèle macro. Ceci rentre donc en contradiction avec l'objectif énoncé un peu plus haut. Ces difficultés relèvent ainsi de plusieurs incompatibilités inhérentes au changement de modèle de part et d'autre de l'interface avec, dans le cas présent, un modèle discret non-local d'un côté et un modèle continu local de l'autre. Nous pouvons d'ores et déjà identifier deux sources d'incompatibilité :

*Couplage de modèles multi-échelles pour la représentation de phénomènes localisés en dynamique transitoire explicite*

- la transition d'un comportement non-local vers un comportement local ;
- la transition d'un modèle discret micro vers un modèle continu discrétisé macro.



**FIGURE 2** – Séparation des incompatibilités micro/macro (flèches noires) et local/non-local (flèches en pointillé)

## Stratégies développées

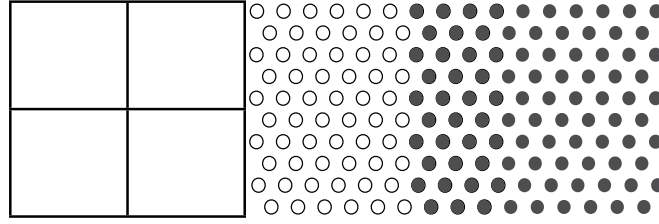
Le but des travaux exposés dans ce manuscrit est d'étudier soigneusement la définition de l'interface entre les deux échelles de modèle afin de répondre à l'objectif initial qui peut se reformuler ainsi : **le prédiction du modèle multi-échelle ne doit pas être influencée par l'existence d'une interface entre les différentes échelles de modèles.**

La structure est donc décomposée en sous-domaines, chacun d'entre eux sont associé à un modèle qui peut lui être propre. Les différents sous-domaines sont ensuite connectés par un raccord en vitesse aux interfaces. Ces choix de modélisation sont faits dans le but d'obtenir une formulation qui s'adapte facilement à l'architecture du calcul en parallèle. Il ne faut en effet pas perdre de vue qu'il s'agit ici de traiter des problèmes de grande dimension, les outils de calculs en parallèle peuvent alors permettre des gains de temps substantiels.

Comme il s'agit de problèmes de dynamique transitoire, il est nécessaire de traduire l'évolution de la simulation dans le temps. En ce sens, une discrétisation temporelle associée à un schéma d'intégration est utilisée dans ces travaux. Toujours dans une logique de simplicité et d'efficacité, nous décidons de nous **restreindre à l'utilisation de schéma temporel explicite**. Bien que ce choix impose de respecter un certain nombre de critères sur le pas de temps associé à la discrétisation temporelle, il permet de mener la plupart des calculs de façon explicite. Il n'est donc pas nécessaire d'utiliser des techniques coûteuses afin d'inverser une matrice dont les dimensions peuvent être conséquentes. Il n'est pas non plus nécessaire d'itérer sur chaque pas de temps pour

prendre en compte des effets non-linéaires.

Deux sources d'incompatibilités ont été identifiées : transition local/non-local et transition micro/macro. C'est pourquoi, dans le but de séparer les difficultés, un modèle intermédiaire est introduit entre le modèle discret non-local et le modèle continu local.

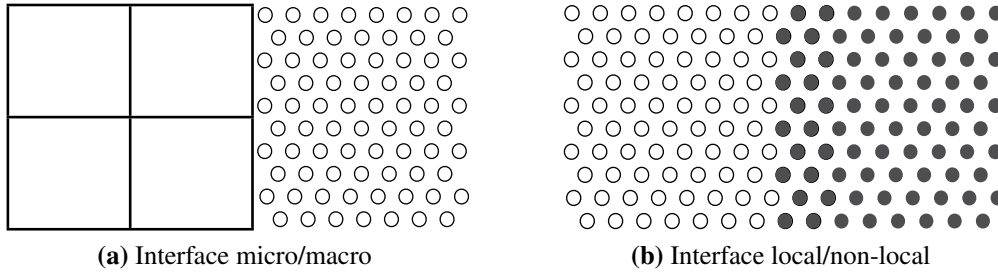


**FIGURE 3** – Introduction d'un modèle intermédiaire discret local (particules blanches) entre le modèle continu local discrétisé (maillage noir) et le modèle discret non-local (particules grises)

Ce choix s'est porté sur un modèle discret local, il permet d'introduire deux interfaces différentes associées à chacune des incompatibilités (FIG.2) :

- une incompatibilité de type local/non-local entre le modèle discret local et le modèle discret non-local (FIG.4a) ;
- une incompatibilité de type micro/macro entre le modèle discret local et le modèle discret continu (FIG.4b) .

À terme, le modèle intermédiaire peut disparaître pour permettre de réunir les deux différentes interfaces en une seule et unique interface capable de traiter les deux incompatibilités simultanément. Mais il permet dans un premier temps de les étudier séparément et d'apporter les solutions permettant d'éviter les phénomènes parasites tels que les réflexions d'onde.



**FIGURE 4** – Illustration de la stratégie en deux étapes

## Travaux réalisés

Une brève revue des grandes familles de méthodes multi-échelles a été effectuée. Plusieurs aspects sont abordés, les aspects multi-échelles en temps ainsi que les aspects multi-échelles en espace. En effet le changement d'échelle en espace impose souvent d'adapter l'échelle temporelle afin de satisfaire aux critères de stabilité ou de précision des schémas d'intégration. Pour éviter les réflexions d'onde aux interfaces, il est également nécessaire d'introduire des phénomènes dissipatifs au sein du modèle. Une synthèse bibliographique sur l'ensemble de ces points est proposée dans le **Chapitre 1**.

Dans une première étude, l'incompatibilité entre un modèle discret non-local et un modèle discret local est abordée dans le **Chapitre 2**. Elle est introduite au moyen du formalisme de la *Quasi-Continuum method* qui vise également à définir un modèle multi-échelle. Cependant cette approche est connue pour présenter des forces résiduelles ou “ghost forces” au niveau des interfaces ce qui peut être source de réflexion en dynamique. Le problème vient surtout de la notion d'interface associée à chaque modèle. Pour un modèle local, l'interface est une surface alors que pour un modèle non-local il s'agit d'un volume. De nouvelles approximations de l'énergie totale [Marchais *et al.*, 2014] sont proposées et étudiées dans un cadre statique. Elles permettent de définir une transition entre le modèle local et non-local dépourvue de “ghost force”. Par la suite ces approximations sont testées dans un cadre dynamique pour observer leur impact sur l'apparition des phénomènes de réflexions parasites.

Dans une seconde étude correspondant au **Chapitre 3**, c'est l'incompatibilité entre des modèles à l'échelle micro et macro qui est étudiée. Il s'agit là d'un changement d'échelle avec d'une part un modèle micro représenté par le modèle discret local et d'autre part un modèle macro représenté par le modèle continu local. Le modèle macro est un modèle obtenu à partir d'hypothèse de séparation d'échelles à la suite d'un processus d'homogénéisation. Il ne peut et ne doit représenter que les phénomènes pour lesquels il a été conçu. L'approche décrite consiste ici à séparer les informations macro, communes aux deux échelles de modélisation, des informations micro propres au modèle micro. Nous présentons alors une démarche basée sur la *Perfectly Matched Layer* pour dissiper les ondes micro avant qu'elles ne soient sources de réflexions parasites.

Finalement le **Chapitre 4** est dédié à la mise en place des différentes méthodes et démarches développées dans ces travaux sur un cas concret. Il s'agit de modéliser le comportement en dynamique transitoire d'un béton fibré avec un modèle multi-échelle. Les deux échelles de modèles sont décrites, on y retrouve un modèle discret non-local qui permet de représenter les mécanismes de fissuration et de décohésion du béton ainsi qu'un modèle continu local qui modélise le comportement macro et élastique du matériau. Il n'y a pas de modèle intermédiaire (voir Figure 4a), les différentes incompatibilités sont directement traitées sur une seule et unique interface au moyen des outils développés dans les Chapitres 2 et 3.





# Chapitre 1

## État de l'art

*Dans ce premier chapitre, plusieurs méthodes liées à la finalité du travail de thèse sont décrites et analysées. Elles se rattachent à au moins l'une des deux problématiques suivantes :*

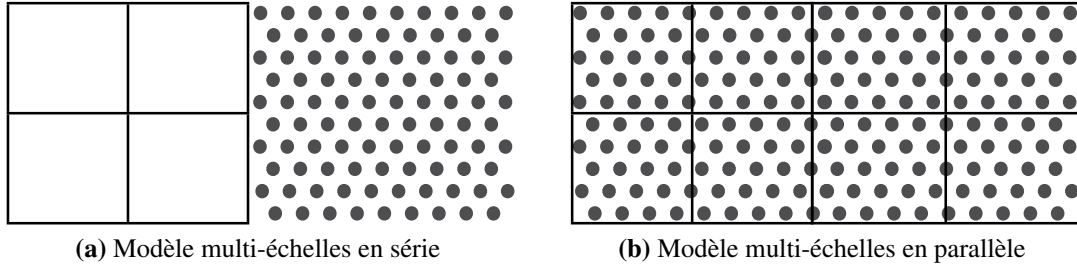
- le couplage de modèles multi-échelles ;*
- l'introduction de phénomènes dissipatifs.*

### Sommaire

|          |                                                                   |           |
|----------|-------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Méthodes de couplage multi-échelles en mécanique . . . . .</b> | <b>10</b> |
| 1.1      | Méthodes multi-échelles en espace sans recouvrement . . . . .     | 11        |
| 1.2      | Méthode <i>Quasi-continuum</i> . . . . .                          | 13        |
| 1.3      | Méthodes multi-échelles en espace avec recouvrement . . . . .     | 14        |
| 1.4      | Méthodes multi-échelles en temps . . . . .                        | 22        |
| <b>2</b> | <b>Dissipation des ondes élastiques . . . . .</b>                 | <b>26</b> |
| 2.1      | Dissipation par le schéma d'intégration . . . . .                 | 27        |
| 2.2      | Conditions de frontières absorbantes . . . . .                    | 31        |
| <b>3</b> | <b>Bilan du chapitre . . . . .</b>                                | <b>35</b> |

# 1 Méthodes de couplage multi-échelles en mécanique

Les méthodes multi-échelles en Mécanique ont toutes un fond commun qui est de vouloir allier précision et rapidité des simulations numériques. Généralement deux échelles (ou plus) sont introduites, une échelle fine pour obtenir la précision désirée et une échelle grossière pour réduire les coûts de calcul. L'aspect multi-échelle peut être introduit sur la description spatiale ou temporelle, voire les deux. De même, ces différentes échelles peuvent être introduites aussi bien en série qu'en parallèle (FIG.1.1).



**FIGURE 1.1** – Exemples de modèles multi-échelles avec un modèle discret (particules grises) et un modèle continu discrétisé (maillage noir)

Dans les sections suivantes quelques grandes familles de méthodes multi-échelles sont décrites et analysées, si possible au moyen d'un formalisme commun. Les deux types de modèles que l'on cherche à coupler et qui servent de support d'application à ces méthodes sont :

- les modèles discrets composés de  $N$  particules dont l'équation du mouvement sous sa forme générale est donnée par :

$$m_i \ddot{\mathbf{x}}_i + \frac{\partial E^{int}}{\partial \mathbf{x}_i} (\{\mathbf{x}_j\}) = \mathbf{f}_i^{ext} \quad \forall i \in [1; N] \quad (1.1)$$

où  $m_i$  et  $\mathbf{x}_i$  sont respectivement la masse et la position de la particule  $i$ , tandis que  $E^{int}$  et  $\mathbf{f}^{ext} = \{\mathbf{f}_i^{ext}\}$  sont respectivement l'énergie interne et les forces extérieures appliquées à cette particule ;

- les modèles continus linéaires discrétisés au moyen de  $N^d$  degrés de liberté, avec  $d = 1, 2$  ou  $3$ . L'équation du mouvement s'écrit alors :

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}} + \mathbf{D}\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f}^{ext} \quad (1.2)$$

où  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{K}$  sont respectivement les matrices de masse, d'amortissement et de raideur dans  $\mathbb{R}^{N^{2d}}$ , tandis que  $\mathbf{u}$  représente le vecteur des déplacements nodaux.

Certaines des méthodes de couplage présentées sont décrites dans un cadre statique pour plus de concision. Dans ce cas, l'équation d'équilibre à traiter est similaire aux équations (1.1) et (1.2), seuls les termes en vitesse et en accélération disparaissent.

## 1.1 Méthodes multi-échelles en espace sans recouvrement

### 1.1.1 Méthodes de décomposition de domaine

Les méthodes de décomposition de domaines sont couramment employées en Mécanique des milieux continus ; leur principe consiste à décomposer un domaine  $\Omega$  en deux sous-domaines  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$  disjoints reliés par une interface  $\Gamma_{12}$  (voir FIG.1.2). Les deux sous-domaines sont ensuite raccordés en écrivant une relation sur la continuité des efforts et des déplacements à l'interface. Le problème peut ensuite être résolu en considérant une méthode de Schur primale [Mandel, 1993] ou duale [Farhat et Roux, 1991].

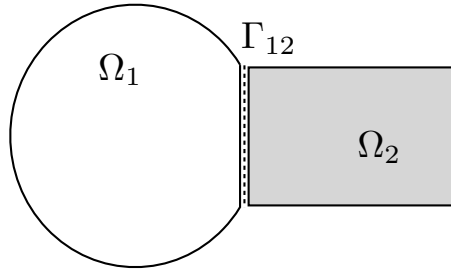


FIGURE 1.2 – Décomposition en deux sous-domaines sans recouvrement

Les méthodes de décomposition de domaine peuvent être réemployées pour établir des modèles multi-échelles, il s'agit alors de raccorder des sous-domaines employant des modèles différents. Les incompatibilités de discrétisation au niveau des interfaces peuvent être traitées par un couplage de type Mortar [Anagnostou *et al.*, 1990, Bernardi *et al.*, 1993].

On note  $\mathbf{u}_b$  et  $\mathbf{f}_b$  les vecteurs des déplacements et des efforts nodaux de l'interface  $\Gamma_{12}$ . Pour chaque sous-domaine, la version statique de (1.2) peut se mettre sous la forme :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{ii}^s & \mathbf{K}_{ib}^s \\ \mathbf{K}_{bi}^s & \mathbf{K}_{bb}^s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_i^s \\ \mathbf{u}_b^s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_i^{ext^s} \\ \mathbf{f}_b^{ext^s} \end{bmatrix} \quad \forall s \in [1, 2]. \quad (1.3)$$

#### Approche primale

Dans l'approche primale [Mandel, 1993] aussi appelée *Balancing Domain Decomposition Method*, dans le cas de maillage conforme, la continuité du vecteur des déplacements nodaux  $\mathbf{u}_b^1 = \mathbf{u}_b^2 = \mathbf{u}_b$  est supposée vérifiée. À partir de (1.3) il est possible de faire disparaître les déplacements internes  $\mathbf{u}_i^s$  en considérant que :

$$\mathbf{u}_i^s = \mathbf{K}_{ii}^{s-1} (\mathbf{f}_i^{ext^s} - \mathbf{K}_{ib}^s \mathbf{u}_b) \quad (1.4)$$

À partir de (1.4), le problème condensé à l'interface  $\Gamma_{12}$  s'écrit en fonction des inconnues d'interface  $\mathbf{u}_b$  uniquement :

$$\mathbf{S}_p \mathbf{u}_b = \mathbf{r}_p \quad (1.5)$$

avec  $\mathbf{S}_p$  le complément de Schur primal et  $\mathbf{r}_p$  la condensation des efforts à l'interface, ceux-ci sont obtenus à partir des relations suivantes :

$$\mathbf{S}_p = \sum_{s=1}^2 \mathbf{A}^s (\mathbf{K}_{bb}^s - \mathbf{K}_{bi}^s \mathbf{K}_{ii}^{s-1} \mathbf{K}_{ib}^s) \mathbf{A}^{sT} \quad (1.6)$$

et

$$\mathbf{r}_p = \sum_{s=1}^2 \mathbf{A}^s (\mathbf{f}_b^{exts} - \mathbf{K}_{bi}^s \mathbf{K}_{ii}^{s-1} \mathbf{f}_i^{exts}) \quad (1.7)$$

*Bien que le problème se résume aux degrés de liberté de l'interface, la création puis l'inversion du complément de Schur primal  $\mathbf{S}_p$  sont très coûteuses. C'est pourquoi des solveurs itératifs sont privilégiés pour mener la résolution de (1.5).*

### Approche duale

Dans l'approche duale présentée dans [Farhat et Roux, 1991], que l'on retrouve sous le nom de FETI (Finite Element Tearing and Interconnecting), la continuité du vecteur des efforts nodaux est supposée vérifiée. Soit les inconnues d'interfaces définies par un multiplicateur de Lagrange  $\mu_b$  qui permettent de réécrire (1.3) pour chaque sous-domaine  $\Omega_s$  :

$$\mathbf{K}^s \mathbf{u}^s = \mathbf{f}^{exts} + \mathbf{C}^{sT} \mu_b \quad (1.8)$$

où  $\mathbf{K}^s$  et  $\mathbf{f}^{exts}$  sont respectivement la matrice de raideur et le vecteur des efforts extérieurs associés au sous-domaine  $\Omega_s$ . En reprenant les notations précédentes, on a :

$$\mathbf{K}^s = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{ii}^s & \mathbf{K}_{ib}^s \\ \mathbf{K}_{bi}^s & \mathbf{K}_{bb}^s \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{f}^{exts} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_i^{exts} \\ \mathbf{f}_b^{exts} \end{bmatrix} \quad (1.9)$$

Quant à  $\mathbf{C}^s$ , il s'agit de l'opérateur de couplage qui traduit la relation de continuité sur les déplacements :

$$\sum_{s=1}^2 \mathbf{C}^s \mathbf{u}^s = \mathbf{0} \quad (1.10)$$

C'est cette approche qui sera employée dans la suite de ces travaux pour raccorder les différents modèles au niveau des interfaces.

*La méthode de Schur duale présente un cadre propice pour le calcul parallèle. En effet, les problèmes sur chaque sous-domaine peuvent être résolus indépendamment puis couplés au moyen du problème condensé à l'interface [Gosselet et Rey, 2006]. Son extension à des problèmes non-linéaires a également pu être réalisée [Pebrel et al., 2008]. Son utilisation peut être également étendue aux modèles multiéchelles, il s'agit alors d'employer des modèles différents sur chaque sous-domaine. La principale difficulté est alors de définir des raccords appropriés au niveau des interfaces.*

## 1.2 Méthode *Quasi-continuum*

La méthode *Quasi-continuum* développée dans [Tadmor *et al.*, 1996] est une méthode multi-échelle permettant d'intégrer une échelle macro à des modèles atomiques. Elle a été initialement développée pour étudier l'apparition et le développement de dislocations et de défauts dans les milieux cristallins. Elle repose sur l'utilisation de deux outils, un modèle atomique et un maillage du type éléments finis.

Nous reprenons les principales étapes de sa construction, telles qu'elles sont décrites dans [Shenoy *et al.*, 1999]. Le modèle atomique contient  $N$  atomes dont l'énergie interne s'écrit :

$$E = E^{exact}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = E^{exact}(\{\mathbf{x}_i\}) \quad (1.11)$$

que l'on peut mettre sous la forme :

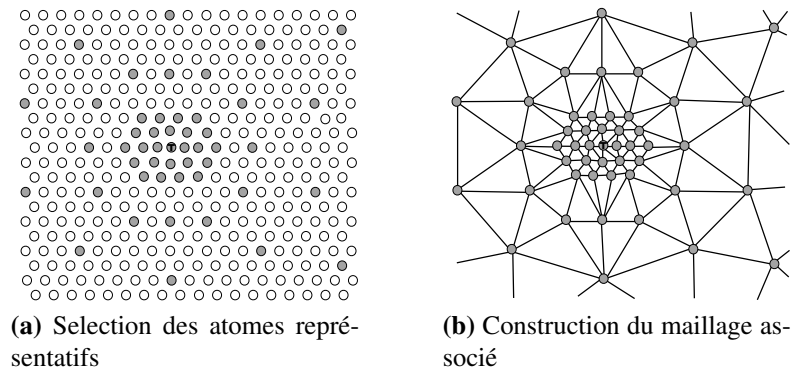
$$E^{exact} = \sum_{i=1}^N E_i(\{\mathbf{x}_i\}) \quad (1.12)$$

avec  $E_i$  l'énergie associée à l'atome  $i$ . On retrouve dans  $E_i$  l'énergie d'interaction liant les atomes du problème (*embedded-atom method*).

Dans le but de réduire le nombre de degrés de liberté et le coût de calcul associé, la cinématique du modèle est contrainte par  $R$  atomes dits *représentatifs*, choisis principalement dans les zones d'intérêt près des défauts structuraux (voir FIG.1.3a). La position des atomes non représentatifs est alors imposée par une contrainte cinématique basée sur un maillage éléments finis dont les sommets coïncident avec les atomes représentatifs (voir FIG.1.3b). Pour ne pas avoir à itérer sur tous les atomes du modèle afin de calculer l'énergie totale, le calcul de l'énergie potentielle est réalisé à partir de l'évaluation de l'énergie des atomes représentatifs auquel est affecté un poids de sommation, cela s'écrit :

$$E = \sum_{j=1}^R n_j E_j(\{\mathbf{x}_i^{int}\}) \quad \text{avec} \quad \mathbf{x}_i^{int} = \sum_{j=1}^R \phi_j(\mathbf{X}_i) \mathbf{x}_j \quad (1.13)$$

où  $\phi_j(\mathbf{X})$  est la fonction de forme associée au nœud  $j$  (c.-à-d. à l'atome représentatif  $j$ ),  $\mathbf{X}_i$  est la position initiale du nœud  $i$ .



**FIGURE 1.3** – Construction du modèle *Quasi-continuum* [Shenoy *et al.*, 1999]

Dans les zones denses en atomes représentatifs, le calcul de l'énergie de ces derniers nécessite d'évaluer la position de tous les atomes représentatifs inclus dans son rayon d'interaction. Une dernière approximation, l'approximation *Quasi-continuum* (QC) locale, permet de réduire ces évaluations en exploitant uniquement la position des plus proches voisins et en utilisant une règle d'extrapolation pour évaluer celle des voisins plus éloignés [Tadmor *et al.*, 1996].

Les applications de la méthode sur des cas statiques font apparaître des phénomènes parasites (appelées “forces fantômes”) à proximité des interfaces entre atomes utilisant l'approximation QC locale et les atomes utilisant l'expression exacte de l'énergie [Shenoy *et al.*, 1999, Knap et Ortiz, 2001, Shimokawa *et al.*, 2004]. En dynamique, les conséquences sont plus importantes puisqu'il en résulte des phénomènes de réflexions parasites qui polluent l'ensemble de la simulation (voir Chapitre 2).

En conclusion, la méthode *Quasi-continuum* n'est pas une méthode de couplage multi-échelle dans le sens premier du terme, mais plutôt un processus de *upscaling* permettant de réduire les coûts de calculs dus à l'utilisation d'un modèle discret. Cependant il est possible de remplacer l'interpolation éléments finis par un modèle continu équivalent sous réserve de corriger les problèmes d'interface (voir [Chamoïn *et al.*, 2010]). Sur ce point, plusieurs travaux ont proposé des améliorations du schéma [Shimokawa *et al.*, 2004, Weinan *et al.*, 2006, Shapeev, 2011], bien qu'ils n'aient été mis en pratique que sur des cas statiques.

## 1.3 Méthodes multi-échelles en espace avec recouvrement

### 1.3.1 Méthodes multi-grilles

Les méthodes multi-grilles [Briggs *et al.*, 2000] sont adaptées à la résolution de systèmes complexes présentant de nombreux degrés de liberté. Développées initialement pour la résolution de problèmes de mécanique des fluides [Brandt, 1977], elles ont été

étendues à la mécanique des structures [Kacou et Parsons, 1993, Fish *et al.*, 1995]. Ces méthodes utilisent plusieurs grilles ou niveaux, qui permettent de définir des raffinements plus ou moins fins du problème discrétisé (voir FIG.1.4). Elles utilisent les propriétés de lissage des solveurs itératifs qui capturent avec peu d'itérations les phénomènes du même ordre de grandeur que la taille caractéristique du maillage. Les phénomènes plus macro sont au contraire plus longs à capturer, le passage à une grille plus grossière permet alors d'accélérer le calcul en capturant les effets macro. L'idée consiste à utiliser des cycles en "V" (descente-remontée) sur les différentes grilles pour résoudre le problème :

1. plusieurs itérations permettent de définir une solution approchée sur la grille fine ;
2. le passage à des grilles plus grossières (descente) permet de capturer les phénomènes macro ;
3. le retour à la grille fine (remontée) enrichie des solutions précédentes accélère la convergence vers la solution exacte.

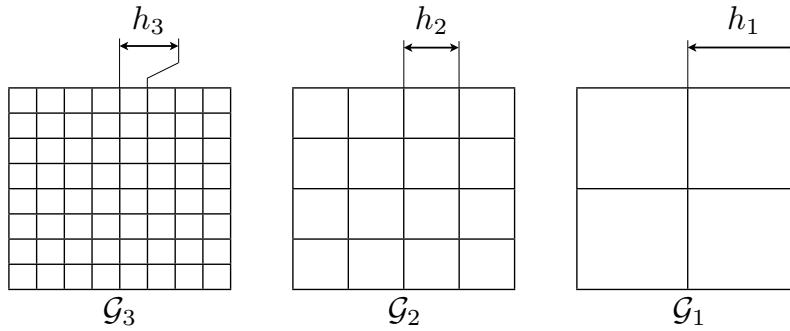


FIGURE 1.4 – Exemple de représentation multi-grilles en 2D

Il existe plusieurs variantes pour résoudre un problème par une méthode multi-grille, telles que la *Newton – Multigrilles* de [Kacou et Parsons, 1993] ou la *Full Approximation Scheme* de [Fish *et al.*, 1995]. Nous décrivons brièvement la seconde méthode pour un cycle en "V".

Soit  $M$  grilles  $\mathcal{G}_k$  correspondant chacune à un maillage dont le paramètre de discrétisation  $h_k$  est choisi tel que  $h_1 > h_2 > \dots > h_M$ . Pour chaque grille  $\mathcal{G}_k$ , un problème approché de (1.21) est défini, associé à l'espace d'approximation  $\mathcal{V}^{h_k}(\Omega)$ . Sur le niveau le plus fin, il s'écrit :

$$\mathcal{L}^k(\mathbf{u}_{ex}^k) = \mathbf{F}^k \quad (1.14)$$

Un faible nombre d'itérations  $p_1$  du solveur itératif permet d'obtenir une solution approchée  $\mathbf{u}_{p_1}^k$ . Le résidu  $\mathbf{R}^k$  s'obtient à partir de la relation suivante :

$$\mathbf{R}^k = \mathbf{F}^k - \mathcal{L}^k(\mathbf{u}_{p_1}^k) \quad (1.15)$$

Soit  $\mathbf{v}^k$  l'écart macro sur la solution de la grille  $\mathcal{G}_k$ , on a :

$$\mathbf{u}_{ex}^k = \mathbf{u}_{p_1}^k + \mathbf{v}^k \quad (1.16)$$



En considérant (1.14) et (1.16), il est alors possible de faire apparaître  $\mathbf{v}^k$  dans (1.15), soit :

$$\mathbf{R}^k = \mathcal{L}^k (\mathbf{u}_{p1}^k + \mathbf{v}^k) - \mathcal{L}^k (\mathbf{u}_{p1}^k) \quad (1.17)$$

Le problème est alors réduit sur la grille  $\mathcal{G}_{k-1}$  afin de trouver une approximation  $\mathbf{v}^{k-1}$  de l'écart macro  $\mathbf{v}^k$ . Dans un premier temps, on calcule :

$$\mathbf{R}^{k-1} = \mathbf{P}_k^{k-1} \mathbf{R}^k \quad \text{et} \quad \mathbf{u}^{k-1} = \mathbf{P}_k^{k-1} \mathbf{u}_{p1}^k \quad (1.18)$$

avec  $\mathbf{P}_k^{k-1}$  la matrice de passage du niveau  $k$  au niveau  $k-1$ . Soit  $\mathbf{v}^{k-1}$  la solution associée au problème suivant :

$$\mathbf{R}^{k-1} = \mathcal{L}^{k-1} (\mathbf{u}^{k-1} + \mathbf{v}^{k-1}) - \mathcal{L}^{k-1} (\mathbf{u}^{k-1}) \quad (1.19)$$

Après  $p_2$  itérations du solveur, une solution approchée  $\mathbf{v}_{p2}^{k-1}$  est obtenue, une alternative est alors possible : reproduire la même démarche sur la grille  $\mathcal{G}_2$  ou remonter au niveau  $k$  en enrichissant la solution approchée  $\mathbf{u}_{p1}^k$  par l'évaluation de l'écart  $\mathbf{v}_{p2}^{k-1}$ . Dans ce second cas, il suffit de reprendre les itérations en initiant  $\mathbf{u}_0^k$  par :

$$\mathbf{u}_0^k = \mathbf{u}_{p1}^k + \mathbf{P}_{k-1}^k \mathbf{v}_{p2}^{k-1} \quad (1.20)$$

avec  $\mathbf{P}_{k-1}^k$  la matrice de passage du niveau  $k-1$  au niveau  $k$ . Puis les itérations sur la grille  $\mathcal{G}_k$  sont effectuées jusqu'à convergence ou jusqu'à repartir sur un nouveau cycle en "V".

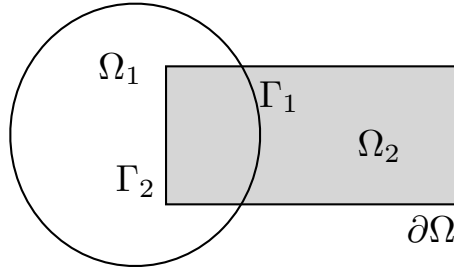
Ces méthodes multi-grilles s'utilisent aussi bien sur des problèmes linéaires que non-linéaires. Pour réduire le coût de calcul, il est également possible de ne définir la grille fine que localement, proche des zones présentant des phénomènes micro. On se contente alors d'une grille plus grossière dans le reste du domaine. Dans [Biotteau, 2010] on trouve une stratégie multigrille de ce type, appliquée à un problème de dynamique transitoire non-linéaire. La finesse du maillage spatial est alors adaptée à chaque pas de temps en fonction des phénomènes à représenter tout en minimisant l'utilisation mémoire. Néanmoins il ne s'agit que de méthodes d'enrichissement ou de déraffinement qui accélèrent la résolution du problème, elles ne permettent pas sous cette forme d'utiliser des modèles de natures différentes.

### 1.3.2 Méthode de Schwarz

La méthode de Schwarz [Schwarz, 1869] a été historiquement appliquée à la résolution de problèmes elliptiques de la forme :

$$\begin{cases} \mathcal{L}(\mathbf{u}) = \mathbf{f} & \text{dans } \Omega \\ \mathbf{w} = \mathbf{g} & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (1.21)$$

avec  $\mathbf{w} = \mathbf{u}$  pour une condition limite de type Dirichlet, et  $\mathbf{w} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}}$  pour une condition limite de type Neuman. Dans le cas d'un modèle continu élastique discrétisé, on prend  $\mathcal{L}(\mathbf{u}) = \mathbf{K}\mathbf{u}$  avec  $\mathbf{K}$  la matrice de raideur. On considère ce cas pour la suite.

FIGURE 1.5 – Décomposition de Schwarz du domaine  $\Omega$ 

La méthode de Schwarz est une méthode itérative qui repose sur la partition du domaine  $\Omega$  en deux sous-domaines  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$  se recouvrant (voir la FIG.1.5). On note  $\Gamma_1 = \partial\Omega_1 \cap \Omega_2$  et  $\Gamma_2 = \partial\Omega_2 \cap \Omega_1$  les interfaces qui permettent d'échanger les informations entre les deux sous-domaines.

Le but est de calculer à chaque itération une solution partielle  $\mathbf{u}^i$  de (1.21) associée au sous-domaine  $\Omega_i$ , et ce, jusqu'à convergence. La solution complète  $\mathbf{u}$  est finalement obtenue en assemblant les solutions partielles  $\mathbf{u}^i$ , telle que :

$$\mathbf{u} = \begin{cases} \mathbf{u}^1 & \text{dans } \Omega_1 \\ \mathbf{u}^2 & \text{dans } \Omega_2 \setminus \Omega_1 \end{cases} \quad (1.22)$$

Il existe deux variantes pour mener à bien la résolution : la méthode de Schwarz multiplicative et la méthode de Schwarz additive.

### Méthode de Schwarz multiplicative

Sous cette forme, la résolution est menée de façon séquentielle sur chaque sous-domaine. Ainsi, à chaque itération  $k$ , on calcule d'abord la solution  $\mathbf{u}_{(k)}^1$  de :

$$\begin{cases} \mathbf{K}^1 \mathbf{u}_{(k)}^1 = \mathbf{f}^1 & \text{dans } \Omega_1 \\ \mathbf{w}_{(k)}^1 = \mathbf{g}^1 & \text{sur } \partial\Omega_1 \setminus \Omega_2 \\ \mathbf{u}_{(k)}^1 = \mathbf{u}_{(k-1)}^2 & \text{sur } \Gamma_1 \end{cases}, \quad (1.23)$$

puis la solution  $\mathbf{u}_{(k)}^2$  de :

$$\begin{cases} \mathbf{K}^2 \mathbf{u}_{(k)}^2 = \mathbf{f}^2 & \text{dans } \Omega_2 \\ \mathbf{w}_{(k)}^2 = \mathbf{g}^2 & \text{sur } \partial\Omega_2 \setminus \Omega_1 \\ \mathbf{u}_{(k)}^2 = \mathbf{u}_{(k)}^1 & \text{sur } \Gamma_2 \end{cases} \quad (1.24)$$

Le problème de cette méthode est qu'elle ne permet pas de paralléliser les calculs effectués sur chaque sous-domaine.

### Méthode de Schwarz additive

Cette seconde forme permet de paralléliser les calculs sur chaque sous-domaine. En effet, à chaque itération  $k$ , on calcule simultanément les solutions  $\mathbf{u}_{(k)}^1$  et  $\mathbf{u}_{(k)}^2$  aux deux problèmes suivants :

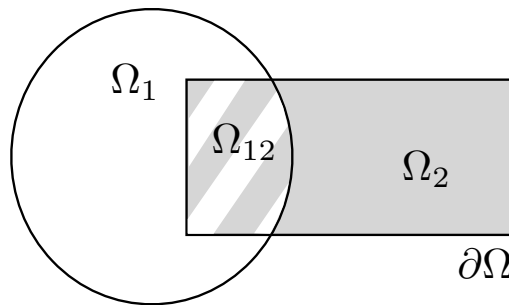
$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{K}^1 \mathbf{u}_{(k)}^1 = \mathbf{f}^1 & \text{dans } \Omega_1 \\ \mathbf{w}_{(k)}^1 = \mathbf{g}^1 & \text{sur } \partial\Omega_1 \setminus \Omega_2 \\ \mathbf{u}_{(k)}^1 = \mathbf{u}_{(k-1)}^2 & \text{sur } \Gamma_1 \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{K}^2 \mathbf{u}_{(k)}^2 = \mathbf{f}^2 & \text{dans } \Omega_2 \\ \mathbf{w}_{(k)}^2 = \mathbf{g}^2 & \text{sur } \partial\Omega_2 \setminus \Omega_1 \\ \mathbf{u}_{(k)}^2 = \mathbf{u}_{(k-1)}^1 & \text{sur } \Gamma_2 \end{array} \right. \quad (1.25)$$

Le prix à payer est une convergence plus lente qu'avec la méthode de Schwarz multiplicative [Schwarz, 1869].

En général, plus la zone de recouvrement est grande et plus la méthode converge en un faible nombre d'itérations. En contrepartie, on augmente le coût de calcul de chaque itération. Dans [Lions, 1990], on propose de réduire les coûts de calculs des algorithmes de Schwarz en réduisant la zone de recouvrement à une simple interface  $\Gamma_1 = \Gamma_2$ , la vitesse de convergence est conservée en appliquant une condition limite de type Robin à chaque itération.

### 1.3.3 Méthode Arlequin

La méthode Arlequin [Ben Dhia, 1998] est une autre méthode de décomposition de domaine avec recouvrement. Elle permet de découper un problème occupant un domaine  $\Omega$  en plusieurs sous-domaines qui ne seront pas raccordés sur une interface, mais sur un volume. Initialement développée dans un cadre statique, elle a été étendue dans [Xiao et Belytschko, 2004, Aubertin *et al.*, 2010] et [Lubineau *et al.*, 2012] au couplage de modèles discret/continu et local/non-local en dynamique.



**FIGURE 1.6** – Décomposition en deux sous-domaines avec recouvrement

Dans un cas avec deux sous-domaines (FIG.1.6), la zone de raccord est définie par  $\Omega_{12} = \Omega_1 \cap \Omega_2 \neq \emptyset$ . Cela présente un coût supplémentaire par rapport à un raccord

surfacique puisque le problème est résolu deux fois au niveau de l'interface  $\Omega_{12}$ . L'opérateur de raccord volumique nécessite également d'échanger plus d'informations entre les deux sous-domaines, ce qui peut être pénalisant pour réaliser les calculs en parallèle. Cependant, cette méthode présente l'avantage de proposer un cadre naturel pour coupler des modèles de natures différentes tels qu'un modèle plaque avec un modèle 3D, ou un modèle discret avec un modèle continu. La zone de recouvrement permet alors de raccorder les deux modèles sur des quantités moyennes compatibles avec les définitions des deux modèles.

La méthode repose sur deux outils, la partition de l'énergie dans la zone de recouvrement et le type de raccord permettant de lier les deux sous-domaines. Dans le contexte présenté ci-dessous, les deux modèles sont continus et élastiques, mais définis sur des espaces d'approximation différents, caractérisés par des paramètres de discrétisation  $h_1$  et  $h_2$  (par défaut  $h_1 < h_2$ ). Dans le formalisme de la méthode Arlequin, le problème revient à rechercher les champs de déplacements  $\mathbf{u}^1 \in \mathcal{V}^{h_1}(\Omega_1)$  et  $\mathbf{u}^2 \in \mathcal{V}^{h_2}(\Omega_2)$  solutions de :

$$\begin{cases} \mathbf{M}_{\alpha_1}^1 \ddot{\mathbf{u}}^1(t) + \mathbf{K}_{\beta_1}^1 \mathbf{u}^1(t) = -\mathbf{C}^{1T} \boldsymbol{\mu}(t) \\ \mathbf{M}_{\alpha_2}^2 \ddot{\mathbf{u}}^2(t) + \mathbf{K}_{\beta_2}^2 \mathbf{u}^2(t) = -\mathbf{C}^{2T} \boldsymbol{\mu}(t) \\ \mathbf{C}^1 \mathbf{w}^1(t) + \mathbf{C}^2 \mathbf{w}^2(t) = \mathbf{0} \end{cases} \quad (1.26)$$

où  $\mathbf{C}^i$ ,  $\mathbf{M}_{\alpha_i}^i$  et  $\mathbf{K}_{\beta_i}^i$  sont respectivement les matrices de raccord, de masse et de raideur associées au domaine  $\Omega_i$ ,  $\forall i \in \{1, 2\}$ .  $\mathbf{w}^i$  est la quantité permettant de coupler les sous-domaines. Une solution consiste à poser  $\mathbf{w}^i = \mathbf{u}^i$ ,  $\dot{\mathbf{u}}^i$  ou  $\ddot{\mathbf{u}}^i$ . Les matrices de raccord  $\mathbf{C}^i$  dépendent du produit scalaire ( $L^2$ ,  $H^1$ ...) utilisé pour coupler les deux sous-domaines.  $\boldsymbol{\mu}(t)$  est le multiplicateur de Lagrange défini sur l'espace intermédiaire. Quant aux matrices  $\mathbf{M}_{\alpha_i}^i$  et  $\mathbf{K}_{\beta_i}^i$ , elles s'écrivent :

$$\mathbf{M}_{\alpha_i}^i = [M_{jl}^i] \quad \text{avec} \quad M_{jl}^i = \int_{\Omega_i} \alpha_i(X) \rho \phi_j(X) \phi_l(X) d\Omega \quad (1.27)$$

$$\mathbf{K}_{\beta_i}^i = [K_{jl}^i] \quad \text{avec} \quad K_{jl}^i = \int_{\Omega_i} \beta_i(X) \frac{\partial \phi_j(X)}{\partial X} \left( \mathcal{K} : \frac{\partial \phi_l(X)}{\partial X} \right) d\Omega \quad (1.28)$$

avec  $\phi_j(X)$  la fonction de forme associée au nœud  $j$  et  $(\alpha_1, \alpha_2)$  et  $(\beta_1, \beta_2)$  des couples de fonctions définissant une partition de l'unité :

$$\alpha_1(X) + \alpha_2(X) = \beta_1(X) + \beta_2(X) = 1 \quad \text{dans} \quad \Omega \quad (1.29)$$

$$\alpha_1(X) = \beta_1(X) = 1 \quad \text{dans} \quad \Omega_1/\Omega_{12} \quad (1.30)$$

$$\alpha_2(X) = \beta_2(X) = 1 \quad \text{dans} \quad \Omega_2/\Omega_{12} \quad (1.31)$$

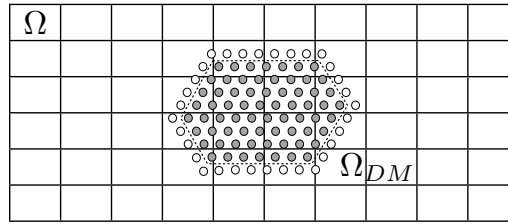
Ces fonctions peuvent être continues ou discontinues sur  $\Omega$ .

Plusieurs travaux autour de la méthode *Bridging Domain* [Xiao et Belytschko, 2004, Xu et Belytschko, 2008] ont mis en avant des résultats où la zone de recouvrement permet également de jouer un rôle de filtre en dissipant les phénomènes micro de  $\Omega_1$

et en évitant ainsi qu'ils se réfléchissent en atteignant le domaine macro  $\Omega_2$ . Cependant, cet effet dissipatif n'est obtenu qu'en utilisant une approximation consistant à diagonaliser l'opérateur de couplage condensé, noté  $\mathbf{H}$  ( $\mathbf{H} = \sum_i \mathbf{C}^i \mathbf{M}^{i-1} \mathbf{C}^{iT}$ ). De plus, cette approximation ne permet de dissiper qu'une partie des ondes micros puisque de nombreuses réflexions peuvent être encore observées. La démarche de filtrage des ondes micro peut alors être optimisée en introduisant des schémas temporels différents dans les sous-domaines du problème [Ghanem *et al.*, 2012].

### 1.3.4 Méthode *Bridging Scale*

La méthode Bridging Scale [Wagner et Liu, 2003] a pour but de coupler des simulations faisant intervenir à la fois la dynamique moléculaire (DM) et la Mécanique des milieux continus. Le domaine de définition de la DM, noté  $\Omega_{DM}$ , a la particularité d'être inclus dans le domaine de définition du modèle continu, noté  $\Omega$  (voir FIG.1.7). Le couplage est alors réalisé en introduisant une échelle macro compatible avec les deux modèles de la simulation. La méthode permet d'utiliser des schémas d'intégration différents dans chaque modèle et d'utiliser un pas de temps adapté à chaque modèle.



**FIGURE 1.7** – Illustration de la décomposition de la méthode Bridging Scale en 2D

Nous décrivons les grandes étapes permettant de mettre en place la méthode. Soit l'équation du mouvement de la DM :

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{u}(t) = \mathbf{f}^{ext}(t) \quad (1.32)$$

avec  $\mathbf{M}$  une matrice de masse diagonale. Le principal ingrédient de la méthode est la décomposition de l'espace fonctionnel, ce qui permet de découpler un champ  $\mathbf{u}(t)$  sous la forme :

$$\mathbf{u}(t) = \mathbf{u}_m(t) + \mathbf{u}_M(t) \quad (1.33)$$

où  $\mathbf{u}_m(t)$  et  $\mathbf{u}_M(t)$  sont respectivement les composantes micro et macro du champ de déplacement. On retrouve également ce type de partition dans la méthode multi-échelle variationnelle de [Hughes *et al.*, 1998]. L'échelle macro est définie à partir d'un espace d'approximation de type éléments finis, nous avons alors :

$$\mathbf{u}_M(t, \mathbf{X}_\alpha) = \sum_i \phi_i^M(\mathbf{X}_\alpha) \mathbf{d}_i(t) \implies \mathbf{u}_M(t) = \mathbf{N}_M \mathbf{d}(t) \quad (1.34)$$

avec  $\phi_i^M(\mathbf{X})$  les fonctions de forme,  $\mathbf{X}_\alpha$  la position de la  $\alpha$ -ième molécule et  $\mathbf{d}(t)$  le vecteur des déplacements nodaux associés au maillage. (1.34) permet alors de définir un projecteur  $\mathbf{P}_m$ , tel que :

$$\mathbf{u}_m(t) = \mathbf{P}_m \mathbf{u}(t) \quad ; \quad \mathbf{P}_m = \mathbf{1} - \mathbf{N}_M \mathbf{M}_M^{-1} \mathbf{N}_M^T \mathbf{M} \quad (1.35)$$

avec  $\mathbf{M}_M = \mathbf{N}_M^T \mathbf{M} \mathbf{N}_M$ . Nous en déduisons alors l'équation du mouvement du modèle continu discrétisé défini sur  $\Omega$  :

$$\mathbf{M}_M \ddot{\mathbf{d}}(t) + \mathbf{N}_M^T \mathbf{K} (\mathbf{N}_M \mathbf{d}(t) + \mathbf{P}_m \mathbf{u}(t)) = \mathbf{N}_M^T \mathbf{f}^{ext}(t) \quad (1.36)$$

Les équations (1.32) et (1.36) permettent de définir l'évolution de l'échelle micro et macro. Bien que l'échelle micro ne soit représentée explicitement que dans  $\Omega_{DM}$ , il est nécessaire de prendre en compte ses effets dans tout le domaine  $\Omega$ , ne serait-ce que pour éviter les phénomènes de réflexions parasites à l'interface de  $\Omega_{DM}$ . L'équation (1.32) devient alors :

$$\mathbf{M} \ddot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{K} \mathbf{u}(t) = \mathbf{f}^{ext}(t) - \mathbf{K}_f \mathbf{u}_f(t) - \int_0^T \theta(t - \tau) \ddot{\mathbf{u}}_f(\tau) d\tau + \mathbf{R}(t) \quad (1.37)$$

où  $\mathbf{u}_f$  est le champ de déplacement des molécules fantômes. Ces dernières sont des molécules fictives définies en dehors de  $\Omega_{DM}$ . Leurs position, vitesse et accélération sont alors extrapolées à partir de l'échelle macro, elles apparaissent en blanc sur la FIG.1.7. Le terme  $\theta(t)$  est le *time history kernel*, il permet de capturer l'influence des molécules micro en dehors de  $\Omega_{DM}$ .  $\mathbf{R}(t)$  est le vecteur déplacement additionnel permettant de prendre en compte l'énergie micro initiale du domaine macro  $\Omega \setminus \Omega_{DM}$ . On pourra se référer à [Wagner et Liu, 2003, Tang *et al.*, 2006] pour plus de détails sur ces opérateurs. Dans [Liu *et al.*, 2006] la méthode est utilisée pour la simulation d'un nanotube de carbone.

La principale difficulté de cette méthode est le calcul du terme  $\theta(t)$ , celui-ci étant rarement associé à une solution analytique et demandant d'être calculé par des techniques numériques. Il est montré dans [Tang *et al.*, 2006] que cela a pour conséquence de faire réapparaître des réflexions parasites à l'interface de  $\Omega_{DM}$ . L'introduction d'une Perfectly Matched Layer à cette même interface peut cependant permettre de réduire ses réflexions [To et Li, 2005, Li *et al.*, 2006].

### 1.3.5 Bilan

Les méthodes multi-échelles décrites dans cette section (*Schwarz*, *Arlequin*...) s'inscrivent globalement dans le prolongement des méthodes sans recouvrement, dans le sens où l'interface qui était auparavant effectué sur une surface l'est maintenant sur un volume. A noter que le raccord en soi peut alors être aussi bien défini sur la surface de ce volume (*Schwarz*) que sur l'ensemble de ce volume (*Arlequin*). Bien que cela entraîne un surcoût de calcul, la zone de coexistence des sous-domaines permet de définir un domaine commun et compatible pour les différents modèles ou échelles mis en jeux.

## 1.4 Méthodes multi-échelles en temps

### 1.4.1 Méthode de décomposition de domaine en temps

Pour répondre aux critères de stabilité et/ou de précision du calcul (voir section 2.1.1), le schéma d'intégration temporel peut nécessiter un pas de temps  $\Delta t^m$  très fin, augmentant ainsi le temps de calcul de la solution. La méthode *Pararéel* [Lions *et al.*, 2001, Maday *et al.*, 2002] est une méthode de décomposition de domaine en temps qui permet de créer des sous-domaines temporels macro associés à un pas de temps  $\Delta t^M$ . Cette partition a pour but de permettre la réalisation des calculs sur les sous-domaines macro en parallèle et ainsi de réduire les temps de calcul.

On considère un problème élastodynamique discrétisé en espace, tel que :

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{u}(t) = \mathbf{f}^{ext}(t) \quad \forall t \in [0; T] \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \mathbf{u}(t=0) = \mathbf{u}_0 \\ \dot{\mathbf{u}}(t=0) = \dot{\mathbf{u}}_0 \end{cases} \quad (1.38)$$

L'intervalle d'étude  $[0; T]$  est partitionné en  $N$  sous-domaines temporels, de la forme  $I_n^M = [t_{n-1}^M, t_n^M]$  avec  $n \in [1; N]$ ,  $t_0^M = 0$  et  $t_N^M = T$ . Chaque intervalle macro  $I_n^M$  peut alors être lui-même décomposé en  $P$  intervalles micro, de la forme  $I_p^m = [t_{p-1}^m, t_p^m]$  avec  $p \in [1; P]$ , tel que  $t_0^m = t_{n-1}^M$  et  $t_P^m = t_n^M$  (voir FIG.1.8).

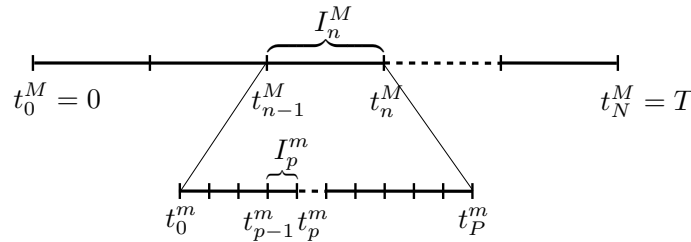


FIGURE 1.8 – Décomposition de l'intervalle d'étude  $[0; T]$

Le problème (1.38) se réécrit comme  $N$  problèmes de la forme :

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}_n(t) + \mathbf{K}\mathbf{u}_n(t) = \mathbf{f}_n^{ext}(t) \quad \forall t \in I_n^M \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \mathbf{u}_n(t_{n-1}^M) = \mathbf{U}_{n-1} \\ \dot{\mathbf{u}}_n(t_{n-1}^M) = \dot{\mathbf{U}}_{n-1} \end{cases} \quad (1.39)$$

auxquels on ajoute les relations de continuité au niveau des interfaces temporelles :

$$\begin{cases} \mathbf{U}_{n-1} = \mathbf{u}_{n-1}(t_{n-1}^M) \\ \dot{\mathbf{U}}_{n-1} = \dot{\mathbf{u}}_{n-1}(t_{n-1}^M) \end{cases} \quad \forall n \in [2; N] \quad (1.40)$$

Les  $N$  problèmes (1.39) définis sur les intervalles de temps macro peuvent alors être résolus en parallèle. Localement on utilise la décomposition sur les intervalles de temps micro afin de répondre au critère de stabilité ou de précision du schéma d'intégration. Les couples de solutions  $(\mathbf{u}_n(t), \dot{\mathbf{u}}_n(t))$  sont ensuite raccordés en appliquant les relations

de continuité de (1.40).

Il est donc possible de construire un algorithme itératif permettant pour chaque itération  $k$  de trouver une solution du problème libre (1.39) puis de calculer la correction associée afin de vérifier (1.40). Soit  $(\mathbf{u}_n^k(t), \dot{\mathbf{u}}_n^k(t))$  les couples solutions de chaque problème libre de (1.39), ils sont discontinus sur les interfaces définies par les intervalles macro. Soit  $(\mathbf{c}_n^k(t), \dot{\mathbf{c}}_n^k(t))$  les couples corrections qui doivent vérifier l'équation homogène issue de (1.38) :

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{c}}_n^k(t) + \mathbf{K}\mathbf{c}_n^k(t) = \mathbf{0} \quad (1.41)$$

ainsi que les relations de continuité issues de (1.40) :

$$\begin{cases} \mathbf{c}_n^k(t_{n-1}^M) = \mathbf{c}_{n-1}^k(t_{n-1}^M) + \mathbf{u}_{n-1}^k(t_{n-1}^M) - \mathbf{U}_{n-1}^k \\ \dot{\mathbf{c}}_n^k(t_{n-1}^M) = \dot{\mathbf{c}}_{n-1}^k(t_{n-1}^M) + \dot{\mathbf{u}}_{n-1}^k(t_{n-1}^M) - \dot{\mathbf{U}}_{n-1}^k \end{cases} \quad \forall n \in [1; N] \quad (1.42)$$

La principale difficulté est alors de calculer efficacement les termes correctifs sans repasser par la discrétisation micro des intervalles temporels.

On passe à l'itération suivante  $k + 1$  en mettant à jour les conditions initiales, telles que :

$$\begin{cases} \mathbf{U}_{n-1}^k = \mathbf{u}_{n-1}^k(t_{n-1}^M) + \mathbf{c}_{n-1}^k(t_{n-1}^M) \\ \dot{\mathbf{U}}_{n-1}^k = \dot{\mathbf{u}}_{n-1}^k(t_{n-1}^M) + \dot{\mathbf{c}}_{n-1}^k(t_{n-1}^M) \end{cases} \quad \forall n \in [2; N] \quad (1.43)$$

L'inconvénient de ces méthodes est qu'elles ne réduisent le temps de calcul de la solution que si le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence est inférieur au nombre de sous-domaines temporels macro créés. Le point clé repose donc sur la façon de propager l'information entre les sous-domaines macro au moyen des termes correctifs  $(\mathbf{c}_n^k(t), \dot{\mathbf{c}}_n^k(t))$  pour minimiser le nombre d'itérations avant convergence.

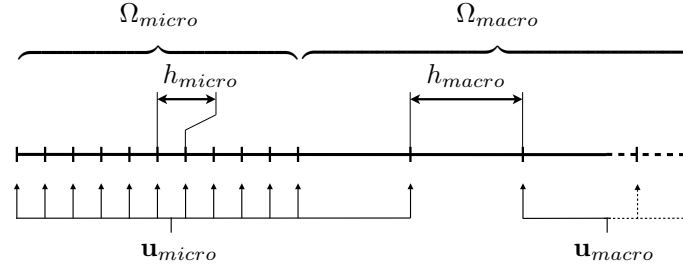
#### 1.4.2 Méthode d'intégration multi-pas de temps explicite

La condition de stabilité du schéma de Newmark explicite est directement liée à la taille de plus petit élément qui compose le problème. De ce fait, un raffinement local de l'espace d'approximation impose de réduire le pas de temps global de l'ensemble du problème. Une approche permettant de satisfaire la condition de stabilité tout en minimisant les coûts de calcul supplémentaires consiste à réaliser un sous-cyclage local dans les zones raffinées [Collino *et al.*, 2003]. Cette approche peut être utilisées sur des problèmes élastodynamiques de propagation d'onde [Bécache *et al.*, 2005]. Malgré la nécessité d'utiliser des multiplicateurs de Lagrange aux interfaces entre sous-domaines, il est possible de réaliser ce sous-cyclage de façon complètement explicite sans inversion de matrice [Diaz et Grote, 2009].

Le problème élastodynamique discrétisé en espace issu de (1.2) (sans amortissement) adjoint à un schéma d'intégration explicite aux différences centrées donne la relation suivante :

$$\mathbf{u}_{n+1} - 2\mathbf{u}_n + \mathbf{u}_{n-1} = -\Delta t^2 \mathbf{A} \mathbf{u}_n \quad \text{avec} \quad \mathbf{A} = \mathbf{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{K} \mathbf{M}^{-\frac{1}{2}} \quad (1.44)$$





**FIGURE 1.9** – Problème 1D avec sous-domaines micro et macro

Le pas de temps  $\Delta t$  est choisi de façon à respecter la condition de stabilité dans le sous-domaine grossier (voir FIG.1.9), mais pas dans le sous-domaine fin. Afin de s'assurer de la stabilité globale du schéma, un sous-cyclage en temps est réalisé dans le sous-domaine fin, ce qui permet de définir un pas de temps localement plus petit :  $\frac{\Delta t}{p}$  avec  $p \in \mathbb{N}^*$ . Dans un premier temps, le vecteur des déplacements nodaux est séparé en une quantité micro et macro tel que :

$$\mathbf{u} = (\mathbf{1} - \mathbf{P})\mathbf{u} + \mathbf{P}\mathbf{u} = \mathbf{u}_{macro} + \mathbf{u}_{micro} \quad (1.45)$$

où la matrice  $\mathbf{P}$  est diagonale ( $P_{ii} = 0$  ou  $1$ ). Il est recommandé de propager le sous-cyclage à un élément du sous-domaine grossier pour augmenter la stabilité du schéma [Diaz et Grote, 2009] (voir FIG.1.9). Finalement pour chaque pas de temps grossier  $\Delta t$ , l'algorithme suivant est mis en place :

1. calcul de la quantité  $\mathbf{w}$  :

$$\mathbf{w} = \mathbf{A}(\mathbf{1} - \mathbf{P})\mathbf{u}_n \quad (1.46)$$

2. initialisation du sous-cyclage :

$$\tilde{\mathbf{u}}_0 = \mathbf{u}_n \quad \text{et} \quad \tilde{\mathbf{u}}_{\frac{1}{p}} = \tilde{\mathbf{u}}_0 - \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta t}{p} \right)^2 (\mathbf{w} + \mathbf{A}\mathbf{P}\tilde{\mathbf{u}}_0) \quad (1.47)$$

3. sous-cyclage sur les pas de temps fins :

$$\text{Pour } m = 1 : p - 1, \quad \tilde{\mathbf{u}}_{\frac{m+1}{p}} = \tilde{\mathbf{u}}_{\frac{m}{p}} - \left( \frac{\Delta t}{p} \right)^2 (\mathbf{w} + \mathbf{A}\mathbf{P}\tilde{\mathbf{u}}_{\frac{m}{p}}) \quad (1.48)$$

4. mise à jour au pas de temps grossier  $n + 1$  :

$$\mathbf{u}_{n+1} = -\mathbf{u}_{n-1} + 2\tilde{\mathbf{u}}_1 \quad (1.49)$$

C'est le choix du paramètre  $p$  qui permet ainsi de maintenir la stabilité du schéma dans le sous-domaine fin. De plus, le schéma conserve une précision à l'ordre 2 et peut se généraliser pour n'importe quel ordre.

### 1.4.3 Méthode d'intégration multi-pas de temps pour les schémas de Newmark

Il est parfois nécessaire d'utiliser des schémas de Newmark de natures différentes dans les sous-domaines du problème notamment s'il est nécessaire de coupler un schéma explicite à un schéma implicite pour des raisons de stabilité ou de précision [Combescure et Gravouil, 2002]. Soit un problème décomposé en deux sous-domaines avec un raccord en vitesse qui se met sous la forme :

$$\begin{cases} \mathbf{M}^i \ddot{\mathbf{u}}^i(t) + \mathbf{K}^i \mathbf{u}^i(t) = \mathbf{F}^{i,ext}(t) - \mathbf{C}^{iT} \mathbf{c}(t) & \forall i \in \{1, 2\} \\ \mathbf{C}^1 \dot{\mathbf{u}}^1(t) + \mathbf{C}^2 \dot{\mathbf{u}}^2(t) = \mathbf{0} \end{cases} \quad (1.50)$$

avec  $\mathbf{F}^{i,ext}(t)$  le vecteur des efforts nodaux extérieurs. Les schémas de Newmark associés à chaque sous-domaine  $\Omega_i$  sont de natures différentes, ils sont caractérisés par les paramètres  $(\beta_i, \gamma_i, \Delta t_i)$ ,  $i \in \{1, 2\}$  avec pour seule contrainte  $\Delta t_1 = p \Delta t_2$ ,  $p \in \mathbb{N}^*$ . La résolution sur un pas de temps grossier  $\Delta t_1$  est alors effectuée en plusieurs étapes. Dans le cas particulier où  $\Delta t_1 = \Delta t_2 = \Delta t$ , il suffit de suivre l'algorithme suivant :

1. calcul des évolutions libres pour chaque sous-domaine  $\Omega_i$   $i \in \{1, 2\}$  :

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^{i,libre} &= \mathbf{M}^{i-1} \mathbf{K}^i \mathbf{u}_{n+1}^{i,p} \\ \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^{i,libre} &= \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^{i,p} + \gamma^i \Delta t \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^{i,libre} \\ \mathbf{u}_{n+1}^{i,libre} &= \mathbf{u}_{n+1}^{i,p} + \beta^i \Delta t^2 \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^{i,libre} \end{aligned} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \mathbf{u}_{n+1}^{i,p} = \mathbf{u}_n^i + \Delta t \dot{\mathbf{u}}_n^i + \Delta t^2 \left(\frac{1}{2} - \beta^i\right) \ddot{\mathbf{u}}_n^i \\ \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^{i,p} = \dot{\mathbf{u}}_n^i + \Delta t (1 - \gamma^i) \ddot{\mathbf{u}}_n^i \end{cases} \quad (1.51)$$

2. calcul des multiplicateurs de Lagrange :

$$\mathbf{c}_{n+1} = \mathbf{H}^{-1} \left( \mathbf{C}^1 \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^{1,libre} + \mathbf{C}^2 \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^{2,libre} \right) \quad \text{avec} \quad \mathbf{H} = \sum_{i=1}^2 \mathbf{C}^i \mathbf{M}^{i-1} \mathbf{C}^{iT} \quad (1.52)$$

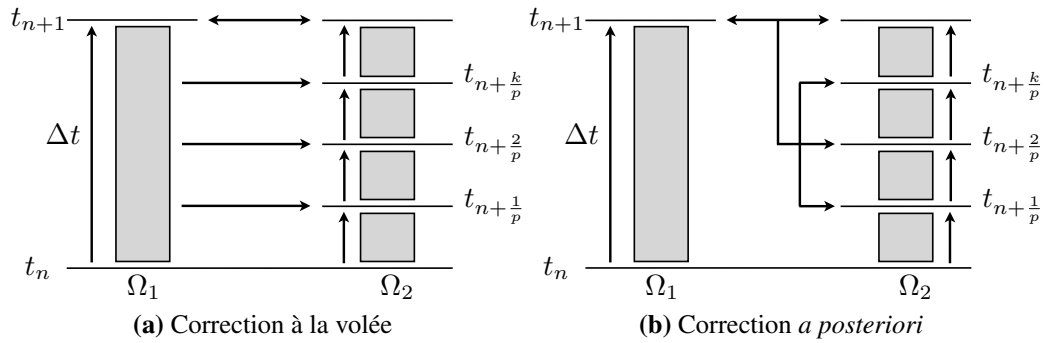
3. calcul de l'accélération liée pour chaque sous-domaine  $\Omega_i$   $i \in \{1, 2\}$  :

$$\ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^{i,liee} = \mathbf{M}^{i-1} \mathbf{K}^i \mathbf{u}_{n+1}^{i,p} \quad (1.53)$$

4. correction des évolutions du problème global :

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^i &= \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^{i,libre} + \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^{i,liee} \\ \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^i &= \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^{i,libre} + \gamma^i \Delta t \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^{i,liee} \\ \mathbf{u}_{n+1}^i &= \mathbf{u}_{n+1}^{i,libre} + \beta^i \Delta t^2 \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^{i,liee} \end{aligned} \quad (1.54)$$

Dans le cas où  $p > 1$  soit  $\Delta t_1 > \Delta t_2$ , deux algorithmes différents sont possibles. Le premier, celui décrit dans [Combescure et Gravouil, 2002] (voir FIG.1.10a), calcule l'évolution libre du sous-domaine  $\Omega_1$  associé à  $\Delta t_1$  puis calcule l'évolution libre du domaine  $\Omega_2$ . La correction de  $\Omega_2$  est calculée à la volée sur chaque pas de temps fin  $\Delta t_2$ , jusqu'à atteindre le pas de temps grossier et corriger l'évolution  $\Omega_1$ . Cependant, cette démarche est dissipative et coûteuse, car elle nécessite de résoudre un problème aux interfaces à chaque pas de temps fin.



**FIGURE 1.10** – Illustration des algorithmes de résolution multipas de temps [Prakash et Hjelmstad, 2004]

Un second algorithme, développé dans [Prakash et Hjelmstad, 2004] (voir FIG.1.10b), propose de calculer les évolutions libres des sous-domaines sur un pas de temps grossier  $\Delta t_1$ , ce qui nécessite de calculer l'évolution libre du sous-domaine  $\Omega_2$  sur les  $p$  pas de temps fins  $\Delta t_2$ . Le problème aux interfaces est alors résolu uniquement sur le pas de temps grossier, une correction est ensuite déduite pour corriger l'évolution sur les pas de temps fins de  $\Omega_2$ . Cette démarche, en plus de réduire le nombre de résolutions de problèmes d'interface, présente l'avantage d'être conservative en énergie.

Les deux algorithmes présentés précédemment reposent sur des comportements élastiques, le passage à des comportements non-linéaires peut être coûteux et nécessiter de mettre en place un processus itératif sur chaque pas de temps grossier.

#### 1.4.4 Bilan

Différents algorithmes de résolution multi-échelles en temps dont l'objectif commun est la réduction des coûts de calcul imposés par l'échelle temporelle ont été présentés. Deux stratégies distinctes se dégagent : la première consiste à définir des échelles temporelles micro et macro différentes dans différents sous-domaines de  $\Omega$  (sections 1.4.2 et 1.4.3) ; la seconde propose de traiter en parallèle ces deux échelles temporelles micro et macro sur l'ensemble du problème (section 1.4.1). Cependant, aucune de ces méthodes ne permet de traiter les incompatibilités inhérentes à l'utilisation de deux échelles telles que les phénomènes de réflexion d'onde.

## 2 Dissipation des ondes élastiques

Le problème de réflexions parasites d'ondes élastiques sur un problème résolu avec maillage non uniforme n'est pas récent [Bažant, 1978]. Ces réflexions se produisent principalement pour de petites longueurs d'onde, mais un faible écart dans le pas de discrétisation (10%, [Bažant, 1978]) suffit à les faire apparaître. Dans les sections suivantes sont

présentées différentes méthodes permettant d'éviter ces réflexions parasites par l'ajout d'un effet dissipatif au modèle.

## 2.1 Dissipation par le schéma d'intégration

### 2.1.1 Schémas de Newmark

Les schémas de Newmark reposent sur une discrétisation régulière de l'intervalle temporel  $[0, T]$ . Soit une suite de  $N + 1$  instants séparés d'un pas de temps  $\Delta t$ , telle que :

$$t_0 = 0, t_1 = \Delta t, \dots, t_n = n\Delta t, \dots, t_N = N\Delta t = T \quad (1.55)$$

Ainsi, au lieu d'évaluer les grandeurs du problème à chaque instant  $t \in [1, T]$ , elles sont évaluées de façon discrète aux instants  $t_n = n\Delta t$  avec  $n \in \{0, \dots, N\}$ . On note alors :

$$\mathbf{x}(t_n) = \mathbf{x}_n \quad \forall n \in \{0, \dots, N\} \quad (1.56)$$

L'objectif de la discrétisation temporelle est de pouvoir déterminer les grandeurs à l'instant  $n + 1$  à partir des grandeurs connues à l'instant  $n$ . À l'instant  $t = 0$ , les conditions initiales en vitesse et en déplacement du problème permettent d'initier l'algorithme de résolution. L'équation du mouvement d'un problème élastodynamique (1.2), une fois discrétisé en temps s'écrit :

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}_{n+1} + \mathbf{D}\dot{\mathbf{u}}_{n+1} + \mathbf{K}\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{f}_{n+1} \quad (1.57)$$

auquel est adjoint un schéma d'intégration de type Newmark défini par les deux relations suivantes :

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \Delta t \dot{\mathbf{u}}_n + \frac{\Delta t^2}{2} ((1 - 2\beta) \ddot{\mathbf{u}}_n + 2\beta \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}) \quad (1.58)$$

$$\dot{\mathbf{u}}_{n+1} = \dot{\mathbf{u}}_n + \Delta t ((1 - \gamma) \ddot{\mathbf{u}}_n + \gamma \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}) \quad (1.59)$$

où  $\beta$  et  $\gamma$  sont deux paramètres tels que  $0 \leq \beta \leq \frac{1}{2}$ ,  $0 \leq \gamma \leq 1$ .

L'algorithme associé à (1.57), (1.58) et (1.59) permet d'obtenir une précision du deuxième ordre. Sa stabilité dépend de la valeur des paramètres  $\beta$  et  $\gamma$  :

- si  $\gamma < \frac{1}{2}$ , il est instable ;
- si  $\gamma \geq \frac{1}{2}$  et  $2\beta - \gamma < 0$ , il est conditionnellement stable ;
- si  $\gamma \geq \frac{1}{2}$  et  $2\beta - \gamma \geq 0$ , il est inconditionnellement stable.

On trouvera plus de détails sur l'établissement de ces critères dans [Bonnet et Frangi, 2007]. Parmi ces derniers, si  $\gamma > \frac{1}{2}$  et  $2\beta > \gamma$ , le schéma obtenu est dit "dissipatif", car il diminue à chaque pas de temps l'énergie du système. Cet effet peut être recherché, car la plupart des applications en dynamique des structures cherchent principalement la réponse des premiers modes (basses fréquences) [Hilber *et al.*, 1977]. De ce fait, utiliser un schéma temporel qui dissipe les hautes fréquences est plutôt un avantage. Il est alors

possible d'optimiser la dissipation des hautes fréquences [Krenk et Høgsberg, 2005] en choisissant les paramètres  $\beta$  et  $\gamma$  selon la règle suivante :

$$\gamma = \frac{1}{2} + \alpha, \quad \beta = \frac{1}{4} (1 + \alpha)^2 \quad \text{et} \quad \alpha \geq 0 \quad (1.60)$$

où le paramètre  $\alpha$  permet de piloter la dissipation du schéma.

En plus d'être inconditionnellement stable, le rayon spectral de l'algorithme décroît lorsque la fréquence augmente ce qui permet de contrôler la gamme de fréquences filtrées. Ainsi pour les basses fréquences, l'erreur introduite reste limitée pour de faibles valeurs du paramètre  $\alpha$ , tout en permettant une bonne dissipation des hautes fréquences. Cependant cette démarche repose sur l'utilisation de schémas d'intégration implicites qui peuvent alourdir les coûts de calcul à chaque pas de temps.

### 2.1.2 Méthodes $\alpha$

L'objectif des méthodes  $\alpha$  est de contrôler la dissipation numérique due à l'utilisation d'un schéma de Newmark dissipatif. Elles permettent ainsi de maintenir l'effet dissipatif sur les hautes fréquences tout en minimisant l'atténuation des basses fréquences [Hilber *et al.*, 1977]. La méthode  $\alpha$ -généralisée détaillée par la suite fait partie de ces méthodes. Introduite dans [Chung et Hulbert, 1993], elle propose de définir un cadre commun et plus général aux méthodes  $\alpha$ -HHT et  $\alpha$ -WBZ de [Hilber *et al.*, 1977] et [Wood *et al.*, 1980].

La méthode  $\alpha$ -généralisée, dans le cadre d'un problème élastodynamique discrétisé en espace et en temps, repose sur l'algorithme suivant :

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}_{n+1-\alpha_m} + \mathbf{D}\dot{\mathbf{u}}_{n+1-\alpha_f} + \mathbf{K}\mathbf{u}_{n+1-\alpha_f} = \mathbf{f}_{n+1-\alpha_f} \quad (1.61)$$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \Delta t \dot{\mathbf{u}}_n + \frac{\Delta t^2}{2} ((1 - 2\beta) \ddot{\mathbf{u}}_n + 2\beta \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}) \quad (1.62)$$

$$\dot{\mathbf{u}}_{n+1} = \dot{\mathbf{u}}_n + \Delta t ((1 - \gamma) \ddot{\mathbf{u}}_n + \gamma \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}) \quad (1.63)$$

avec

$$\mathbf{u}_{n+1-\alpha_f} = (1 - \alpha_f) \mathbf{u}_{n+1} + \alpha_f \mathbf{u}_n \quad (1.64)$$

$$\dot{\mathbf{u}}_{n+1-\alpha_f} = (1 - \alpha_f) \dot{\mathbf{u}}_{n+1} + \alpha_f \dot{\mathbf{u}}_n \quad (1.65)$$

$$\ddot{\mathbf{u}}_{n+1-\alpha_m} = (1 - \alpha_m) \ddot{\mathbf{u}}_{n+1} + \alpha_m \ddot{\mathbf{u}}_n \quad (1.66)$$

$$\mathbf{f}_{n+1-\alpha_f} = \mathbf{f}(t_{n+1} - \alpha_f \Delta t) \quad (1.67)$$

où  $n \in [1, \dots, N]$ ,  $N$  étant le nombre de pas de temps du problème. Les conditions initiales suivantes s'ajoutent :

$$\mathbf{u}_0 = \mathbf{u}(0), \quad \dot{\mathbf{u}}_0 = \mathbf{v}(0) \quad \text{et} \quad \ddot{\mathbf{u}}_0 = \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{f}(0) - \mathbf{C}\mathbf{v}(0) - \mathbf{K}\mathbf{u}(0)) \quad (1.68)$$

La méthode  $\alpha$ -généralisée est ainsi pilotée par les paramètres  $\beta$  et  $\gamma$  du schéma de Newmark ainsi que par les paramètres  $\alpha_m$  et  $\alpha_f$  propres à la méthode. Dans le cas particulier où  $\alpha_m = \alpha_f = 0$ , l'expression classique du schéma de Newmark définie dans la section précédente réapparaît. Deux autres cas particuliers :  $\alpha_m = 0$  et  $\alpha_f = 0$  correspondent respectivement à la méthode  $\alpha$ -HHT et à la méthode  $\alpha$ -WBZ. Le principal enjeu consiste donc à établir le meilleur choix de paramètres  $(\beta, \gamma, \alpha_m, \alpha_f)$  permettant de maximiser les dissipations des hautes fréquences et de minimiser celles des basses fréquences, tout en s'assurant de la précision et de la stabilité de l'algorithme.

Une analyse approfondie de l'algorithme par décomposition du problème sur la base modale du problème élastodynamique permet de définir les conditions de précision et de stabilité de la méthode. L'algorithme est précis à l'ordre 2 sous la condition :

$$\gamma = \frac{1}{2} - \alpha_m + \alpha_f \quad (1.69)$$

et il y a stabilité inconditionnelle si :

$$\alpha_m \leq \alpha_f \leq \frac{1}{2}, \quad \beta \geq \frac{1}{4} + \frac{1}{2}(\alpha_f - \alpha_m) \quad (1.70)$$

Le rayon spectral de la méthode permet de mesurer la dissipation numérique de la méthode [Chung et Hulbert, 1993]. L'objectif est de maintenir un rayon spectral proche de l'unité pour les basses fréquences tout en le diminuant pour les hautes fréquences. Ceci est vérifié sous la condition :

$$\beta = \frac{1}{4} (1 - \alpha_m + \alpha_f)^2 \quad (1.71)$$

De plus, il apparaît que la dissipation des basses fréquences est minimisée si :

$$\alpha_f = \frac{\alpha_m + 1}{3} \quad (1.72)$$

La méthode  $\alpha$ -généralisée permet d'optimiser la dissipation numérique due à l'utilisation des schémas de Newmark sans pour autant complexifier outre mesure l'algorithme de résolution (voir [Farhat *et al.*, 1995] pour une illustration sur des exemples linéaires et non-linéaires). Cependant, il est ici aussi nécessaire d'employer des schémas d'intégration implicites qui peuvent être coûteux en calcul.

### 2.1.3 Filtre linéaire du premier ordre

Pour optimiser l'utilisation des schémas Newmark afin de dissiper les hautes fréquences, il est possible de rajouter une dissipation numérique négative pour les basses

fréquences [Krenk et Høgsberg, 2005]. Cet effet peut être alors obtenu en ajoutant un filtre linéaire reposant sur une variable d'état  $\mathbf{w}(t)$ . Cette nouvelle variable d'état est liée au déplacement  $\mathbf{u}(t)$  par une équation linéaire du premier ordre :

$$\nu \Delta t \dot{\mathbf{w}}(t) + \mathbf{w}(t) = \nu \Delta t \dot{\mathbf{u}}(t) \quad (1.73)$$

où  $\nu$  est un paramètre adimensionné. Dans le domaine fréquentiel, (1.73) prend la forme d'une fonction de transfert :

$$\mathbf{w} = H(\omega) \mathbf{u}(t) \quad \text{avec} \quad H(\omega) = \frac{i\nu \Delta t \omega}{1 + i\nu \Delta t \omega} \quad (1.74)$$

Ainsi pour les basses fréquences on obtient  $\mathbf{w} \approx \nu \Delta t \dot{\mathbf{u}}$  tandis que pour les hautes fréquences  $\mathbf{w} \approx \mathbf{u}$ . La variable d'état  $\mathbf{w}$ , de même dimension que le déplacement, est insérée dans l'équation du mouvement de façon à générer une dissipation négative, telle que :

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{D}\dot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{u}(t) - (\nu \Delta t)^{-1} \mathbf{B}\mathbf{w}(t) = \mathbf{f}(t) \quad (1.75)$$

avec  $\mathbf{B}$  une matrice pouvant être définie à partir de la matrice de masse  $\mathbf{M}$  ou de raideur  $\mathbf{K}$ . Par la suite, le cas particulier où  $\mathbf{B} = \alpha \Delta t \mathbf{K}$  est considéré. Après discrétisation en temps des équations (1.73) et (1.75), le problème peut s'écrire sous la forme d'une unique équation faisant disparaître la variable d'état  $\mathbf{w}$  :

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{2} + \nu\right) \mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}_{n+1} + \left(\frac{1}{2} + \nu\right) \mathbf{C}\dot{\mathbf{u}}_{n+1} + \left(\frac{1}{2} + \nu - \alpha\right) \mathbf{K}\mathbf{u}_{n+1} + \left(\frac{1}{2} + \nu\right) \mathbf{f}_{n+1} \\ & = - \left(\frac{1}{2} - \nu\right) \mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}_n - \left(\frac{1}{2} - \nu\right) \mathbf{C}\dot{\mathbf{u}}_n - \left(\frac{1}{2} - \nu + \alpha\right) \mathbf{K}\mathbf{u}_{n+1} + \left(\frac{1}{2} - \nu\right) \mathbf{f}_n \end{aligned} \quad (1.76)$$

Ici aussi la démarche permet de retrouver la méthode  $\alpha$ -HHT [Hilber *et al.*, 1977] en posant  $\nu = \frac{1}{2}$ , et la méthode  $\alpha$ -WBZ [Wood *et al.*, 1980] en posant  $\alpha = \nu - \frac{1}{2}$ . La différence avec la méthode  $\alpha$ -généralisée est alors la pondération affectée au chargement extérieur. Les paramètres optimaux qui assurent la stabilité, la précision et les meilleures performances en terme de dissipation sont donc les mêmes que ceux identifiés dans la méthode  $\alpha$ -généralisée, soit sous ce nouveau formalisme :

$$\gamma = \frac{1}{2} + \alpha, \quad \beta = \frac{1}{4} (1 + \alpha)^2 \quad \text{et} \quad \nu = \frac{3}{2} \alpha \quad (1.77)$$

où le paramètre  $\alpha$  permet de contrôler la dissipation de l'algorithme obtenu.

Le filtre linéaire du premier ordre est sensiblement similaire à la méthode  $\alpha$ -généralisée. Il offre néanmoins quelques libertés quant au choix de l'opérateur  $\mathbf{D}$  mais nécessite toujours d'avoir recours à un schéma d'intégration implicite.

### 2.1.4 Bilan

Plusieurs méthodes permettant de dissiper de façon plus ou moins efficace les hautes fréquences ont été identifiées. Cependant elles reposent toutes sur l'utilisation de schémas d'intégration de type Newmark implicites. Ainsi, le phénomène dissipatif est d'autant plus efficace que le pas de temps est grand. Plusieurs difficultés demeurent, d'une part le schéma n'est pas explicite, d'autre part pour que l'effet dissipatif soit limité à un sous-domaine du problème, il est nécessaire d'utiliser des schémas d'intégration différents pour chaque sous-domaine.

## 2.2 Conditions de frontières absorbantes

Dans de nombreux problèmes de Mécanique, le domaine n'est pas borné (acoustique, écoulement de fluide,...), or pour les besoins de la simulation, il est nécessaire d'utiliser un domaine fini. L'introduction de frontières numériques peut alors polluer la simulation en générant des réflexions artificielles au niveau de ces interfaces. Nous revenons ici sur plusieurs conditions de frontières absorbantes qui permettent de simuler le comportement d'un milieu infini.

### 2.2.1 Conditions limites absorbantes

Les conditions limites absorbantes (CLA) définissent une classe de conditions limites qui remplacent les conditions limites classiques de types Neuman :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = f_n(t) \quad \text{sur} \quad \partial_n \Omega \quad (1.78)$$

ou Dirichlet :

$$u = f_d(t) \quad \text{sur} \quad \partial_d \Omega \quad (1.79)$$

Elles ont été introduites dans [Engquist et Majda, 1977] avec pour objectif de simuler le comportement d'un milieu infini pour l'équation des ondes. Les CLA sont employées sur les frontières du domaine, notées  $\partial_{cla} \Omega$ , de façon à simuler un milieu infini et d'éviter ces réflexions parasites. L'équation des ondes en 2D s'écrit (célérité  $c = 1$ ) :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad \text{dans} \quad \Omega \quad (1.80)$$

ce qui donne une solution homogène de la forme :

$$u = U e^{i\sqrt{\omega^2 - k^2}x + \omega t + ky} \quad (1.81)$$



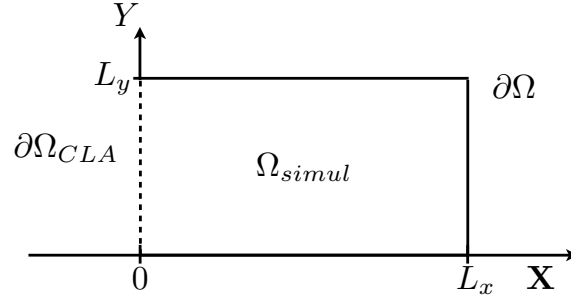


FIGURE 1.11 – Définition du domaine  $\Omega_{simul}$  et de  $\partial\Omega_{CLA}$

Soit  $\Omega$  un domaine infini tel que tout point  $M(X, Y)$  appartient à  $\Omega$  si  $X < L_x$  et  $0 < Y < L_y$ . Pour les besoins de la simulation, le modèle est uniquement défini sur  $\Omega_{simul}$  (voir FIG.1.11) tel que  $M(X, Y)$  appartient à  $\Omega_{simul}$  si  $M \in \Omega$  et  $X > 0$ . Il est donc nécessaire de définir une frontière absorbante sur  $\partial\Omega_{cla}$  en  $X = 0$ . La propriété suivante doit donc être vérifiée :

$$\frac{\partial u}{\partial x} - i\omega \sqrt{1 - \left(\frac{k}{\omega}\right)^2} u = 0 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega_{cla} \quad (1.82)$$

Pour développer une condition limite absorbante, il suffit d'utiliser un développement limité du terme  $\sqrt{1 - \left(\frac{k}{\omega}\right)^2}$  [Engquist et Majda, 1977] à l'ordre 1 ou 2 de l'équation (1.82), soit :

$$\frac{\partial u}{\partial x} - i\omega u = 0 \quad (1^{\text{er}} \text{ ordre}) \quad (1.83)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} - i\omega \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{k}{\omega}\right)^2\right) u = 0 \quad (2^{\text{e}} \text{ ordre}) \quad (1.84)$$

En notant que  $i\omega \Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t}$  et  $ik \Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial y}$ , les deux premières CLA définies sur  $\partial\Omega_{cla}$  s'écrivent :

$$\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial t} = 0 \quad (1^{\text{er}} \text{ ordre}) \quad (1.85)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial t \partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (2^{\text{e}} \text{ ordre}) \quad (1.86)$$

Des ordres plus élevés peuvent être obtenus en augmentant l'ordre du développement limité associé au terme  $\sqrt{1 - \left(\frac{k}{\omega}\right)^2}$ . Cependant ce type de condition limite appliqué aux problèmes élastodynamiques en complique la résolution, et ce, d'autant plus que l'ordre recherché est élevé. Il est également complexe de démontrer la stabilité d'un schéma incorporant des CLA, en particulier sous sa version discrétisée en espace [Chalindar, 1987].

### 2.2.2 Perfectly Matched Layer

La Perfectly Matched Layer (PML) a été développée dans [Berenger, 1994] sur des problèmes d'électromagnétisme. Elle définit une condition de frontière absorbante qui permet de simuler un milieu infini avec un modèle écrit sur un milieu fini.

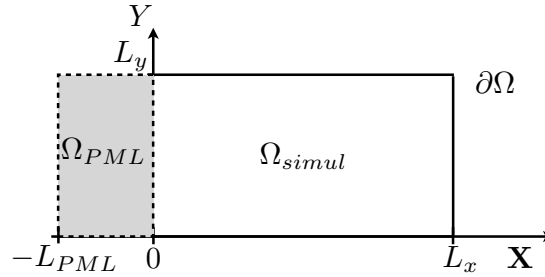


FIGURE 1.12 – Définition de  $\Omega_{PML}$

Au contraire des CLA qui sont définies sur une surface, la PML est définie sur un volume. La FIG.1.12 reprend le même exemple que précédemment en remplaçant la CLA par une PML de longueur  $L_{PML}$ . Son objectif est toujours d'éviter les réflexions parasites en absorbant les ondes incidentes. La méthode a montré son efficacité sur des cas 2D avec des taux de réflexion inférieurs à 1% pour des angles d'incidence allant jusqu'à 45° [Berenger, 1994].

Par la suite le principe de la PML a été étendu à d'autres types de modèles tels que l'équation d'Euler [Hu, 2001] et en élastodynamique dans [Chew et Liu, 1996]. Le développement de la PML dans ce cadre est décrit succinctement dans ce qui suit. L'équation du mouvement d'un problème d'élastodynamique s'écrit :

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \cdot \left( \mathcal{K} : \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (1.87)$$

La transformée de Fourier est appliquée à l'équation (1.87). En posant  $\mathcal{F}(u(x, t)) = \hat{u}(x, \omega)$ , l'équation (1.87) devient :

$$\rho(i\omega)^2 \hat{u} = \frac{\partial}{\partial x} \cdot \left( \mathcal{K} : \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} \right) \quad (1.88)$$

Afin d'obtenir la nouvelle équation du mouvement qui va permettre d'introduire un aspect dissipatif dans le modèle, les coordonnées spatiales du problème sont converties en coordonnées spatiales complexes par l'opération suivante :

$$\partial x \rightarrow \left( 1 + \frac{f(x)}{-i\omega} \right) \partial x \quad (1.89)$$

où  $f(x)$  est la fonction d'amortissement associée à la PML. En injectant (1.89) dans (1.88), on obtient :

$$\rho(i\omega)^2 \left(1 + \frac{f(x)}{-i\omega}\right)^2 \hat{u} = \frac{\partial}{\partial x} \cdot \left( \mathcal{K} : \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} \right) \quad (1.90)$$

En appliquant la transformée de Fourier inverse à (1.90), la nouvelle expression de l'équation du mouvement avec la PML apparaît :

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + 2\rho f(x) \frac{\partial u}{\partial t} + \rho (f(x))^2 u = \frac{\partial}{\partial x} \cdot \left( \mathcal{K} : \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (1.91)$$

À partir de (1.91) et en appliquant une discrétisation par éléments finis avec des fonctions de forme linéaires (voir Annexe B), l'équation du mouvement qui régit le modèle discrétisé devient :

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}} + 2\mathbf{M}_f\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{M}_{f^2}\mathbf{u} = -\mathbf{K}\mathbf{u} \quad (1.92)$$

avec  $\mathbf{M}$  et  $\mathbf{K}$  les matrices de masse et de raideur ;  $\mathbf{M}_f$  et  $\mathbf{M}_{f^2}$  les matrices de masse pondérées par les fonctions  $f(x)$  et  $f(x)^2$  ;  $\mathbf{u}$ ,  $\dot{\mathbf{u}}$  et  $\ddot{\mathbf{u}}$  les vecteurs de position, de vitesse et d'accélération.

Hors de la zone PML,  $f(x) = 0$  ce qui implique que l'équation (1.91) est alors équivalente à (1.87). Il est donc possible de localiser la PML sur un volume fini. Le facteur d'amortissement  $f(x)$  tel qu'il apparaît dans [Berenger, 1994] suit une loi de la forme :

$$f(x) = f_0 \left( \frac{x}{L} \right)^n \quad (1.93)$$

où  $L$  représente l'épaisseur de la PML. Dans [Collino et Tsogka, 2001],  $f(x)$  est de forme quadratique ( $n = 2$ ).  $f_0$  est alors défini par la relation suivante :

$$f_0 = \log \left( \frac{1}{R} \right) \frac{3c_L}{2L} \quad (1.94)$$

où  $c_L$  est la célérité de l'onde longitudinale et  $R$  un paramètre, variant entre 0 et 1, qui fixe le taux de réflexion théorique de la PML. Pour minimiser les réflexions, il faut choisir  $R$  le plus proche possible de zéro. La PML montre également de bons résultats en terme de réduction des réflexions, sur des problèmes élastodynamiques hétérogènes ou anisotropes [Collino et Tsogka, 2001].

### 2.2.3 Bilan

La Perfectly Matched Layer et les CLA sont deux conditions de frontière absorbante très efficaces qui permettent de dissiper tous les phénomènes, aussi bien micro que macro, qui les atteignent. Cependant, notre objectif est de définir une zone intermédiaire

(surfacique ou volumique) entre les domaines micro et macro qui est absorbante pour les phénomènes micro mais qui reste perméable aux phénomènes macro. La Perfectly Matched Layer et les CLA ne sont donc pas, sous cette forme, des réponses adaptées à notre problématique.

### 3 Bilan du chapitre

Aucune des méthodes présentées ici ne permet d'aborder simultanément les difficultés inhérentes au couplage de modèles aux comportements différents en évitant les phénomènes de réflexions parasites aux interfaces. Par la suite nous décidons de traiter séparément la difficulté due au passage d'un comportement non-local à un comportement local de celle due au passage d'un modèle à une échelle micro à un modèle à une échelle macro. Pour cela, un modèle intermédiaire discret local est introduit. Le Chapitre suivant présente ainsi comment définir ce modèle discret local à partir d'une approximation de type *Quasi-Continuum* et comment traiter l'incompatibilité de type local/nonlocal (voir la FIG.2).



## Chapitre 2

# Incompatibilités aux interfaces entre modèles discrets local et non-local

*Dans ce chapitre, de nouvelles approches sont proposées pour résoudre les problèmes d'incompatibilités entre modèles discrets local et non-local. Celles-ci sont ensuite exploitées sur des cas statiques et dynamiques 1D ou 2D afin d'évaluer leurs performances.*

### Sommaire

|          |                                                               |           |
|----------|---------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Formulation de la méthode <i>Quasi-Continuum</i></b>       | <b>39</b> |
| 1.1      | Modèle de référence                                           | 39        |
| 1.2      | Approximation ( <i>Quasi-Continuum</i> ) locale               | 40        |
| 1.3      | La méthode Quasi-Non-Locale                                   | 42        |
| <b>2</b> | <b>Formulation de type <i>Quasi-Continuum</i> consistante</b> | <b>44</b> |
| 2.1      | Approximation de l'énergie géométriquement consistante        | 44        |
| 2.2      | Cas des interfaces planes                                     | 46        |
| 2.3      | Cas des interfaces présentant des coins                       | 49        |
| 2.4      | Applications numériques en statique                           | 52        |
| <b>3</b> | <b>Estimation d'erreur locale</b>                             | <b>58</b> |
| 3.1      | Définition                                                    | 59        |
| 3.2      | Illustration en 1D                                            | 60        |

|          |                                                                   |           |
|----------|-------------------------------------------------------------------|-----------|
| 3.3      | Illustration en 2D . . . . .                                      | 61        |
| <b>4</b> | <b>Étude comparative en dynamique transitoire . . . . .</b>       | <b>64</b> |
| 4.1      | Transmission d’ondes du domaine non-local vers le domaine local . | 65        |
| 4.2      | Transmission d’ondes du domaine local vers le domaine non-local . | 66        |
| <b>5</b> | <b>Bilan du chapitre . . . . .</b>                                | <b>68</b> |

---

# 1 Formulation de la méthode *Quasi-Continuum*

## 1.1 Modèle de référence

Dans le but de définir une démarche générale pour traiter des incompatibilités de type local/non-local, les développements théoriques sont basés sur un modèle de référence le plus générique possible. Ce modèle repose sur une représentation discrète du matériau (on parlera de modèle particulaire) à laquelle on adjoint un nombre restreint d'hypothèses.

Soit  $N$  le nombre de particules qui occupent, dans la configuration de référence, un réseau de Bravais de dimension  $d$  ( $d=1, 2$ , ou  $3$ ) et  $\mathcal{J}$  l'ensemble défini par ces particules. La position  $\mathbf{X}_i \in \mathbb{R}^d$  de la particule  $i$  dans la configuration de référence s'écrit alors :

$$\mathbf{X}_i = \sum_{l=1}^d A_i^l \mathbf{e}_l \text{ avec } (A_i^1, \dots, A_i^d) \in \mathbb{Z}^d \quad (2.1)$$

où  $\{\mathbf{e}_l\}_{l=1,\dots,d}$  sont connus comme les vecteurs de base qui forment une famille libre de  $\mathbb{R}^d$ .

Soit  $\mathbf{x}_i$  la position de la particule  $i$  dans la configuration courante. On note  $E^e(\{\mathbf{x}_j\})$  l'énergie interne du modèle, associée aux interactions entre particules. L'énergie  $E^e$  s'écrit comme la somme de potentiels de paire, telle que :

$$E^e = \sum_{i=1}^N E_i^e(\{\mathbf{x}_j\}) \quad ; \quad E_i^e = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j)) \quad ; \quad \mathbf{r}_i^e(j) = \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i \quad (2.2)$$

où le terme  $E_i^e(\{\mathbf{x}_j\})$  traduit l'énergie associée à la  $i$ -ième particule et où le potentiel de paire  $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$  représente l'énergie d'interaction entre les particules  $i$  et  $j$ .

L'aspect non-local du modèle particulaire est dû à la taille du domaine d'interaction  $\mathcal{J}_i$  associé à chaque particule  $i$ . Ainsi chaque particule peut interagir non seulement avec les particules les plus proches, mais également avec d'autres particules beaucoup plus éloignées. Cependant, au-delà d'une certaine distance, il est courant de négliger l'influence des autres particules et de considérer un domaine d'interaction fini. Dans d'autres contextes, le matériau impose directement la taille du domaine d'interaction : la longueur des fibres au sein d'un matériau composite par exemple. L'énergie  $E_i^e$  associée à la  $i$ -ième particule s'écrit alors :

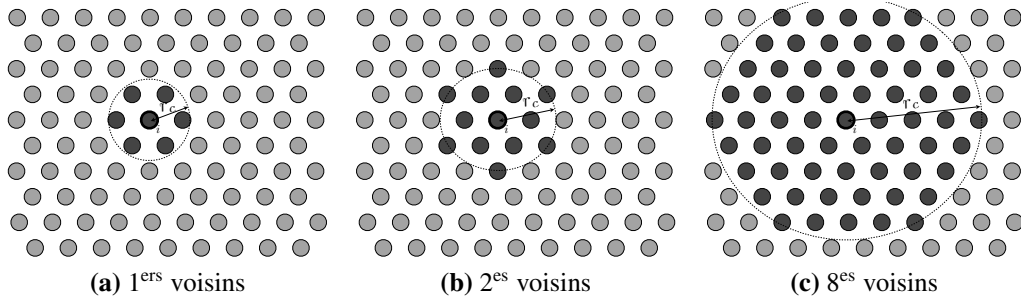
$$E_i^e = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j)) \cong \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_i} \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j)) \quad (2.3)$$

La forme du domaine d'interaction  $\mathcal{J}_i$  n'a que peu d'influence, elle peut être sphérique, cubique ou quelconque, pourvu qu'elle soit identique pour chaque particule. Afin



de simplifier les illustrations, on considère un domaine d'interaction sphérique (circulaire si  $d = 2$ , voir la FIG.2.1) caractérisé par un rayon de coupure  $r_c$  :

$$\mathcal{J}_i = \{j \neq i \text{ tel que } |\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i| = |\mathbf{r}_i^e(j)| \leq r_c\} \quad (2.4)$$



**FIGURE 2.1** – Exemples de domaine d'interaction  $\mathcal{J}_i$

Finalement, la force  $\mathbf{f}_i$  agissant sur la particule  $i$  due aux interactions avec les particules de  $\mathcal{J}_i$  est donnée par :

$$\mathbf{f}_i = -\frac{\partial E^e}{\partial \mathbf{x}_i}(\{\mathbf{x}_j\}) = -\sum_{k=1}^N \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_k} \frac{\partial \phi_{kj}^e}{\partial \mathbf{x}_i} \quad (2.5)$$

et en supposant que la configuration de référence est un état naturel :

$$\mathbf{f}_i = -\frac{\partial E^e}{\partial \mathbf{X}_i}(\{\mathbf{X}_j\}) = \mathbf{0} \quad (2.6)$$

Remarques :

- lorsque  $r_c$  n'englobe que les premiers voisins d'une particule (FIG.2.1a), on parlera d'un modèle *local* ;
- l'exposant  $e$ , annoté aux quantités précédemment définies, signifie *exact*.

## 1.2 Approximation (*Quasi-Continuum*) locale

$\{\mathbf{r}_i(j)\}_{(i,j) \in \mathcal{J} \times \mathcal{J}}$  représente l'ensemble des schémas de reconstruction donnant la position relative d'une particule  $j$  par rapport à une particule  $i$  en utilisant la position de certaines particules de  $\mathcal{J}_i$ . Nous notons  $\mathcal{J}_i(j)$  ce sous-ensemble de particules ( $\text{card}(\mathcal{J}_i(j)) \geq d$ ). Par définition, le schéma de reconstruction satisfait :

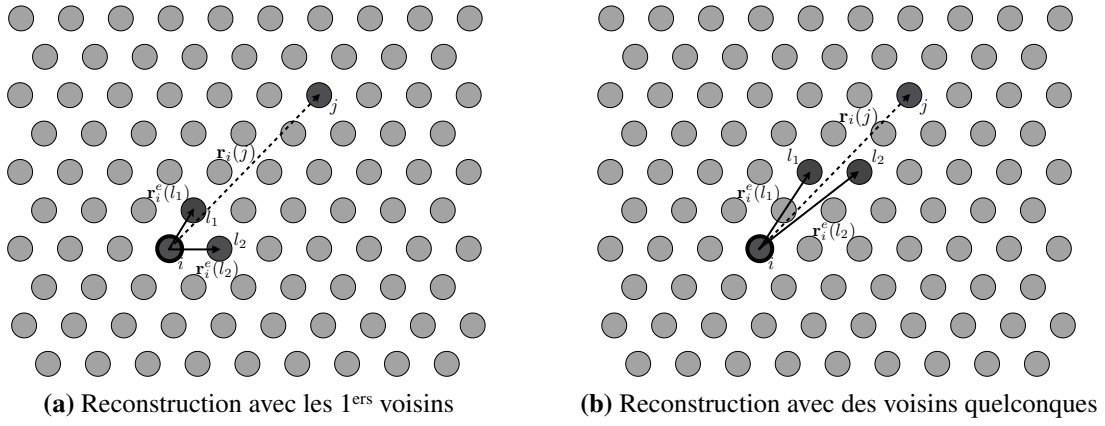
$$\mathbf{r}_i(j) = \mathbf{r}_i(j) \left( \mathbf{x}_i, \{\mathbf{x}_l\}_{l \in \mathcal{J}_i(j)} \right) \text{ tel que } \mathbf{r}_i(j) \left( \mathbf{X}_i, \{\mathbf{X}_l\}_{l \in \mathcal{J}_i(j)} \right) = \mathbf{R}_{ij} \quad (2.7)$$

*Couplage de modèles multi-échelles pour la représentation de phénomènes localisés en dynamique transitoire explicite*

avec  $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{X}_j - \mathbf{X}_i$ . Les reconstructions linéaires sont des cas classiques qui utilisent la position de  $d$  particules ( $\text{card}(\mathcal{J}_i(j)) = d$ , voir FIG.2.2) :

$$\mathbf{r}_i(j) = \sum_{l \in \mathcal{J}_i(j)} \alpha_i^l(j) (\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_i) = \sum_{l \in \mathcal{J}_i(j)} \alpha_i^l(j) \mathbf{r}_i^e(l) \quad (2.8)$$

où les coefficients  $\{\alpha_i^l(j)\}$  sont définis par (2.7) et ne dépendent que de la géométrie du réseau de Bravais.



**FIGURE 2.2** – Exemples de schéma de reconstruction

Le principe de l'approximation locale est de remplacer, dans l'expression de l'énergie  $E_i$ , les interactions au-delà des premiers voisins par des interactions avec les premiers voisins en utilisant un schéma de reconstruction linéaire  $\mathbf{r}^L$ . Celui-ci n'implique que la position relative des premiers voisins (voir FIG.2.1a), nous avons alors :

$$E_i^L = E_i^e(\{\mathbf{r}_i^L(j)\}) = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_i} \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j)) \quad (2.9)$$

L'idée sous-jacente est de considérer que  $E_i^e \approx E_i^L$  pour peu que les déformations du domaine soient suffisamment homogènes. Nous espérons ainsi que le comportement du modèle particulaire puisse être aussi bien représenté par ces particules dont l'énergie est définie par  $E_i^L$ . Du fait de l'utilisation du schéma de reconstruction  $\mathbf{r}_i^L(j)$ , cette énergie ne définit que des interactions avec les premiers voisins, le modèle particulaire devient alors plus "local". Ces particules sont par la suite définies comme des particules *locales*.

Remarque :

- si  $j$  est un premier voisin de  $i$  alors  $\mathbf{r}_i^L(j) = \mathbf{r}_i^e(j) = \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i$  ;
- l'exposant  $L$ , annoté aux quantités précédemment définies, signifie *local*.

### 1.3 La méthode Quasi-Non-Locale

La méthode *Quasi-Continuum* (QC) (que l'on retrouve également sous le nom d'approximation QC sur l'énergie [Tadmor *et al.*, 1996, Shenoy *et al.*, 1999]) permet de transiter d'un modèle particulaire non-local dans une partie du domaine d'étude à un modèle particulaire local dans le reste du domaine. Il s'agit ainsi d'utiliser l'expression  $E_i^e$  de l'énergie dans le premier cas et  $E_i^L$  dans le second. L'approximation QC de l'énergie interne issue de (2.2) s'écrit :

$$E^{QC} = \sum_{i \in \mathcal{J}_e} E_i^e + \sum_{i \in \mathcal{J} \setminus \mathcal{J}_e} E_i^L \quad (2.10)$$

où  $\mathcal{J}_e$  est l'ensemble des particules du domaine non-local et  $\mathcal{J} \setminus \mathcal{J}_e$  représente les particules du domaine local.

L'objectif de la méthode QC est de conserver la précision d'un modèle complètement non-local en ne l'utilisant que sur les zones d'intérêt, près d'un défaut ou d'un chargement local par exemple. Dans le reste du modèle, là où les gradients de déformation sont faibles, l'approximation QC locale est alors employée. Cependant, il est connu [Shenoy *et al.*, 1999, Shimokawa *et al.*, 2004] que cette méthode génère des discontinuités au niveau des interfaces (présence de "forces fantômes", voir FIG.2.9a).

Pour pallier à ce problème, il est proposé dans [Shimokawa *et al.*, 2004] d'introduire un nouveau type de particule dite *quasi-non-locale* à l'interface entre les domaines local et non-local. Un nouveau schéma de reconstruction  $\mathbf{r}_i^Q(j)$  y est associé :

$$\forall i \in \mathcal{J}_q, \mathbf{r}_i^Q(j) = \begin{cases} \mathbf{r}_i^L(j) & \text{if } j \in \mathcal{J}_l \\ \mathbf{r}_i^e(j) & \text{if } j \in \mathcal{J}_e \cup \mathcal{J}_q \end{cases} \quad (2.11)$$

où  $\mathcal{J}_e$ ,  $\mathcal{J}_q$ , et  $\mathcal{J}_l = \mathcal{J} \setminus (\mathcal{J}_e \cup \mathcal{J}_q)$  définissent respectivement les domaines des particules non-locales, quasi-non-locales, et locales (FIG.2.3).

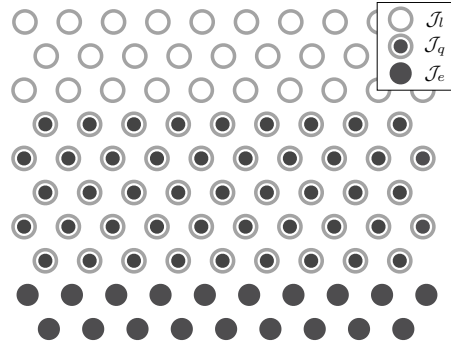


FIGURE 2.3 – Représentation de la zone de transition avec l'approximation QNL

L'approximation QNL de l'énergie interne (2.2) s'écrit alors :

$$E^{QNL} = \sum_{i \in \mathcal{J}_e} E_i^e + \sum_{i \in \mathcal{J}_l} E_i^L + \sum_{i \in \mathcal{J}_q} E_i^Q \quad ; \quad E_i^Q = E_i^e \left( \left\{ \mathbf{r}_i^Q(j) \right\} \right) = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_i} \phi_{ij}^e \left( \mathbf{r}_i^Q(j) \right) \quad (2.12)$$

ou sous une forme plus compacte :

$$E^{QNL} = \sum_{i \in \mathcal{J}} E_i^e \left( \left\{ \mathbf{r}_i(j) \right\} \right) = \sum_{i \in \mathcal{J}} \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_i} \phi_{ij}^e \left( \mathbf{r}_i(j) \right) \quad \text{avec} \quad \mathbf{r}_i(j) = \begin{cases} \mathbf{r}_i^e(j) & \text{si } i \in \mathcal{J}_e \\ \mathbf{r}_i^L(j) & \text{si } i \in \mathcal{J}_l \\ \mathbf{r}_i^Q(j) & \text{si } i \in \mathcal{J}_q \end{cases} \quad (2.13)$$

Une condition générale permettant de vérifier si l'approximation est précise au premier ordre (déformation uniforme) au niveau des interfaces locales/non-locales, et donc sans “forces fantômes”, a été proposée dans [Weinan *et al.*, 2006]. Cette condition de consistance géométrique s'écrit :

$$\forall k, n, m, \quad \sum_{\substack{|\mathbf{R}_{ij}| = R_n \\ \mathbf{R}_{ij} // \boldsymbol{\tau}_m}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} = 0 \quad (2.14)$$

où  $R_n$  (resp.  $\boldsymbol{\tau}_m$ ) sont les longueurs (resp. directions) associées au réseau de Bravais. Il apparaît de façon assez évidente que l'approximation QC (2.10) respecte la condition de consistance géométrique (2.14) si et seulement si  $\mathcal{J} = \mathcal{J}_e$  ou  $\mathcal{J} = \mathcal{J}_l$ . Dans le cas de l'approximation QNL (2.12), la condition de (2.14) n'est plus vérifiée dès que le rayon de coupure  $r_c$  dépasse la deuxième couche de voisins.

Un schéma de reconstruction hybride a été développé dans [Weinan *et al.*, 2006] pour les particules de  $\mathcal{J}_q$ . Il repose sur une combinaison linéaire des deux autres schémas de reconstruction :

$$\forall i \in \mathcal{J}_q, \quad \mathbf{r}_i^Q(j) = C_i(j) \mathbf{r}_i^e(j) + (1 - C_i(j)) \mathbf{r}_i^L(j) \quad (2.15)$$

où les coefficients  $\{C_i(j)\}$  sont solutions du système linéaire d'équations issu de la condition de consistance géométrique (2.14). L'épaisseur de  $\mathcal{J}_q$  n'est pas définie explicitement, mais il ressort des exemples traités qu'elle doit être au moins égale à deux fois le rayon de coupure  $r_c$ . De plus, le système d'équations linéaires est sous-déterminé et la solution proposée dans [Weinan *et al.*, 2006] satisfait la condition de consistance géométrique uniquement dans le cas d'interfaces droites.

Remarque : la définition de  $\mathbf{r}_i^Q(j)$  de (2.15) inclut celle de (2.11) comme cas particulier où les coefficients  $\{C_i(j)\}$  ont été choisis égaux à 0 ou 1.

## 2 Formulation de type *Quasi-Continuum* consistante

### 2.1 Approximation de l'énergie géométriquement consistante

Dans le but de définir de nouvelles approximations sur l'énergie qui soient consistantes, un nouveau point de vue est adopté. Au lieu d'utiliser une combinaison linéaire de  $P$  schémas de reconstruction  $\{\mathbf{r}^p\}_{p=1,\dots,P}$ , qui permette de déterminer un schéma qui respecte la condition (2.14), nous considérons une combinaison linéaire d'approximation de l'énergie associée à chaque schéma de reconstruction :

$$E^{QC} = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{J}} \sum_{j \in \mathcal{J}_i} \phi_{ij}^{QC} \quad \text{avec} \quad \phi_{ij}^{QC} = \sum_{p=1}^P \omega_i^p(j) \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^p(j)) \quad (2.16)$$

Les coefficients  $\omega_i^p(j)$ , d'indices  $(i, j, p) \in \mathcal{J} \times \mathcal{J} \times [1, P]$ , sont une combinaison de scalaires positifs à déterminer. Cette nouvelle approximation offre une plus grande flexibilité dans la répartition de l'énergie, ce qui a un impact significatif sur la solution approchée de problèmes de dynamique [Marchais *et al.*, 2014].

**Définition :** Une approximation de l'énergie (2.16) est géométriquement consistante si :

$$\forall k, n, m, \quad \sum_{\substack{|\mathbf{R}_{ij}| = R_n \\ \mathbf{R}_{ij} // \tau_m}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \tau_m) \left( \sum_{p=1}^P \omega_i^p(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i^p(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) = 0 \quad (2.17)$$

Cette condition ne dépend que de la géométrie du réseau. Ainsi, pour obtenir une approximation de l'énergie géométriquement consistante utilisant  $P$  schémas de reconstruction donnés, nous devons juste résoudre le système linéaire issu de (2.17) pour définir les coefficients de pondération  $\{\omega^p\}_{p=1,\dots,P}$ .

**Corollaire :** Si  $\{\omega^p\}_{p=1,\dots,P}$  forme une partition de l'unité pour chaque paire de particules  $(i, j)$ , c.-à-d. si  $\sum_{p=1}^P \omega_i^p(j) = 1$ , le schéma de reconstruction :

$$\mathbf{r}_i(j) = \sum_{p=1}^P \omega_i^p(j) \mathbf{r}_i^p(j) \quad (2.18)$$

respecte la condition de consistance géométrique de (2.14).

La preuve du corollaire précédent est évidente. Cela souligne que la condition de consistance géométrique (2.14) proposée dans [Weinan *et al.*, 2006] est un cas particulier de la définition plus générale d'approximation de l'énergie géométriquement consistante (2.17).

Il est maintenant nécessaire de prouver qu’une approximation de l’énergie géométriquement consistante ne présente pas de “forces fantômes”.

**Proposition :** Une approximation de l’énergie géométriquement consistante satisfait  $\mathbf{f}_k^{QC} = -\frac{\partial E^{QC}}{\partial \mathbf{x}_k}(\{\mathbf{x}_j\}) = \mathbf{0}$  sous l’hypothèse d’un champ de déformation uniforme ( $\mathbf{x}_i = \mathbb{F}\mathbf{X}_i$ ,  $\mathbb{F}$  constant).

**Démonstration :** En suivant la démarche donnée dans [Weinan *et al.*, 2006] (proposition 4), on obtient :

$$\begin{aligned}
 -\mathbf{f}_k^{QC} &= \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{J}} \sum_{j \in \mathcal{J}_i} \frac{\partial \phi_{ij}^{QC}}{\partial \mathbf{x}_k} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{J}} \sum_{j \in \mathcal{J}_i} \sum_{p=1}^P \omega_i^p(j) \frac{\partial \phi_{ij}^e}{\partial \mathbf{r}_{ij}} \frac{\partial \mathbf{r}_i^p(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{n,m} \sum_{\substack{|\mathbf{R}_{ij}| = R_n \\ \mathbf{R}_{ij}/\tau_m}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \tau_m) \frac{\partial \phi_{ij}^e}{\partial \mathbf{r}_{ij}} \left( \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \tau_m) \sum_{p=1}^P \omega_i^p(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i^p(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right)
 \end{aligned} \tag{2.19}$$

À partir de la symétrie de l’énergie, pour un couple  $(n, m)$  donné, la quantité  $\mathbf{B}_{n,m} = \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \tau_m) \frac{\partial \phi_{ij}^e}{\partial \mathbf{r}_{ij}}$  est indépendante de  $i$  et  $j$  sous l’hypothèse d’un champ de déformation uniforme. L’équation (2.19) devient :

$$-\mathbf{f}_k^{QC} = \frac{1}{2} \sum_{n,m} \mathbf{B}_{n,m} \sum_{\substack{|\mathbf{R}_{ij}| = R_n \\ \mathbf{R}_{ij}/\tau_m}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \tau_m) \left( \sum_{p=1}^P \omega_i^p(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i^p(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \tag{2.20}$$

La condition (2.17) conclut la démonstration.  $\square$

Dans les sections suivantes, plusieurs exemples d’approximation de l’énergie géométriquement consistante sont donnés. L’objectif est de définir des approximations explicites, dans le sens où les paramètres  $\omega_i^p(j)$  ne nécessitent pas de résoudre un problème annexe. Avec ces schémas, la zone de transition entre les descriptions locale et non-locale de l’énergie est explicitement définie et l’épaisseur de cette zone correspond à la taille du rayon de coupure.

Remarque : bien qu’on ait  $\phi_{ij}^e = \phi_{ji}^e$ , en général on aura  $\phi_{ij}^{QC} \neq \phi_{ji}^{QC}$ .

## 2.2 Cas des interfaces planes

Le cas d'une interface plane entre le domaine local et non-local est considéré. En 2D, cette interface relie des particules le long d'une ligne dirigée par un des vecteurs de base  $\{\mathbf{e}_l\}_{l=1,2}$  du réseau, ainsi chaque particule de l'interface est un premier voisin de celle qui la précède ou la suit.  $\mathcal{J}_l$  définit l'ensemble des particules du domaine local et  $\mathcal{J}_q$  celui des particules de l'interface. Dans le domaine non-local, on note  $\mathcal{J}_{q,nl}$  l'ensemble de particules "intermédiaires" ayant au moins une interaction avec une particule de  $\mathcal{J}_l$ , et  $\mathcal{J}_e$  l'ensemble complémentaire. Finalement l'union de ces ensembles disjoints vérifie  $\mathcal{J} = \mathcal{J}_l \cup \mathcal{J}_q \cup \mathcal{J}_{q,nl} \cup \mathcal{J}_e$  (voir FIG.2.4b, un exemple de configuration où  $r_c$  définit des interactions jusqu'au 8<sup>e</sup> voisin).

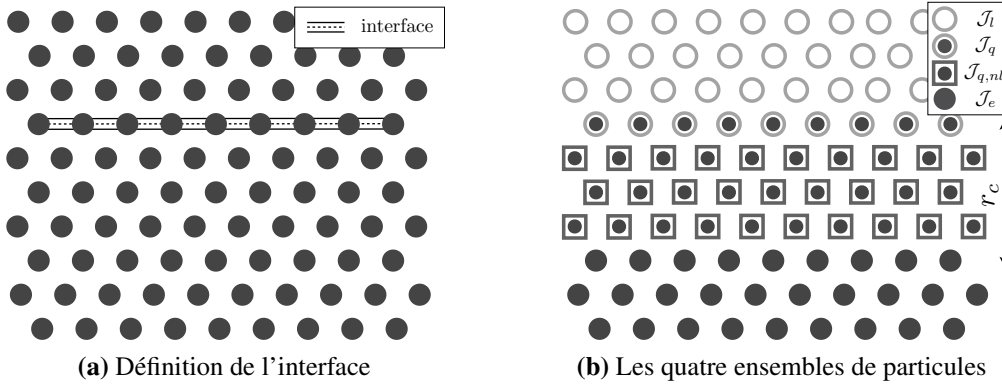


FIGURE 2.4 – Configuration dans le cas d'une interface plane en 2D

Chaque particule de  $\mathcal{J}_l$  est définie au moyen de l'approximation locale de l'énergie (similaire à (2.9)) telle que :

$$\forall i \in \mathcal{J}_l, E_i^{QC} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_i} \phi_{ij}^{QC} \quad \text{avec} \quad \phi_{ij}^{QC} = \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j)) \quad \forall j \in \mathcal{J} \quad (2.21)$$

selon (2.16),  $P = 1$ ,  $\mathbf{r}_i^1(j) = \mathbf{r}_i^L(j)$  et  $\omega_i^1(j) = 1$ . Dans le cas des particules de  $\mathcal{J}_e$ , le caractère non-local du comportement est préservé :

$$\forall i \in \mathcal{J}_e, E_i^{QC} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_i} \phi_{ij}^{QC} \quad \text{avec} \quad \phi_{ij}^{QC} = \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j)) \quad \forall j \in \mathcal{J} \quad (2.22)$$

Cette fois  $P = 1$ ,  $\mathbf{r}_i^1(j) = \mathbf{r}_i^e(j)$  et  $\omega_i^1(j) = 1$ . Les interactions entre particules non-locales  $\mathcal{J}_q \cup \mathcal{J}_{q,nl} \cup \mathcal{J}_e$  gardent leur définition exacte, il faut donc que les particules de  $\mathcal{J}_l$  et  $\mathcal{J}_e$  respectent (2.17). Cela impose alors :

$$\forall i \in \mathcal{J}_q, E_i^{QC} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_i} \phi_{ij}^{QC} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \phi_{ij}^{QC} = \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j)) & \forall j \in \mathcal{J}_l \\ \phi_{ij}^{QC} = \sum_{p=1}^P \omega_i^p(j) \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^p(j)) & \forall j \in \mathcal{J}_q \\ \phi_{ij}^{QC} = \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j)) & \forall j \in \mathcal{J}_e \cup \mathcal{J}_{q,nl} \end{cases} \quad (2.23)$$

et

$$\forall i \in \mathcal{J}_{q,nl}, E_i^{QC} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_i} \phi_{ij}^{QC} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \phi_{ij}^{QC} = \sum_{p=1}^P \omega_i^p(j) \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^p(j)) & \forall j \in \mathcal{J}_l \\ \phi_{ij}^{QC} = \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j)) & \forall j \in \mathcal{J} \setminus \mathcal{J}_l \end{cases} \quad (2.24)$$

Ainsi, presque toutes les interactions sont décrites de façon explicite avec un unique coefficient de pondération fixé à 1. Seules les interactions  $\phi_{ij}^{QC}$  avec  $(i, j) \in (\mathcal{J}_q, \mathcal{J}_q)$  ou  $(i, j) \in (\mathcal{J}_{q,nl}, \mathcal{J}_l)$  ne sont pas définies. Dans le premier cas de figure d'interfaces planes, il est possible de choisir indépendamment une description locale ou non-locale telle que :

$$\phi_{ij}^{QC} = \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j)) \quad \text{ou} \quad \phi_{ij}^{QC} = \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j)) \quad \forall (i, j) \in (\mathcal{J}_q, \mathcal{J}_q) \quad (2.25)$$

Finalement, le TAB.2.1 résume les définitions de  $\phi_{ij}^{QC}$  fixées. La dernière étape consiste à définir les interactions  $\phi_{ij}^{QC}$  avec  $(i, j) \in (\mathcal{J}_{q,nl}, \mathcal{J}_l)$  de sorte que les particules de  $\mathcal{J}_q \cup \mathcal{J}_{q,nl}$  respectent (2.17).

|                            | $j \in \mathcal{J}_l$                                       | $j \in \mathcal{J}_q$            | $j \in \mathcal{J}_{q,nl}$       | $j \in \mathcal{J}_e$            |
|----------------------------|-------------------------------------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|
| $i \in \mathcal{J}_l$      | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j))$                            | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j))$ | —                                |
| $i \in \mathcal{J}_q$      | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j))$                            | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ |
| $i \in \mathcal{J}_{q,nl}$ | $\sum_{p=1}^P \omega_i^p(j) \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^p(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ |
| $i \in \mathcal{J}_e$      | —                                                           | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ |

**TABLE 2.1** – Bilan des hypothèses effectuées sur la définition de l'énergie d'interaction  $\phi_{ij}^{QC}$

Remarque : les particules de  $\mathcal{J}_q$  suivent une description de type Quasi-Non-Locale où  $\mathbf{r}_i(j) = \mathbf{r}_i^e(j)$  ou  $\mathbf{r}_i^L(j)$ .

### 2.2.1 Approximation avec conservation de l'énergie globale : NL2L

La première approximation utilise un nouveau schéma de reconstruction  $\mathbf{r}_i^q(j)$ , défini ci-dessous, pour traiter les interactions  $\phi_{ij}^{QC}$  avec  $(i, j) \in (\mathcal{J}_{b,nl}, \mathcal{J}_l)$ . Il y a alors un seul coefficient de pondération :

$$\sum_{p=1}^P \omega_i^p(j) \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^p(j)) = \omega_i(j) \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^p(j)) \quad (2.26)$$

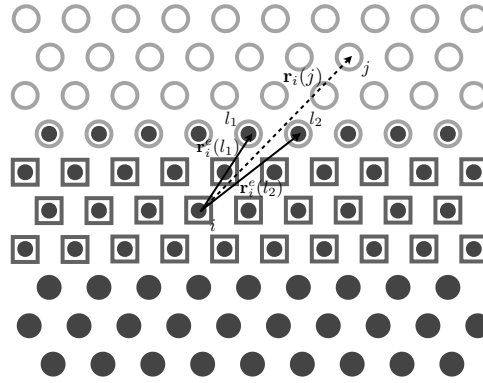


**Définition :**  $\mathbf{r}_i^q(j)$  est un schéma de reconstruction linéaire satisfaisant (2.7) tel que :

$$\mathbf{r}_i^q(j) = \sum_{l \in \mathcal{J}_i^q(j)} \alpha_i^l(j) (\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_i) = \sum_{l \in \mathcal{J}_i^q(j)} \alpha_i^l(j) \mathbf{r}_i^e(l) \quad (2.27)$$

avec  $\mathcal{J}_i^q(j) \subset \mathcal{J}_i \cap \mathcal{J}_q$ .

En 2D, ce sont les deux particules  $l_1$  et  $l_2$  qui sont premier voisin l'une de l'autre, tel que  $(l_1 l_2)$  intersecte  $\mathbf{r}_i(j)$  (voir FIG.2.5). Ainsi, il n'y a qu'un unique couple de particules de  $\mathcal{J}_q$  qui puisse être utilisé pour chaque vecteur  $\mathbf{r}_i(j)$  devant être reconstruit.



**FIGURE 2.5** – Illustration du schéma de reconstruction  $\mathbf{r}_i^q(j)$  par les particules  $l_1$  et  $l_2$

**Proposition :** L'approximation de l'énergie basée sur TAB.2.1 et (2.26) est géométriquement consistante si pour  $i \in \mathcal{J}_{b,nl}$  et  $j \in \mathcal{J}_l$  :

$$\omega_i(j) = -2 \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^q(j)}{\partial \mathbf{x}_i} \right)^{-1} \quad (2.28)$$

**Démonstration :** voir Annexe A.  $\square$

L'énergie est préservée localement pour toutes les particules  $i \in \mathcal{J}_a \cup \mathcal{J}_b \cup \mathcal{J}_l$ . Seule la partition de l'énergie des particules  $i \in \mathcal{J}_{q,nl}$  est modifiée du fait du coefficient de pondération  $\omega_i(j)$  qui peut être différent de 1. Le corollaire suivant montre des propriétés de conservation de l'énergie.

**Corollaire :** Les définitions des interactions  $\phi_{ij}^{QC}$  proposées conservent l'énergie le long de la direction principale du réseau qui ne définit pas l'interface.

**Démonstration :** voir Annexe A.  $\square$

La démarche est similaire pour des problèmes 3D. L'interface est alors définie par deux vecteurs de base du réseau et l'énergie se conserve le long du troisième.

### 2.2.2 Approximation avec conservation de l'énergie locale : NL2L-loc

Le principe de cette seconde approximation est d'utiliser les deux schémas de reconstruction  $\mathbf{r}_i^q(j)$  et  $\mathbf{r}_i^L(j)$  pour définir les interactions  $\phi_{ij}^{QC}$  avec  $(i, j) \in (\mathcal{J}_{q,nl}, \mathcal{J}_l)$ , tel que :

$$\sum_{p=1}^P \omega_i^p(j) \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^p(j)) = \omega_i(j) \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^q(j)) + (1 - \omega_i(j)) \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j)) \quad (2.29)$$

**Proposition :** L'approximation de l'énergie basée sur TAB.2.1 et (2.29) est géométriquement consistante si pour  $i \in \mathcal{J}_{b,nl}$  et  $j \in \mathcal{J}_l$  :

$$\omega_i(j) = - \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^q(j)}{\partial \mathbf{x}_i} \right)^{-1} \quad (2.30)$$

**Démonstration :** Ici aussi, il suffit de prouver que chaque particule de  $\mathcal{J}_{q,nl}$  et  $\mathcal{J}_q$  vérifie la condition (2.17). La démarche consiste à suivre les mêmes arguments que ceux développés pour l'approximation précédente.  $\square$

L'approximation NL2L-loc fait intervenir une partition de l'unité pour redéfinir l'énergie d'interaction, cela implique donc que l'énergie se conserve localement sur chaque particule (contrairement au schéma NL2L). La répartition de l'énergie est différente entre les approximations NL2L et NL2L-loc dans la zone de transition  $\mathcal{J}_{q,nl}$ . Dans ce second cas, la reconstruction ne fait pas intervenir que les particules de  $\mathcal{J}_q$  mais également des premiers voisins (voir FIG.2.6). Même si les deux approximations sont équivalentes en statique, de par une distribution différente de l'énergie, leur comportement diffère en dynamique (voir la Section 4).

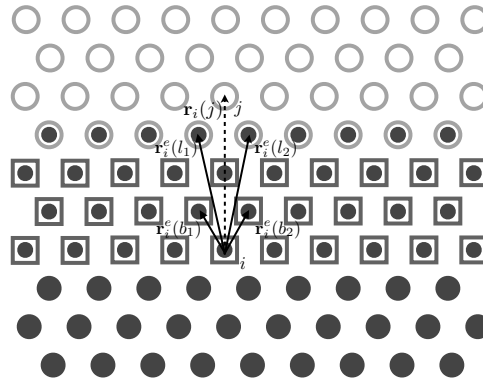
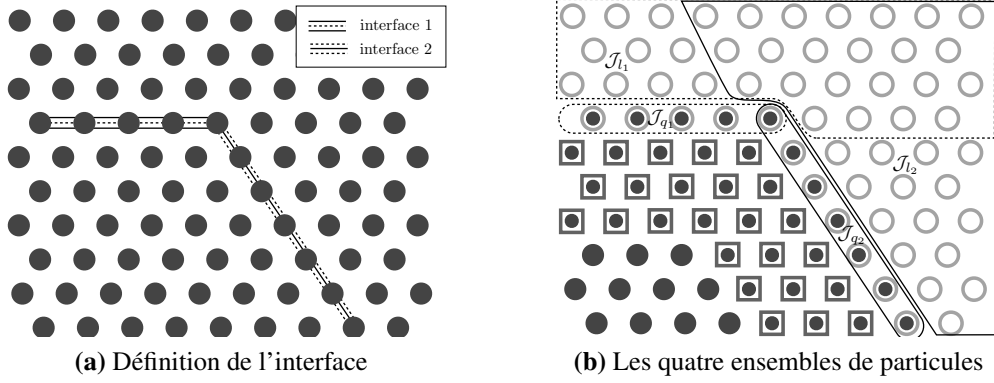


FIGURE 2.6 – Illustration du schéma de reconstruction mixte  $\mathbf{r}_i^q(j)$  et  $\mathbf{r}_i^L(j)$

### 2.3 Cas des interfaces présentant des coins

Deux interfaces planes connectant des premiers voisins sont considérées. Ces deux interfaces se croisent et créent un coin comme illustré sur la FIG.2.7a. Cette situation doit

pouvoir être prise en compte dans les approximations développées, car il est très probable que les besoins de la simulation le nécessitent. Dans ce sens,  $\mathcal{J}_{q_1}$  et  $\mathcal{J}_{q_2}$  représentent respectivement les ensembles de particules appartenant à la première et la seconde interface plane.  $\mathcal{J}_{l_1}$  et  $\mathcal{J}_{l_2}$  représentent l'ensemble des particules du domaine local au-delà de la première interface et l'ensemble des particules du domaine local au-delà de la seconde interface (voir FIG.2.7b).



**FIGURE 2.7** – Configuration dans le cas d'une interface présentant un angle

L'ensemble des particules du domaine local  $\mathcal{J}_l$  vérifie  $\mathcal{J}_l = \mathcal{J}_{l_1} \cup \mathcal{J}_{l_2}$  avec  $\mathcal{J}_{l_1} \cap \mathcal{J}_{l_2} \neq \emptyset$ . De même pour les particules d'interface  $\mathcal{J}_q$  qui vérifie  $\mathcal{J}_q = \mathcal{J}_{q_1} \cup \mathcal{J}_{q_2}$  avec  $\mathcal{J}_{q_1} \cap \mathcal{J}_{q_2} \neq \emptyset$ .

L'objectif est alors d'étendre l'approximation NL2L définie pour une interface plane à un cas où deux interfaces planes forment un coin. Les TAB.2.2 et 2.3 résument les hypothèses de départ sur la définition des énergies d'interaction  $\phi_{ij}^{QC}$ . Sous ces hypothèses, les particules de  $\mathcal{J}_l$ ,  $\mathcal{J}_{q,nl}$  et  $\mathcal{J}_e$  respectent la condition (2.17).

|                            | $j \in \mathcal{J}_l$                                                                                            | $j \in \mathcal{J}_q$            | $j \in \mathcal{J}_{q,nl}$       | $j \in \mathcal{J}_e$            |
|----------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|
| $i \in \mathcal{J}_l$      | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j))$                                                                                 | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j))$ | —                                |
| $i \in \mathcal{J}_q$      | voir TAB.2.3                                                                                                     | voir TAB.2.3                     | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ |
| $i \in \mathcal{J}_{q,nl}$ | $-2 \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^q(j)}{\partial \mathbf{x}_i} \right)^{-1} \phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^q(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ |
| $i \in \mathcal{J}_e$      | —                                                                                                                | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$ |

**TABLE 2.2** – Approximation NL2L des termes  $\phi_{ij}^{QC}$  dans le cas d'un coin (partie 1)

Seule l'approximation des particules de  $\mathcal{J}_q$  doit être redéfinie afin de satisfaire la condition (2.17). Deux nouveaux schémas de reconstruction  $\mathbf{r}_i^{q_1}(j)$  et  $\mathbf{r}_i^{q_2}(j)$  sont introduits. Ils sont similaires à  $\mathbf{r}_i^q(j)$ , mais la reconstruction a été restreinte à l'utilisation de particules de  $\mathcal{J}_{q_1}$  et de  $\mathcal{J}_{q_2}$ .

|                                                       |                                                  |                                                   |                                                   |
|-------------------------------------------------------|--------------------------------------------------|---------------------------------------------------|---------------------------------------------------|
|                                                       | $j \in \mathcal{J}_{l_1} \cup \mathcal{J}_{q_1}$ | $j \in \mathcal{J}_l \setminus \mathcal{J}_{l_1}$ | $j \in \mathcal{J}_q \setminus \mathcal{J}_{q_1}$ |
| $i \in \mathcal{J}_{q_1} \setminus \mathcal{J}_{q_2}$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j))$                 | $\omega_i(j)\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^{q_2}(j))$   | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$                  |
|                                                       | $j \in \mathcal{J}_{l_2} \cup \mathcal{J}_{q_2}$ | $j \in \mathcal{J}_l \setminus \mathcal{J}_{l_2}$ | $j \in \mathcal{J}_q \setminus \mathcal{J}_{q_2}$ |
| $i \in \mathcal{J}_{q_2} \setminus \mathcal{J}_{q_1}$ | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j))$                 | $\omega_i(j)\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^{q_1}(j))$   | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^e(j))$                  |
|                                                       | $j \in \mathcal{J}_l \cup \mathcal{J}_q$         |                                                   |                                                   |
| $i \in \mathcal{J}_{q_2} \cap \mathcal{J}_{q_1}$      | $\phi_{ij}^e(\mathbf{r}_i^L(j))$                 |                                                   |                                                   |

**TABLE 2.3** – Approximation NL2L des termes  $\phi_{ij}^{QC}$  dans le cas d'un coin (partie 2)

Le cas des interfaces planes étant un cas particulier du cas des interfaces présentant un coin, il est plus pratique d'introduire la nouvelle valeur de pondération  $\omega_i(j)$  associée aux particules de  $\mathcal{J}_q$  sous la forme :

$$\omega_i(j) = -2 \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^{q_2}(j)}{\partial \mathbf{x}_i} \right)^{-1} + \omega_i^{corr}(j) \quad \text{si } (i, j) \in (\mathcal{J}_{q_1} \setminus \mathcal{J}_{q_2}, \mathcal{J}_l \setminus \mathcal{J}_{l_1}) \quad (2.31)$$

avec une expression similaire pour le cas des particules  $i \in \mathcal{J}_{q_2} \setminus \mathcal{J}_{q_1}$  en intervertissant les indices 1 et 2.

**Corolaire :** L'approximation NL2L de l'énergie basée sur TAB.2.2, TAB.2.3 et (2.31) est géométriquement consistante si elle respecte la condition suivante pour tout  $k \in \mathcal{J}_{b_1}$  :

$$\begin{aligned} & \forall (n, m) \setminus (|\mathbf{R}_{ij}| = R_n, \mathbf{R}_{ij} / \tau_m) \\ & \sum_{j \in \mathcal{J}_l \setminus \mathcal{J}_{l_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \tau_m) \omega_k^{corr}(j) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^{b_2}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\ & + \sum_{i \in \mathcal{J}_{q_2} \setminus \mathcal{J}_{q_1}} \sum_{j \in \mathcal{J}_{l_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \tau_m) \omega_i^{corr}(j) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^{b_1}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\ & = \left[ \sum_{i \in \mathcal{J}_l \setminus \mathcal{J}_{l_1}} \sum_{j \in \mathcal{J}_{l_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \tau_m) \left( -2 \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^{q_1}(j)}{\partial \mathbf{x}_i} \right)^{-1} \right) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^{q_1}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \right]^{(*)} \end{aligned} \quad (2.32)$$

Le terme  $(*)$  est calculé sans considérer les reconstructions dues à la présence de la seconde interface  $q_2$ . Nous obtenons une condition similaire pour les particules  $k \in \mathcal{J}_{q_2}$  en intervertissant les indices 1 et 2.

**Démonstration :** voir annexe A.  $\square$

Dans une configuration avec un angle obtus en 2D et un réseau hexagonal, la correction  $\omega_i^{corr}(j)$  est systématiquement nulle si le rayon de coupure inclut au plus les 8<sup>es</sup>

voisins ( $r_c \leq 4r_0$ ). En effet, le second terme noté  $(*)$  de (2.32) disparaît sous cette configuration.

## 2.4 Applications numériques en statique

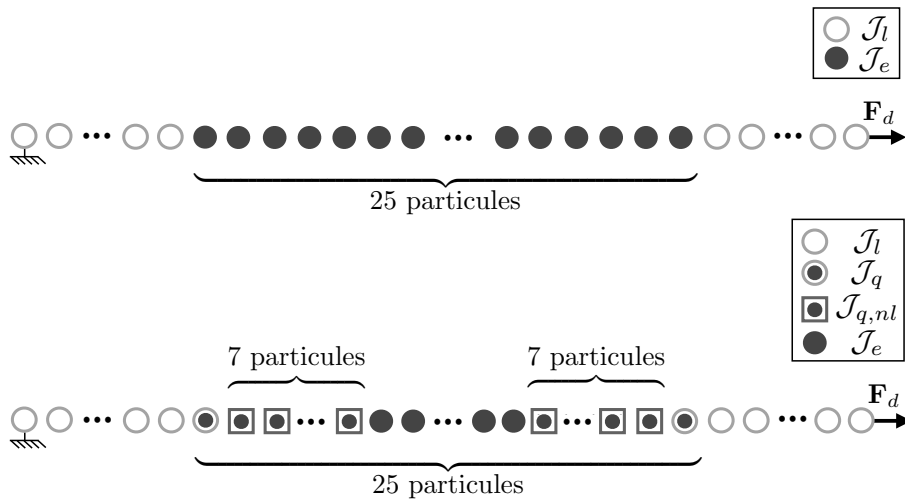
Plusieurs simulations numériques en 1D et 2D permettent de mettre en avant le gain en terme de précision à proximité des interfaces locales/non-locales. L'objectif est de comparer les approximations NL2L et NL2L-loc développées précédemment avec l'approximation QC classique dans le cadre de problèmes de statique.

### 2.4.1 Simulations 1D

Le problème des “forces fantômes” de l'approximation QC classique s'illustre par un simple essai de traction sur un problème 1D. Dans l'exemple représenté FIG.2.8, il s'agit d'une chaîne de 55 particules qui forment un réseau régulier ayant pour pas  $r_0 = 1$ . Une extrémité de la chaîne de particules est encastree tandis qu'un effort de traction  $F_d$  est imposé sur l'autre extrémité. Une description non-locale de l'énergie est utilisée au centre de la chaîne (soit 25 particules), tandis qu'une description locale basée sur l'approximation locale permet d'évaluer l'énergie dans le reste du modèle. Le rayon de coupure inclut jusqu'aux 8<sup>es</sup> voisins ( $r_c = 8r_0$ ) et chaque interaction entre particules  $i$  et  $j$  est décrite par un potentiel de type Lennard-Jones :

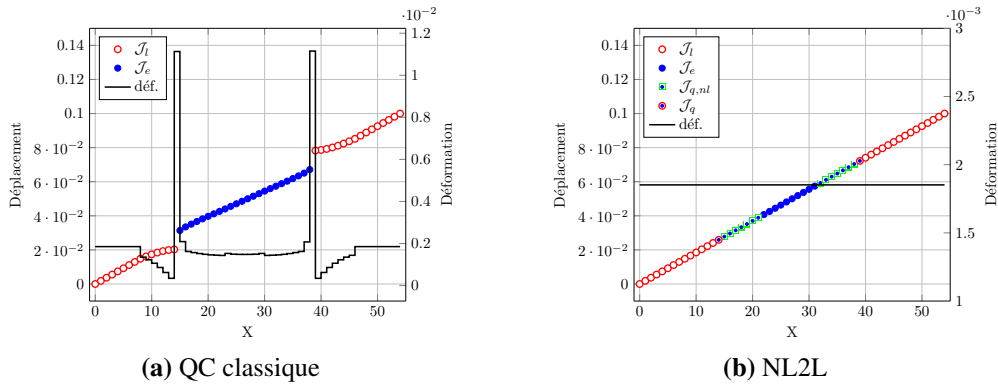
$$\phi_{ij}^e = 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2.33)$$

avec  $\epsilon_{ij} = \frac{1}{72}$ ,  $\sigma_{ij} = \left( \frac{1}{2} \right)^{1/6} |X_j - X_i|$  et  $r_{ij} = |x_j - x_i|$ .

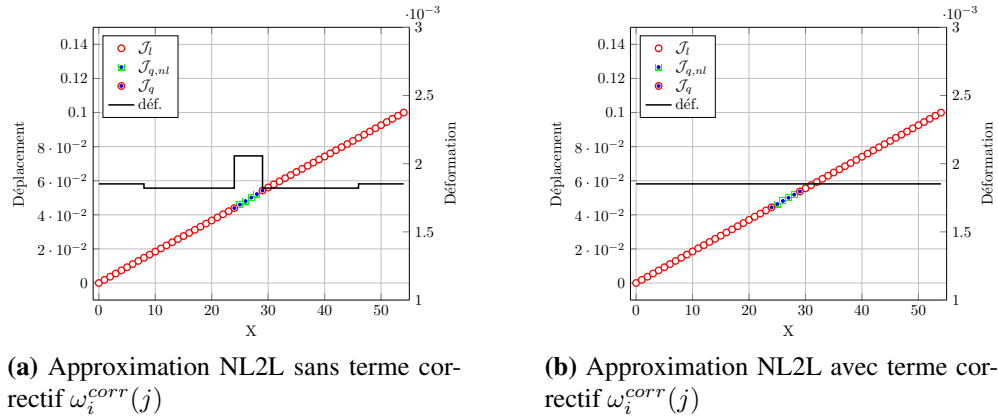


**FIGURE 2.8** – Essais de traction sur une chaîne de particule 1D : approximation QC classique en haut et approximation NL2L/NL2L-loc en bas

Comme le montre la FIG.2.9a, le champ de déformation obtenu avec l'approximation QC classique n'est pas homogène avec des écarts de près de 500% autour de la moyenne. En effet, cette approximation ne respecte pas la condition de consistance géométrique (2.14) et donc pas la condition (2.17). L'approximation NL2L, qui respecte la condition (2.17) en introduisant une zone de transition avec une reconstruction spécifique de l'énergie, évite ce phénomène. La solution à une sollicitation de traction simple génère bien un champ de déformation uniforme (voir FIG.2.9b), tant que le comportement demeure élastique.



**FIGURE 2.9** – Champs de déplacement et déformation sur un cas de traction 1D



**FIGURE 2.10** – Champs de déplacement et de déformation sur un cas de traction 1D lorsque les deux interfaces sont rapprochées

Dans ce cas 1D statique, les approximations NL2L et NL2L-loc sont équivalentes, c'est pourquoi les résultats ne sont illustrés qu'avec la première approximation. La FIG.2.10a montre les limites de l'approximation NL2L lorsque les interfaces sont trop proches l'une de l'autre. Dans ce cas particulier, non pertinent en 1D, mais qui révèle la problématique des coins en 2D, il n'y a que 6 particules dans le domaine non-local

alors que  $r_c = 8r_0$ . L'utilisation de l'approximation NL2L, en prenant en compte le terme correctif  $\omega_i^{corr}(j)$  issu de (2.32), permet de conserver l'homogénéité du champ de déformation (voir FIG.2.10b). Il faut également remarquer que malgré l'absence du terme correctif, les écarts maximaux observés autour de la valeur moyenne de la déformation ne sont que de 15%.

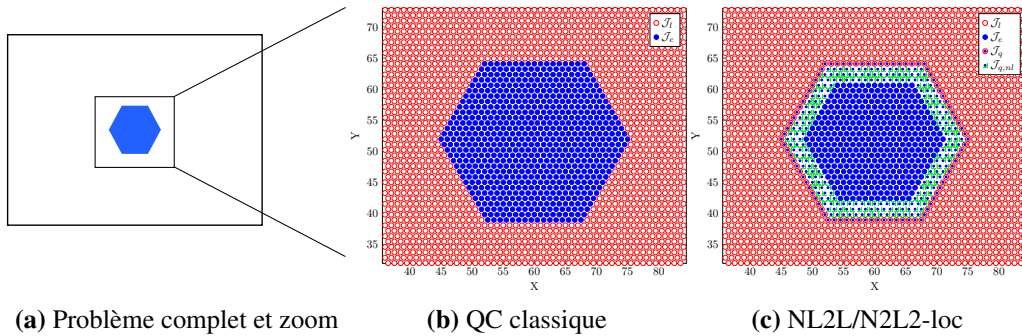
Ces résultats montrent qu'il est possible de conserver la précision du modèle entièrement non-local avec un modèle couplé local/non-local sur des cas 1D statiques. De plus, il est important de noter qu'il n'y a de restriction ni sur la taille du rayon de coupure ni sur le choix des potentiels  $\phi_{ij}^e$  utilisés (Lennard-Jones, Morse...).

### 2.4.2 Simulations 2D

Les approximations développées sont maintenant utilisées dans un cadre plus révélateur en 2D. Un réseau hexagonal ayant pour pas  $r_0 = 1$  définit l'état naturel du problème. Le domaine est constitué de  $121 \times 121$  particules, une description non-locale de l'énergie est utilisée sur environ 850 particules situées au centre du domaine. Chaque interaction entre les particules  $i$  et  $j$  est décrite, comme précédemment, par un potentiel de Lennard-Jones :

$$\phi_{ij}^e = 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2.34)$$

avec  $\epsilon_{ij} = \frac{1}{72}$ ,  $\sigma_{ij} = \left( \frac{1}{2} \right)^{1/6} |\mathbf{X}_j - \mathbf{X}_i|$  et  $r_{ij} = |\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i|$ . Le rayon de coupure inclut jusqu'aux 8<sup>es</sup> voisins ( $r_c = 4r_0$ ). Sur la FIG.2.11, la répartition des particules locales et non-locales est représentée dans le cadre de l'approximation QC classique (2.11b) et des approximations NL2L/NL2L-loc (FIG.2.11c). Dans ces derniers cas, la zone de transition apparaît en vert.

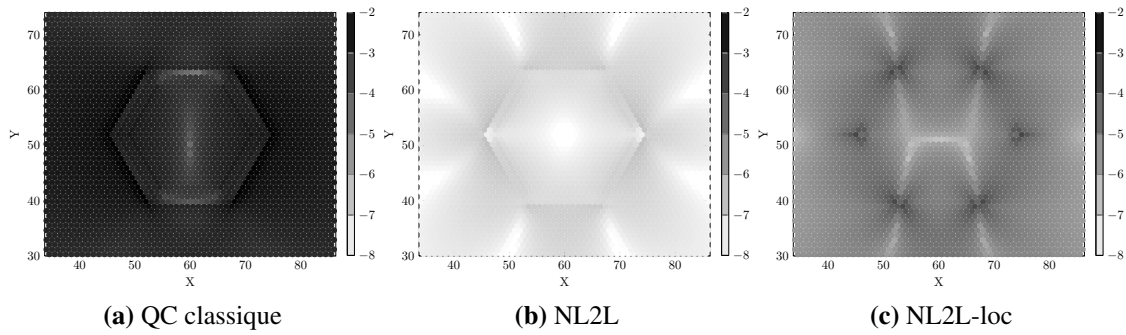


**FIGURE 2.11** – Représentation du problème couplé local/non-local en 2D

**Essai de traction :** L'essai de traction permet de définir un premier cas de chargement. Pour limiter les effets de bord, le déplacement suivant  $e_x$  est imposé sur plusieurs

rangées de particules des bords droit et gauche afin de générer un état de déformation le plus homogène possible. La solution de référence est calculée avec un modèle presque entièrement non-local, c.-à-d. un modèle couplé local/non-local où le domaine non-local est très grand ( $101 \times 101$  particules non-locales).

Les solutions approchées sont ensuite obtenues avec les approximations QC classique, NL2L et NL2L-loc pour lesquelles l'erreur normalisée est calculée sur le champ de déplacement ; ces erreurs sont représentées FIG.2.12. Le TAB.2.4 fournit des moyennes de l'erreur en déplacement pour les différentes approximations. La première erreur moyenne "err1" est calculée sur l'ensemble des particules non-locales de  $\mathcal{J}_q \cup \mathcal{J}_{q,nl} \cup \mathcal{J}_e$  tandis que la seconde erreur moyenne "err2" est calculée sur 18 particules de  $\mathcal{J}_e$  situées au centre du modèle.



**FIGURE 2.12** – Log(erreur) sur le déplacement pour un chargement de traction

|            | QC    | NL2L  | NL2L-loc |
|------------|-------|-------|----------|
| err1 (log) | -2.40 | -7.05 | -4.44    |
| err2 (log) | -2.50 | -7.15 | -4.64    |

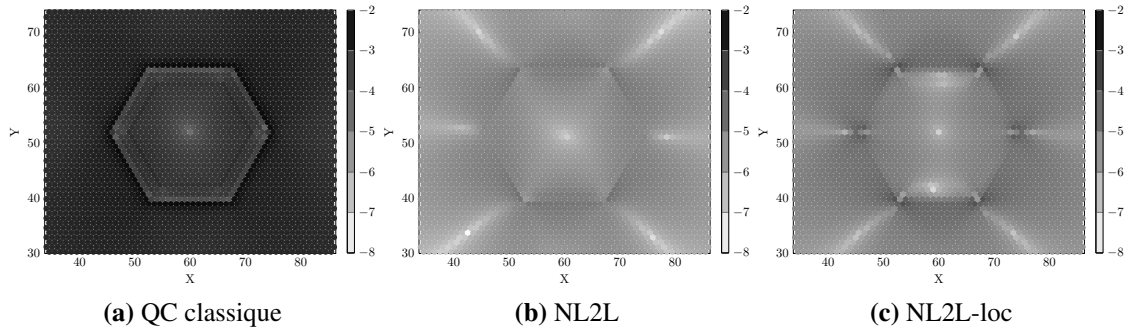
**TABLE 2.4** – Moyennes de l'erreur sur le déplacement : essai de traction

La TAB.2.4 indique que les erreurs sont importantes lorsque l'approximation QC classique est utilisée et surtout qu'elles sont présentes sur tout le domaine (voir FIG.2.12a). Dans le cas de l'approximation NL2L, l'erreur est réduite d'un facteur  $10^{4,5}$ , cette différence est nettement visible sur la FIG.2.12b. Finalement, l'approximation NL2L-loc permet de réduire l'erreur d'un facteur  $10^{2,2}$ . Dans ce dernier cas, il faut noter que l'erreur se concentre principalement autour des coins (voir FIG.2.12c). En effet, l'approximation NL2L-loc ne respecte pas la condition (2.17) si l'interface n'est pas plane, il y a encore des "forces fantômes" à proximité des coins.

**Essai de cisaillement :** Un chargement définissant un essai de cisaillement est appliqué aux mêmes modèles particuliers 2D. Le déplacement suivant  $e_y$  est imposé sur plusieurs



couches de particules des bords gauche et droit. Le déplacement suivant  $e_x$  est également bloqué sur les première et dernière colonnes de particules. La même approche que pour l'essai de traction est utilisée pour obtenir la solution de référence. Le TAB.2.5 et la FIG.2.13 résument les résultats obtenus avec ce nouveau chargement.



**FIGURE 2.13** – Log(erreur) sur le déplacement pour un chargement de cisaillement

|            | QC    | NL2L  | NL2L-loc |
|------------|-------|-------|----------|
| err1 (log) | -2.67 | -5.10 | -4.64    |
| err2 (log) | -2.76 | -5.22 | -4.77    |

**TABLE 2.5** – Moyennes de l'erreur sur le déplacement : essai de cisaillement

La réduction de l'erreur par rapport à l'approximation QC classique est d'un facteur  $10^{2,4}$  pour l'approximation NL2L et d'un facteur  $10^2$  pour l'approximation NL2L-loc. Les approximations NL2L et NL2L-loc donnent donc des résultats assez similaires malgré les défauts de la seconde approximation. Il est également notable que l'erreur se concentre principalement à proximité des interfaces, particulièrement des coins, et diminue au fur et à mesure que l'on s'en éloigne.

**Essai de traction avec défaut :** Le même chargement, qui a été défini dans l'essai de traction précédent, est appliqué à un réseau de particules présentant un défaut. Ce défaut est obtenu en enlevant 7 particules de  $\mathcal{J}_e$  situées au centre du modèle. En plus de la comparaison entre les différentes approximations, l'influence de la taille du domaine non-local sur l'erreur normalisée et moyenne est également observée.

Sur les FIG.2.14, 2.15, et 2.16 l'erreur normalisée est représentée sur les particules non-locales, soit celles de  $\mathcal{J}_q \cup \mathcal{J}_{q,nl} \cup \mathcal{J}_e$ , en utilisant respectivement l'approximation QC classique, NL2L et NL2L-loc. Dans chaque cas, l'erreur est tracée pour différentes tailles de domaine non-local, avec  $15 \times 15$ ,  $47 \times 47$ , et  $87 \times 87$  particules non-locales ( $\mathcal{J}_q \cup \mathcal{J}_{q,nl}$ ). Finalement la FIG.2.17 représente l'évolution des erreurs moyennes en fonction de la taille du domaine non-local et de l'approximation utilisée.

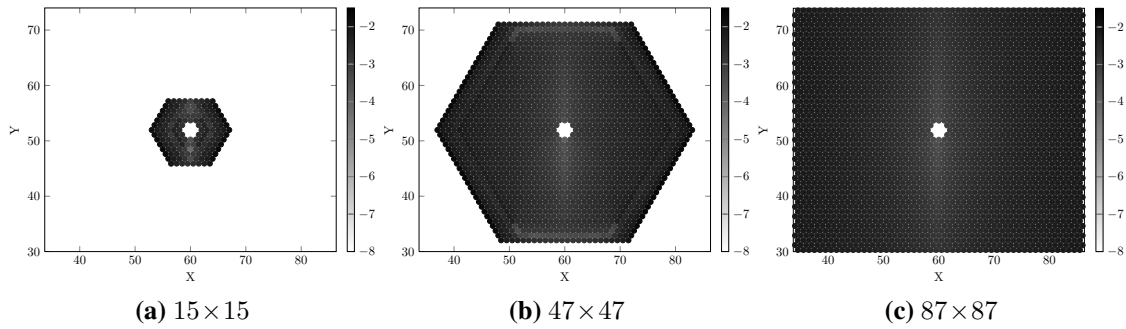


FIGURE 2.14 – Erreur normalisée, approximation QC classique

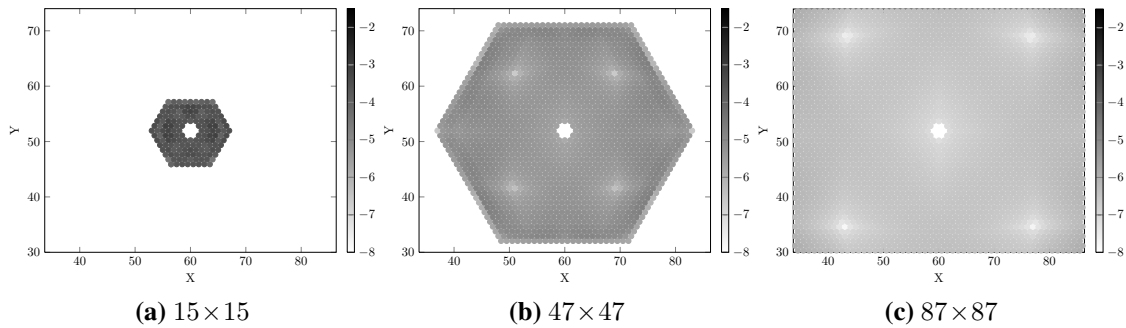


FIGURE 2.15 – Erreur normalisée, approximation NL2L

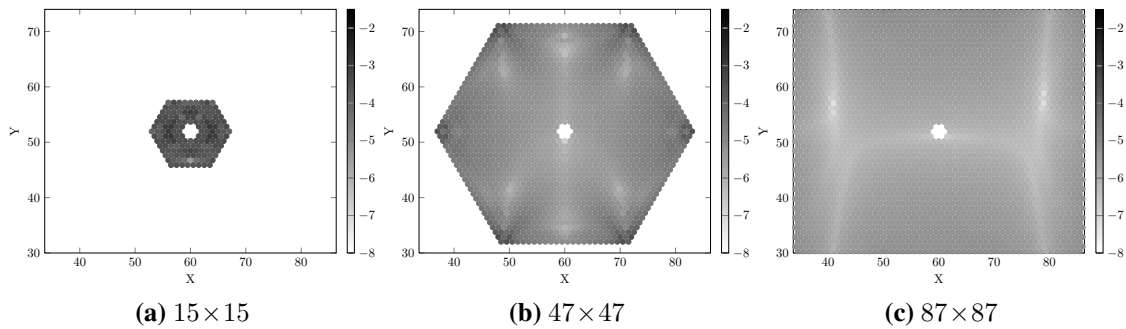
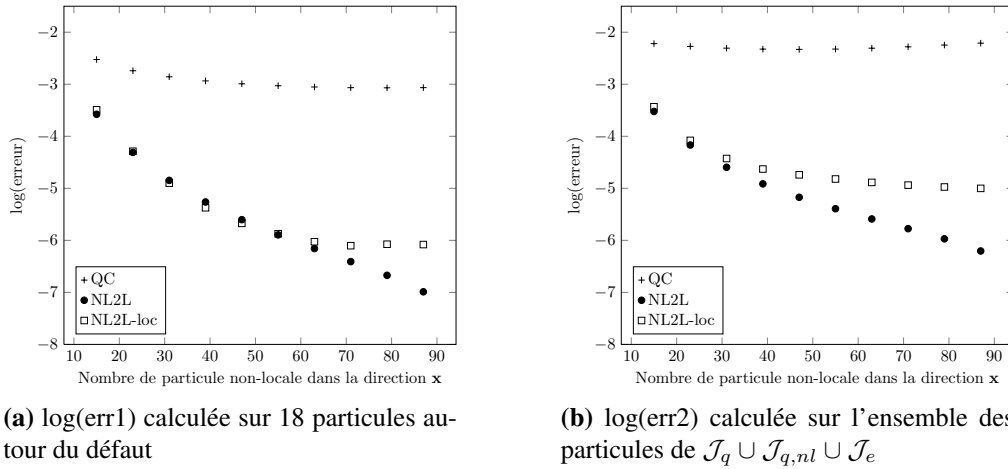


FIGURE 2.16 – Erreur normalisée, approximation NL2L-loc

Plusieurs observations peuvent être faites à partir de ces résultats :

- pour un petit nombre de particules non-locales (côté gauche des figures), toutes les approximations conduisent à une erreur moyenne non négligeable, même si elle est moins importante dans le cas de l'approximation NL2L ou NL2L-loc. Ce résultat n'est pas surprenant dans le sens où les interfaces sont très proches du défaut, le champ de déformation n'y est pas assez homogène ;
- l'erreur moyenne ne diminue pas significativement avec l'augmentation de la taille



**FIGURE 2.17** – Evolution des erreurs moyennes en fonction de la taille du domaine non-local

du domaine non-local lorsque l'approximation QC classique est utilis  e, ceci   tant d      aux "forces fant  mes"    proximit   des interfaces ;

- l'erreur moyenne diminue de fa  on cons  quente lorsque l'approximation NL2L-loc est utilis  e, mais tend vers une valeur asymptotique    cause de la pr  sence des coins ;
- l'erreur moyenne diminue de fa  on monotone lorsque l'approximation NL2L est utilis  e.

Ces r  sultats en 2D illustrent l'importance de d  finir une approximation de l'  nergie g  om  triquement consistante afin de pr  server une pr  cision du mod  le coupl   local/non-local   quivalente    celle du mod  le de r  f  rence enti  rement non-local. De plus, ils confirment que la zone de transition (c.-  -d. l'interface entre les mod  les) doit   tre plac  e suffisamment loin de la zone d'int  r  t sur laquelle l'hypoth  se d'un champ de d  formation uniforme n'est pas valide.

### 3 Estimation d'erreur locale

Le mod  le non-local est uniquement employ   dans les zones d'int  r  t du probl  me, l   o   les m  canismes en jeu sont les plus complexes (dislocation, fissure...). Cependant il est difficile d'  tablir *a priori* la taille optimale du domaine non-local i.e. celle qui va minimiser les co  ts de calculs tout en conservant une pr  cision satisfaisante. Les estimateurs d'erreur locale permettent de quantifier *a posteriori* l'erreur effectu  e sur une quantit   d'int  r  t telle que l'ouverture d'une fissure. Il est alors possible de mettre en place une

procédure ajustant la taille du domaine non-local en fonction de la précision recherchée [Prudhomme *et al.*, 2009].

### 3.1 Définition

L'estimateur d'erreur locale est basé sur l'erreur de modèle entre un modèle de référence et un modèle approché. Dans ce contexte, le modèle de référence correspond à une modélisation où l'ensemble des  $N$  particules qui le compose utilise une description non-locale. Le modèle approché utilise une approximation de type QC (consistante ou non), qui définit deux domaines, l'un utilisant une description locale  $\mathcal{J}_l$  et l'autre une description non-locale  $\mathcal{J}/\mathcal{J}_l$  (voir FIG.2.18). Il y a donc deux solutions  $\mathbf{x}$  et  $\mathbf{x}_0$  associées respectivement au modèle de référence et au modèle approché suivant :

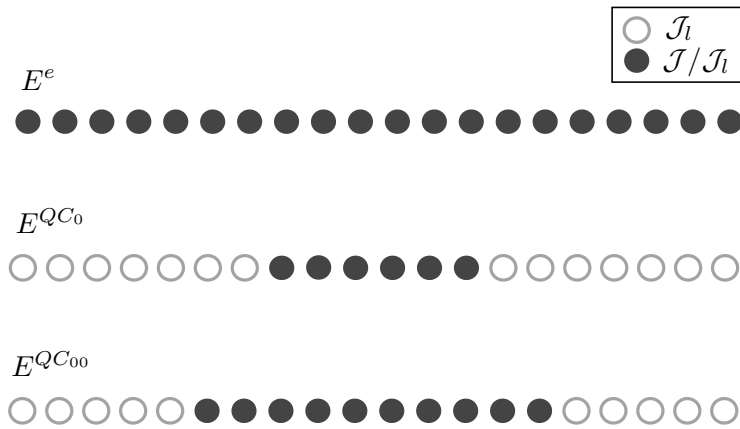
$$\text{Trouver } \mathbf{x} \in \mathcal{U} \text{ tel que : } \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \frac{\partial E^e}{\partial \mathbf{x}_i}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \mathbf{f}_i^{ext} \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V} \quad (2.35)$$

et

$$\text{Trouver } \mathbf{x}_0 \in \mathcal{U} \text{ tel que : } \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \frac{\partial E^{QC_0}}{\partial \mathbf{x}_{i_0}}(\mathbf{x}_0) = \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \mathbf{f}_i^{ext} \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V} \quad (2.36)$$

Un deuxième modèle approché, dont le domaine non-local est légèrement plus grand que dans la première approximation (voir FIG.2.18), est également défini.  $\mathbf{x}_{00}$  est le champ solution qui lui est associé :

$$\text{Trouver } \mathbf{x}_{00} \in \mathcal{U} \text{ tel que : } \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \frac{\partial E^{QC_{00}}}{\partial \mathbf{x}_{i_{00}}}(\mathbf{x}_{00}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \mathbf{f}_i^{ext} \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V} \quad (2.37)$$



**FIGURE 2.18** – Définition du modèle de référence et des deux modèles approchés en 1D

**Propriété :** Pour une quantité d'intérêt locale  $I(\mathbf{v})$  linéaire, qui peut se mettre sous la forme :

$$I(\mathbf{v}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \mathbf{f}_i^{adj} \quad (2.38)$$

nous pouvons donner une estimation (non garantie) de l'écart entre la solution exacte  $\mathbf{x}$  et approchée  $\mathbf{x}_0$  :

$$I(\mathbf{x}) - I(\mathbf{x}_0) \approx R_{00}(\mathbf{x}_0, \mathbf{p}_{00}) \quad (2.39)$$

avec  $R_{00}$  le résidu défini par :

$$R_{00}(\mathbf{w}, \mathbf{v}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \mathbf{f}_i^{ext} - \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \frac{\partial E^{QC_{00}}}{\partial \mathbf{w}_i}(\mathbf{w}) \quad (2.40)$$

et  $\mathbf{p}_{00}$ , le champ solution du problème adjoint :

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \sum_{j=1}^N \frac{\partial E^{QC_{00}}}{\partial \mathbf{x}_{i0} \partial \mathbf{x}_{j0}}(\mathbf{x}_0) \mathbf{p}_{j00} = \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \mathbf{f}_i^{adj} \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V} \quad (2.41)$$

**Démonstration :** voir annexe B.  $\square$

Finalement, seul le champ solution  $\mathbf{x}_0$  du modèle approché (2.36) est calculé. Pour obtenir une estimation de l'erreur locale, il suffit de réaliser le calcul du champ adjoint  $\mathbf{p}_{00}$  lui aussi obtenu avec un modèle approché issu de (2.37).

### 3.2 Illustration en 1D

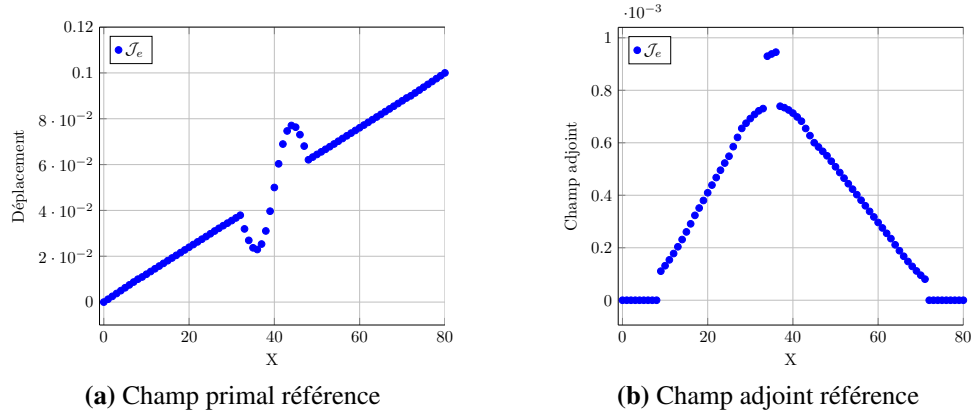
Le modèle 1D utilisé dans cette section est similaire à celui défini FIG.2.8. La chaîne est cette fois-ci composée de 81 particules qui forment toujours un réseau régulier de pas  $r_0 = 1$ . Le rayon de coupure inclut jusqu'aux 8<sup>es</sup> voisins et chaque interaction est décrite par un potentiel de type Lennard-Jones (voir Section 2.4.1). Un chargement localisé est appliqué au centre de la chaîne en plus du chargement de traction. La FIG.2.19 illustre le champ de déplacement et le champ adjoint calculé sur le modèle de référence, à savoir un modèle entièrement non-local (c.-à-d.  $E^{QC_{00}} = E^e$ ).

Le chargement de traction induit un champ de déplacement globalement linéaire, mais perturbé en son centre par le chargement localisé (voir FIG.2.19a). La quantité d'intérêt utilisé par l'estimateur d'erreur locale est le déplacement moyen de 3 particules du centre de la chaîne, soit :

$$I(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^3 \frac{\mathbf{x}_{k_i} - \mathbf{X}_{k_i}}{3} \quad (2.42)$$

Le champ adjoint associé à la quantité  $I(\mathbf{x})$  et calculé avec le modèle de référence est représenté sur la FIG.2.19b. Pour définir le champ adjoint des différentes approxima-

tions, un second calcul sur un modèle approché  $E^{QC_{00}}$  est utilisé. Celui-ci est similaire à  $E^{QC_0}$ , la seule différence étant la taille du domaine non-local qui a été augmentée de  $16r_0$ .



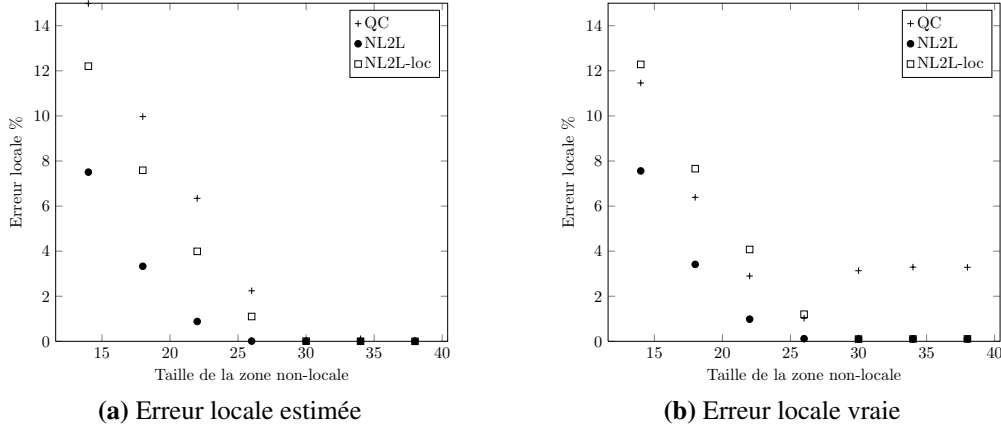
**FIGURE 2.19** – Champs de déplacement référence calculés avec un modèle entièrement non-local (1D)

La qualité de l'estimateur d'erreur locale est évaluée en faisant varier la taille du domaine non-local situé au centre de la chaîne. Différentes approximations sont comparées, à savoir les approximations NL2L, NL2L-loc et QC classique. L'erreur vraie est également calculée à partir du modèle de référence. Il apparaît FIG.2.20a que l'erreur estimée tend de la même façon vers 0 quelle que soit l'approximation utilisée. L'approximation NL2L est légèrement plus efficace et atteint 0 pour une taille de domaine non-local plus petite.

La FIG.2.20b illustre quant à elle l'évolution de l'erreur vraie. Celle-ci évolue de façon très similaire à l'erreur estimée dans le cas des approximations NL2L et NL2L-loc. Cependant, dans le cas de l'approximation QC classique, l'erreur vraie tend vers 3% alors que l'erreur estimée est nulle. L'estimateur d'erreur locale n'est donc pas fiable lorsqu'il est utilisé sur l'approximation QC classique probablement du fait de la présence de "forces fantômes".

### 3.3 Illustration en 2D

Le modèle 2D utilisé est identique à celui développé section 2.4.2 : le réseau est hexagonal de pas  $r_0 = 1$ , le rayon de coupure ( $r_c = 8r_0$ ) inclut jusqu'aux 8<sup>es</sup> voisins et les potentiels définissant les interactions sont du type Lennard-Jones. Le domaine comprend  $41 \times 41$  particules, comme dans le cas 1D on superpose un chargement de traction à un chargement localisé au centre du domaine. La FIG.2.21a illustre la composante suivant  $e_x$  du champ de déplacement calculé sur un modèle entièrement non-local qui tiendra



**FIGURE 2.20** – Évolution de l’erreur locale en fonction de la taille du domaine non-local (1D)

lieu de référence. Ce chargement induit une déformation globalement uniforme sauf au centre du modèle.

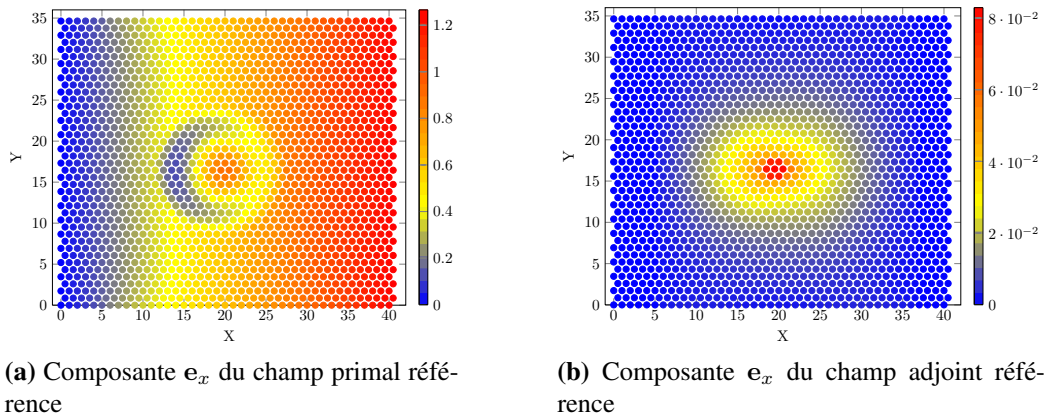
La moyenne du déplacement suivant  $\mathbf{e}_x$  sur 7 particules situées au centre du domaine définit la quantité d’intérêt  $I(\mathbf{x})$ , telle que :

$$I(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^7 \frac{\mathbf{x}_{k_i} - \mathbf{X}_{k_i}}{7} \mathbf{e}_x \quad (2.43)$$

La FIG.2.21b représente la composante suivant  $\mathbf{e}_x$  du champ adjoint associé à  $I(\mathbf{x})$ , son influence se dilue rapidement et reste concentrée au centre du domaine. Comme dans le cas 1D, pour définir le champ adjoint des différentes approximations, un second calcul avec un modèle approché  $E^{QC_{00}}$  est utilisé. Toujours similaire au modèle approché  $E^{QC_0}$ , la taille du domaine non-local a été augmentée cette fois-ci de  $4r_0$  suivant les directions  $\mathbf{e}_x$  et  $\mathbf{e}_y$ .

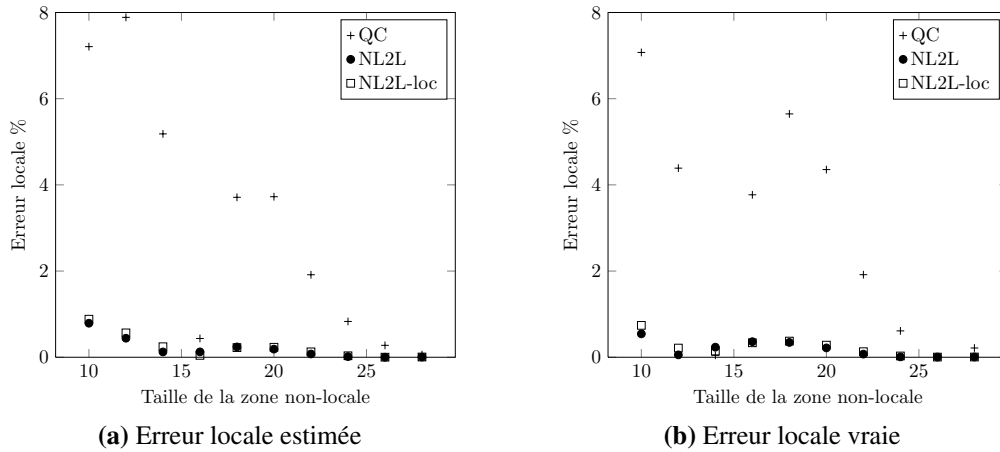
Afin de comparer les approximations NL2L, NL2L-loc et QC classique, un modèle approché qui définit un domaine non-local au centre du modèle et un domaine local partout ailleurs (voir FIG.2.11) est employé. Les erreurs estimée et vraie sur la quantité d’intérêt, représentées FIG.2.22, sont obtenues en faisant varier la taille du domaine non-local.

Dans le cas des approximations NL2L et NL2L-loc on observe que l’erreur estimée et l’erreur vraie FIG.2.22b ont des évolutions similaires et tendent toutes les deux vers 0 lorsque la taille du domaine non-local augmente. De plus, lorsque le domaine non-local est de petite dimension ( $\approx 2r_c$ ) l’erreur estimée et l’erreur vraie restent inférieures à 1%. Dans le cas de l’approximation QC classique, les résultats sont moins probants.



**FIGURE 2.21** – Champs de déplacement référence calculés avec un modèle entièrement non-local (2D)

En effet, même si l'erreur se réduit lorsque la taille du domaine non-local augmente, plusieurs contradictions apparaissent. Ainsi, lorsque la largeur du domaine non-local est de 16 particules, l'erreur estimée est de l'ordre de 1% alors que l'erreur vraie est de 4 %. Au contraire, lorsque la taille du domaine non-local est de 14 particules, l'erreur estimée est de l'ordre de 4% alors que l'erreur vraie est inférieure à 1%. Là encore, la présence des “forces fantômes” pollue l'évaluation de l'erreur fournie par l'estimateur.



**FIGURE 2.22** – Évolution de l'erreur locale en fonction de la taille du domaine non-local (2D).

## Bilan

Il a été mis en évidence en 1D et 2D que l'estimateur d'erreur locale associé à l'approximation QC classique ne permet pas d'obtenir des résultats fiables sur l'évaluation



d'une quantité d'intérêt locale. De plus, dans certains cas (voir FIG.2.20b), augmenter la taille du domaine non-local ne permet pas de réduire l'erreur commise sur la quantité d'intérêt. L'inconsistance du schéma, qui se traduit par des "forces fantômes" au niveau des interfaces, a un impact néfaste sur la précision de l'ensemble du modèle.

Les approximations NL2L et NL2L-loc ont confirmé leur capacité à définir une transition consistante entre les domaines local et non-local. L'erreur vraie sur la quantité d'intérêt locale reste faible par rapport à celle observée avec l'approximation QC classique, elle présente également de bonnes propriétés de convergence.

Finalement, il a été mis en avant que l'utilisation d'estimateur d'erreur donne une indication fiable et du même ordre de grandeur que l'erreur vraie dans le cas des approximations NL2L et NL2L-loc. Cela en fait un outil pertinent pour évaluer la précision du modèle approché sans pour autant connaître la solution du modèle de référence.

## 4 Étude comparative en dynamique transitoire

L'importance de la condition (2.17) sur la précision a été montrée par des simulations numériques en statique. Ces différentes approximations sont maintenant employées sur des cas dynamiques afin d'observer la transition d'ondes par les interfaces locales/non-locales.

Une chaîne de 300 particules, dont 60 sont des particules non-locales de  $\mathcal{J}_q \cup \mathcal{J}_{q,nl} \cup \mathcal{J}_e$ , définit la géométrie du modèle. Les paramètres matériaux sont identiques à ceux définis précédemment, la masse  $m$  de chaque particule est également prise en compte en posant  $m = 10$ . L'équation du mouvement de chaque particule s'écrit :

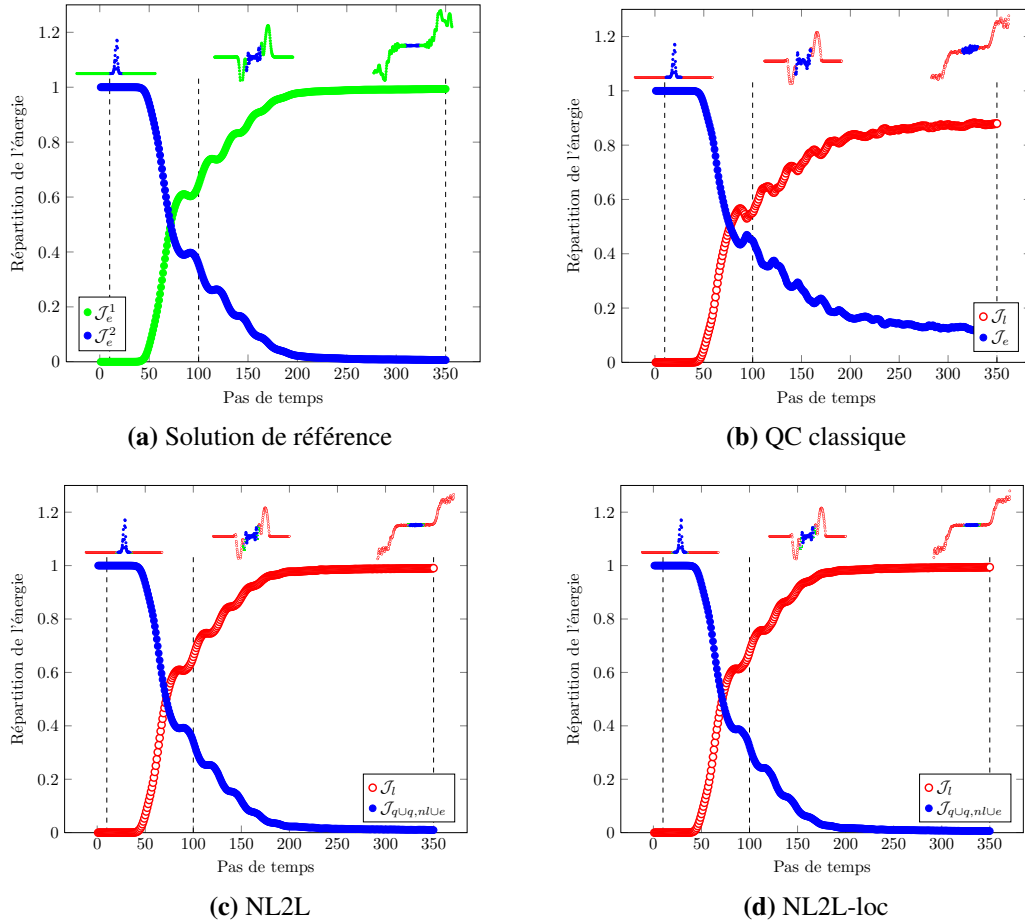
$$m \frac{d^2 \mathbf{x}_i(t)}{dt^2} + \frac{\partial E^{QC}}{\partial \mathbf{x}_i}(\{\mathbf{x}_j\}) = \mathbf{f}_i^{ext}, \quad \forall i \in [1, N] \quad (2.44)$$

avec  $\mathbf{f}_i^{ext}$  l'effort extérieur appliqué à la particule  $i$ . La discrétisation temporelle qui s'ajoute définit un pas de temps  $\Delta t = 0,1$  et utilise le schéma explicite de Newmark ( $\beta = 0, \gamma = 0,5$ ).

Dans le cadre de la dynamique transitoire, le comportement des interfaces locales/non-locales est étudié dans les deux sens de transition : une onde issue du domaine non-local qui se propage vers le domaine local et vice-versa. Ces deux types de transition sont décrits séparément dans les deux sections suivantes.

#### 4.1 Transmission d'ondes du domaine non-local vers le domaine local

Un déplacement initial est imposé au centre de la chaîne afin de générer deux ondes qui vont se propager vers chacun des bords du modèle. Pour comparer les différentes approximations, une solution de référence où toutes les particules sont non-locales ( $\mathcal{J} = \mathcal{J}_e$ ) est utilisée. Bien qu'il n'y ait que des particules non-locales dans la solution de référence,  $\mathcal{J}_e^1$  et  $\mathcal{J}_e^2$  représentent l'ensemble des particules qui seront respectivement locales et non-locales avec l'une des approximations (QC classique, NL2L ou NL2L-loc). La répartition de l'énergie totale entre ces deux domaines est tracée au cours du temps sur la FIG.2.23a.

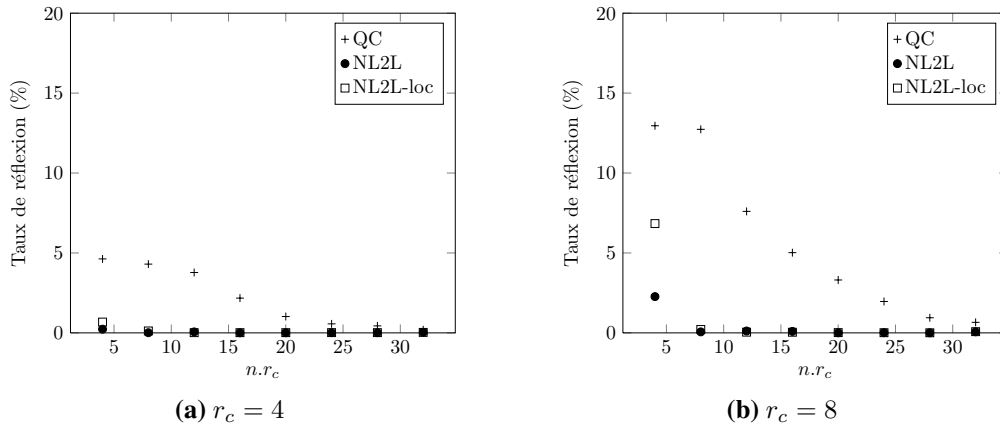


**FIGURE 2.23** – Répartition de l'énergie dans le temps lors de la transition d'une onde du domaine non-local vers le domaine local ( $r_c = 8$ )

La répartition de l'énergie dans le temps est tracée aussi bien pour la solution de référence que pour les approximations QC classique, NL2L et NL2L-loc sur la FIG.2.23.

Initialement, toute l'énergie se trouve dans le domaine non-local puisque la sollicitation est créée dans cette zone. Par la suite, cette énergie se propage vers le domaine local. Cependant, la FIG.2.23b met en avant qu'une part importante de l'énergie (environ 20%) demeure dans la zone non-locale dans le cas de l'approximation QC classique. L'onde a été partiellement réfléchiée par l'interface et une partie de l'énergie n'a pas pu se propager vers le domaine local. Au contraire, dans le cas de l'approximation NL2L ou NL2L-loc, toute l'énergie a été transmise au domaine local (voir FIG.2.23c et 2.23d), ce qui témoigne bien de l'absence de réflexion aux interfaces.

La même démarche est utilisée pour différents rayons de coupure  $r_c$  du modèle et pour différentes longueurs d'onde  $\lambda = nr_c$  du signal initié dans le domaine non-local. La FIG.2.24 indique la part de l'énergie initiale qui a été réfléchiée par les interfaces locale/non-locale. Il apparaît que les approximations NL2L et NL2L-loc ne génèrent aucune réflexion tant que la valeur de  $\lambda$  dépasse celle de  $r_c$ . Au contraire, l'approximation QC entraîne systématiquement des réflexions bien que le phénomène se réduise lorsque  $\lambda$  augmente sans pour autant tendre vers 0.

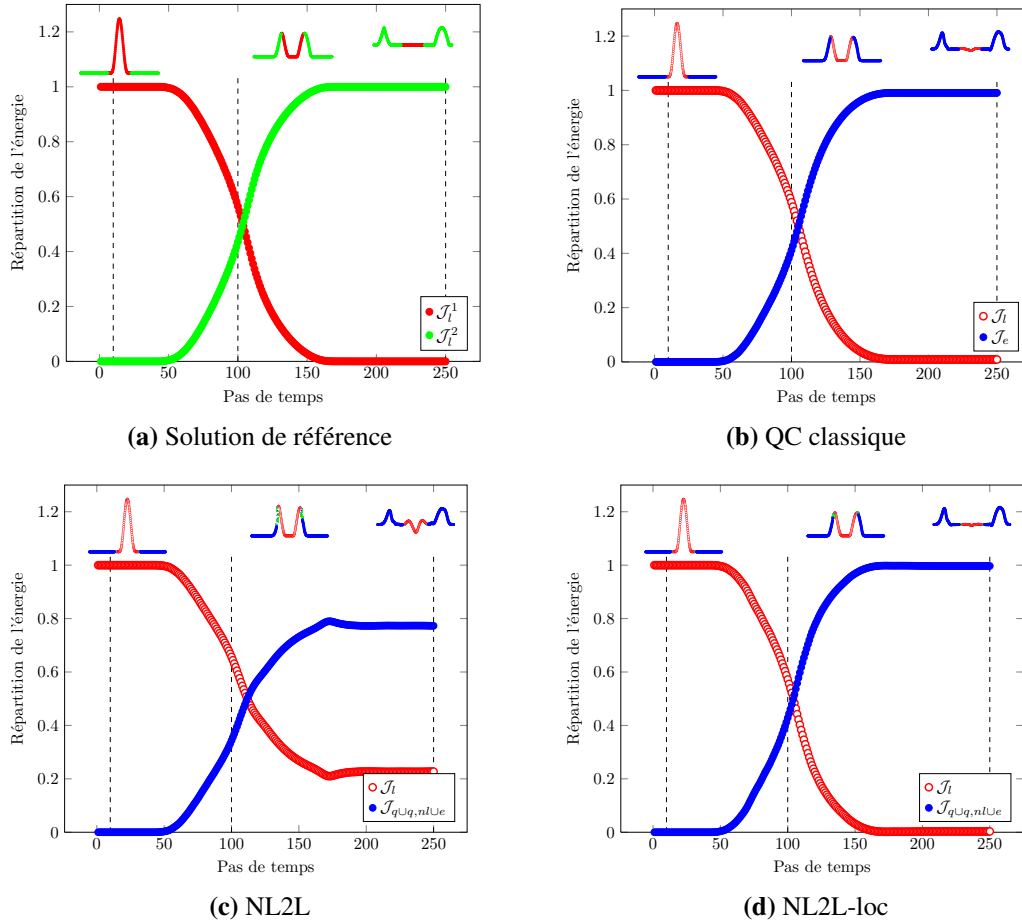


**FIGURE 2.24** – Part de l'énergie réfléchiée en fonction de la longueur d'onde initiale lors de la transition d'une onde du domaine non-local vers le domaine local

## 4.2 Transmission d'ondes du domaine local vers le domaine non-local

La démarche précédente est reproduite en intervertissant les positions des domaines afin d'étudier la propagation d'une onde issue du domaine local vers le domaine non-local. De prime abord, ce point paraît secondaire puisque le modèle est développé de façon à ce que les phénomènes transitoires se produisent dans le domaine non-local. Néanmoins, de par les conditions limites et les chargements appliqués au domaine local, il est également possible que des phénomènes transitoires passent du domaine local au domaine non-local.

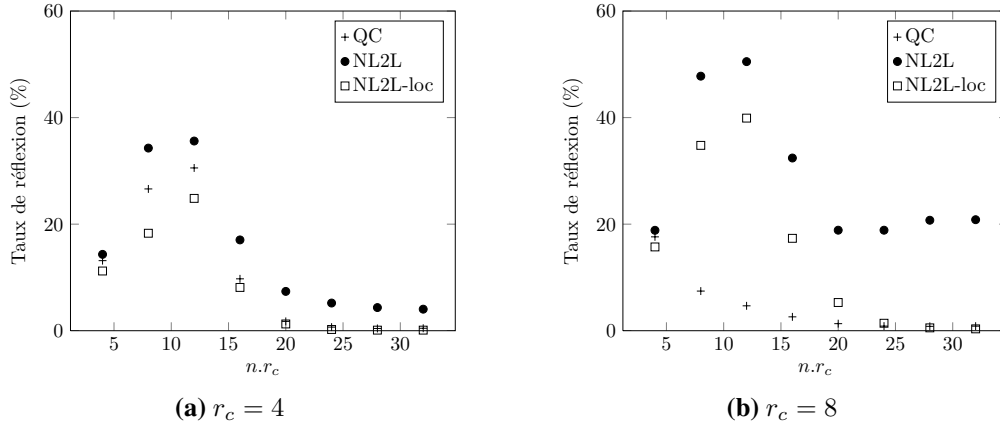
Les approximations NL2L, NL2L-loc et QC classique sont comparées à une solution de référence qui correspond à un calcul où toutes les particules sont définies par l'approximation locale. La FIG.2.25 illustre l'évolution de la répartition de l'énergie entre les domaines locaux et non-locaux pour les différentes approximations. Les approximations NL2L-loc et QC classique donnent des résultats très similaires au calcul de référence tandis que l'approximation NL2L fait apparaître un taux de réflexion de l'ordre de 20% de l'énergie initiale.



**FIGURE 2.25** – Répartition de l'énergie dans le temps lors de la transition d'une onde du domaine local vers le domaine non-local ( $r_c = 8$ )

Comme précédemment, la longueur d'onde  $\lambda$  du signal initial défini par  $\lambda = nr_c$  varie. L'évolution du taux de réflexion en fonction de  $\lambda$  est alors tracée sur la FIG.2.26. Il est important de noter que l'approximation NL2L ne peut simuler le transfert d'une onde issue du domaine local sans générer un taux de réflexion inférieur à 20% dans le cas  $r_c = 8r_0$  et 8% dans le cas  $r_c = 4r_0$ . L'approximation QC classique présente des résultats intéressants en terme de réduction des réflexions aux interfaces locales/non-locales, mais

ne tend jamais vers 0. Finalement, seule l'approximation NL2L-loc présente un taux de réflexion qui tend vers 0 dès que  $\lambda \geq 3r_c$ .



**FIGURE 2.26** – Part de l'énergie réfléchiée en fonction de la longueur d'onde initiale lors de la transition d'une onde du domaine local vers le domaine non-local

Remarque : le calcul de référence a ici été déterminé avec un modèle entièrement local, il aurait été également possible de prendre un modèle de référence entièrement non-local (ce qui aurait donné des résultats similaires). Cependant, par souci de cohérence, du fait que les ondes sont initiées dans le domaine local pour les approximations NL2L, NL2L-loc et QC classique, le choix d'un modèle de référence entièrement local a été fait.

## 5 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, un nouveau cadre permettant de traiter la transition d'un milieu discret au comportement non-local vers un comportement plus "local" a été développé. Cette démarche qui se veut générique ne repose finalement que sur la géométrie du modèle, elle permet de définir des approximations de types QC géométriquement consistantes. Les problèmes liés à ce type d'approximation comme les "forces fantômes" qui surgissent habituellement aux interfaces locales/non-locales disparaissent. La démarche a montré sur des cas statiques que la précision de deux approximations particulières, à savoir les approximations NL2L et la NL2L-loc, était équivalente à celle du modèle de référence. L'approximation NL2L est similaire à celle développée dans [Shapeev, 2011] bien que construite à partir de considérations différentes.

Par la suite, les simulations de cas dynamiques utilisant les approximations précédentes ont pu mettre en exergue les difficultés inhérentes au passage d'ondes du non-local vers le local, mais également du local au non-local. L'approximation NL2L-loc présente alors les meilleurs résultats en terme de réduction des réflexions d'onde dans les deux sens de transmission. Le seul cas de figure pouvant être problématique est la transmission

d'ondes du domaine local vers le domaine non-local pour des signaux, dont la longueur d'onde initiale  $\lambda$  est inférieure à  $3r_c$ .

Cependant l'objectif final de ses travaux est de remplacer le modèle discret au comportement local par un modèle continu local. C'est cette étape qui permet des gains substantiels en terme de coûts de calcul par la réduction du nombre de degrés de liberté du modèle. La discrétisation associée au modèle continu est alors beaucoup plus grossière que celle du modèle discret local (facteur 20 à 100, voire 1000). Le modèle se retrouve partitionné en deux domaines ; le domaine macro associé au modèle continu et le domaine micro associé au modèle discret non-local.

L'introduction de cette échelle macro dans le problème peut être également source de phénomènes parasites. En effet, les ondes hautes fréquences (c.-à-d. de petite longueur d'onde) issues du domaine micro n'ont pas de sens dans le domaine macro. De plus, l'espace d'approximation associé au domaine macro rend impossible la représentation de telles ondes. Finalement, de nouvelles réflexions parasites risquent de surgir aux interfaces micro/macro indépendamment de l'approximation QC utilisée. Il est donc nécessaire de développer une démarche permettant de filtrer ces phénomènes hautes fréquences pour ne pas polluer la simulation. Ce point est développé dans le chapitre suivant.



## Chapitre 3

# Incompatibilités aux interfaces entre représentations à l'échelle micro et macro

*Dans ce troisième chapitre, les incompatibilités résultant du couplage d'un modèle macro avec un modèle micro sont traitées. Les quantités susceptibles d'être échangées aux interfaces micro/macro sont séparées de celles qui n'ont de sens que dans le modèle micro d'origine. Une nouvelle méthode, basée sur la technique *Perfectly Matched Layer*, est ensuite introduite afin de dissiper les quantités non pertinentes du modèle multi-échelle obtenu.*

### Sommaire

---

|          |                                                              |           |
|----------|--------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Introduction . . . . .</b>                                | <b>73</b> |
| 1.1      | Sources d'incompatibilité micro/macro . . . . .              | 73        |
| 1.2      | Définition du problème . . . . .                             | 76        |
| 1.3      | Calculs de référence . . . . .                               | 79        |
| <b>2</b> | <b>La <i>Perfectly Matched Layer</i> sélective . . . . .</b> | <b>80</b> |
| 2.1      | Objectif . . . . .                                           | 80        |
| 2.2      | Séparation des champs micro/macro . . . . .                  | 80        |
| 2.3      | Dissipation des champs micro . . . . .                       | 82        |



|          |                                                                                             |            |
|----------|---------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 2.4      | Analyse de stabilité . . . . .                                                              | 84         |
| 2.5      | Efficacité de l'effet dissipatif sur les phénomènes micro . . . . .                         | 85         |
| <b>3</b> | <b>Discussion autour de la définition du projecteur <math>\mathbf{P}_m</math> . . . . .</b> | <b>86</b>  |
| 3.1      | Projecteur issu de la base modale . . . . .                                                 | 87         |
| 3.2      | Projecteur issu de la discrétisation macro . . . . .                                        | 88         |
| 3.3      | Projecteur rigide : modes de corps rigide . . . . .                                         | 92         |
| <b>4</b> | <b>Applications en dynamique transitoire . . . . .</b>                                      | <b>93</b>  |
| 4.1      | Mise en place de la démarche d'analyse . . . . .                                            | 93         |
| 4.2      | Étude comparative des projecteurs $\mathbf{P}_m$ . . . . .                                  | 96         |
| 4.3      | Confrontation à d'autres méthodes . . . . .                                                 | 98         |
| <b>5</b> | <b>Bilan du chapitre . . . . .</b>                                                          | <b>100</b> |

---

# 1 Introduction

## 1.1 Sources d'incompatibilité micro/macro

L'objectif de ce chapitre est de définir un couplage pertinent entre un modèle particulaire (i.e. modèle discret) et un modèle continu en dynamique transitoire. Ces deux modèles reposent sur des hypothèses de modélisation différentes, notamment des longueurs caractéristiques différentes. Le comportement du modèle particulaire est plus riche et permet de simuler des phénomènes physiques non représentables par un modèle continu. De plus, l'utilisation du modèle continu implique généralement d'ajouter une discrétisation spatiale du domaine contraignant d'autant l'échelle des phénomènes représentables lors des simulations numériques.

Néanmoins, les phénomènes transitoires (ondes de compression par exemple) ne restent pas dans une zone confinée. Elles peuvent être amenées à passer d'un modèle à l'autre suivant leurs évolutions. Il convient alors de distinguer deux types de phénomènes :

- les phénomènes micro qui ont du sens uniquement dans le modèle fin, ici le modèle particulaire ;
- les phénomènes macro qui peuvent s'exprimer dans chacun des deux modèles fin et grossier, ici les modèles particulaire et continu.

Il est donc nécessaire de prévoir un filtre permettant d'une part de dissocier les échelles micro et macro, puis de dissiper les phénomènes micro avant que ceux-ci ne viennent perturber la simulation, sans pour autant affecter les phénomènes macro. Dans le but de se donner un critère de séparation entre les phénomènes micro et macro, les relations de dispersion des deux modèles sont étudiées ci-après dans un cas 1D.

### Modèle particulaire

Soit une chaîne de  $N$  particules de masse  $m$  qui forment un réseau régulier de pas  $r_0$ . Les particules ne peuvent se déplacer que suivant la direction longitudinale  $e_x$  et ne génèrent que des ondes de compression. L'équation du mouvement (2.44) qui s'applique à chaque particule  $i$  permet de définir l'évolution du système. L'énergie intérieure  $E^{QC}(\{x_j\})$  est définie à partir de potentiels de paire quadratiques. L'énergie d'interaction entre deux particules  $i$  et  $j$  s'écrit donc :

$$\phi_{ij}^e(r_i(j)) = \frac{1}{2}k(r_i(j) - R_i(j))^2 \quad \text{ou} \quad \phi_{ij}^e(r_i(j)) = \frac{1}{2}k(u_j - u_i)^2 \quad (3.1)$$

avec  $k$  la raideur du potentiel quadratique. Le modèle particulaire considéré est un modèle local de telle sorte que le rayon d'interaction  $r_c$  n'inclut que les premiers voisins de chaque particule ( $r_0 < r_c < 2r_0$ ). L'équation (2.44) devient alors :

$$m\ddot{u}_i = k(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i) \quad (3.2)$$

où  $u_i$  est le déplacement associé à la particule  $i$ . En supposant une onde longitudinale générant un déplacement pour toute particule  $i$  de la forme  $u_i = Ae^{-i\frac{2\pi X_i}{\lambda}} e^{i\omega t}$ , l'équation (3.2) permet de faire apparaître la relation de dispersion associée au modèle discret :

$$\omega^2 = \frac{4k}{m} \sin^2 \left( \frac{\pi r_0}{\lambda} \right) \quad (3.3)$$

où  $\omega$  et  $\lambda$  définissent respectivement la pulsation et la longueur d'onde de l'onde longitudinale.

### Modèle continu

Le modèle continu 1D est établi par homogénéisation (en énergie) du modèle discret précédent. Il s'agit d'un modèle élastique isotrope dont le déplacement local  $u$  obéit à l'équation du mouvement suivante :

$$\rho \ddot{u} = E \frac{\partial^2 u}{\partial X^2} \quad (3.4)$$

avec  $\rho$  la masse volumique et  $E$  le module d'Young. Il occupe un domaine de longueur  $L = Nr_0$  et de section  $S$ . Les propriétés matériaux du modèle continu équivalent s'obtiennent à partir de celles du modèle discret, telles que :

$$\rho = \frac{m}{Sr_0} \quad \text{et} \quad E = \frac{kr_0}{S} \quad (3.5)$$

Pour un champ de déplacement de la forme  $u = Ae^{-i\frac{2\pi X}{\lambda}} e^{i\omega t}$ , l'équation (3.4) permet de trouver la relation de dispersion du modèle continu :

$$\omega^2 = \frac{E}{\rho} \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \quad (3.6)$$

### Étude comparative de dispersion

Les deux relations de dispersion (3.3) et (3.6) peuvent être écrites en utilisant les mêmes grandeurs de part les relations (3.5). On a alors pour le modèle particulaire :

$$\omega = \sqrt{\frac{4k}{m}} \sin \left( \frac{\pi r_0}{\lambda} \right) \quad \leftrightarrow \quad \omega = \frac{2}{r_0} \sqrt{\frac{E}{\rho}} \sin \left( \frac{\pi r_0}{\lambda} \right) \quad (3.7)$$

et le modèle continu :

$$\omega = \sqrt{\frac{E}{\rho}} \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right) \quad \leftrightarrow \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \left( \frac{2\pi r_0}{\lambda} \right) \quad (3.8)$$

Les relations associées (3.7) et (3.8) sont représentées FIG.3.1. Il est possible d'identifier deux pulsations particulières notées  $\omega_m$  et  $\omega_c$ . La pulsation  $\omega_m$  correspond à

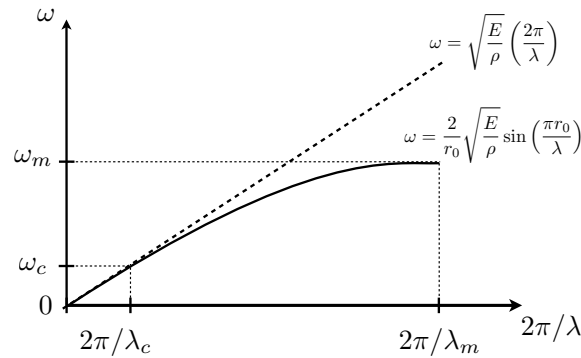
la plus grande pulsation représentable par le modèle particulaire. Cette limite correspond au cas particulier où  $\sin\left(\frac{\pi r_0}{\lambda}\right) = 1$ , ce qui donne :

$$\lambda_m = 2r_0 \quad \text{et} \quad \omega_m = \frac{2}{r_0} \sqrt{\frac{E}{\rho}} \quad (3.9)$$

Le modèle continu équivalent est capable d'aller au-delà de cette limite, mais aucune réalité physique ne correspond à de tels phénomènes puisqu'ils sont inexistant dans le modèle de référence i.e. le modèle particulaire. Il faut également remarquer que le modèle continu doit lui aussi être discrétisé en espace afin de satisfaire aux exigences de la simulation numérique. Cette discrétisation entraîne alors à son tour l'apparition d'une nouvelle pulsation de coupure notée  $\omega_M$  [Bonnet et Frangi, 2007] tel que :

$$\omega_M = \sqrt{\frac{12E}{\rho h^2}} \quad (3.10)$$

avec  $h$  le pas du maillage.



**FIGURE 3.1** – Relations de dispersion du modèle discret et du modèle continu équivalent

Pour  $\omega < \omega_m$ , il est possible d'identifier deux zones délimitées par  $\omega_c$ . De 0 à  $\omega_c$ , les courbes de dispersion des modèles particulaire et continu se superposent. En effet,  $\frac{\pi r_0}{\lambda} \ll 1$  ce qui permet d'obtenir une relation approchée de (3.3) :

$$\omega^2 \approx \frac{E}{\rho} \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \quad (3.11)$$

La nouvelle relation (3.11) est équivalente à la relation de dispersion du modèle continu (3.8). Néanmoins, le couple de paramètres  $(\omega_c, \lambda_c)$  ne peut être défini que qualitativement. On se donne  $\frac{\pi}{10}$  comme valeur limite vérifiant  $\frac{\pi}{10} \ll 1$ . Ainsi l'erreur d'approximation sur le sinus est inférieure à 2%. On a alors :

$$\frac{\pi r_0}{\lambda_c} = \frac{\pi}{10} \quad (3.12)$$

On en déduit alors le couple limite  $(\lambda_c, \omega_c)$  s'écrit :

$$\lambda_c = 10r_0 \quad \text{et} \quad \omega_c = \frac{2\pi}{10r_0} \sqrt{\frac{E}{\rho}} \quad (3.13)$$

En dessous de cette limite, il est donc légitime de permettre le passage des ondes du domaine particulaire au domaine continu. Au-delà de cette limite, les relations de dispersion se séparent traduisant alors des comportements différents dans chacun des modèles. Dans ce cas de figure, il n'est pas souhaitable de permettre le passage de ces ondes d'un domaine à l'autre.

Il est donc possible d'identifier les phénomènes macro représentables par les deux modèles au travers des relations de dispersion. Les autres phénomènes sont alors considérés comme des phénomènes micro uniquement représentables dans le modèle micro. Il est maintenant nécessaire d'introduire un effet dissipatif dans le modèle particulaire afin d'éliminer ces phénomènes micro. Cependant il faut limiter cet effet aux zones proches des interfaces micro/macro, de façon à perturber le moins possible le comportement du modèle particulaire dans les zones d'intérêt.

Remarque : en pratique, la pulsation de coupure  $\omega_M = \sqrt{\frac{12E}{\rho h^2}}$  associée à la discrétisation d'un modèle continu est inférieure à  $\omega_c = \sqrt{\frac{4E}{\rho r_0^2}}$  car  $h \gg r_0$ . Donc, en plus des phénomènes micro de pulsation  $\omega$  supérieure à  $\omega_c$ , il est également nécessaire de dissiper les ondes dont la pulsation  $\omega$  vérifie  $\omega_M < \omega < \omega_c$  qui ne sont pas non plus représentables par le modèle continu discrétisé.

## 1.2 Définition du problème

Dans cette section, on souhaite illustrer les phénomènes de réflexion dus au couplage d'un modèle particulaire avec un modèle continu discrétisé. Pour cela, on considère un matériau occupant un domaine  $\Omega$  de dimension  $d$  ( $d = 1, 2$  ou  $3$ ). Ce domaine est ensuite séparé en deux sous-domaines  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$  tels que  $\Omega_1 \cap \Omega_2 = \emptyset$ . L'objectif de cette division est de réduire les coûts de calcul de la simulation tout en conservant une précision raisonnable. L'usage du modèle fin et coûteux est alors réservé aux zones d'intérêt proches de défauts (fissures, dislocations...) ou de sollicitations extrêmes (impacts, coins...).

Le problème d'incompatibilité micro/macro n'est pas seulement lié à la nature des modèles, mais dépend également de l'espace d'approximation utilisé pour discrétiser le modèle continu. Afin de simplifier la démarche sans perte de généralité, un unique modèle continu est employé. Soit  $u$  le déplacement local tel que :

$$u = x - X \quad (3.14)$$

où  $X$  et  $x$  définissent les champs de positions initiale et courante. La conservation de la quantité de mouvement permet de lier le champ de déplacement au champ de contrainte  $\sigma$  par la relation suivante :

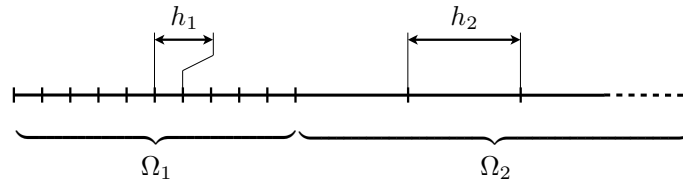
$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial X} \cdot \sigma \quad \text{dans } \Omega \quad (3.15)$$

Le comportement est supposé élastique et linéaire, il permet de relier les quantités  $\sigma$  et  $u$  :

$$\sigma = \mathcal{K} : \frac{\partial u}{\partial X} \quad (3.16)$$

avec  $\mathcal{K}$  un tenseur d'ordre 4 fonction des paramètres matériaux,  $E$  le module d'Young et  $\nu$  le coefficient de Poisson.

D'un point de vue théorique les modèles de chaque sous-domaine sont compatibles puisqu'identiques. C'est par le choix des espaces d'approximation de chacun des sous-domaines que nous introduisons une incompatibilité de type micro/macro (voir FIG.3.2). Le sous-domaine maillé finement en  $N_1$  éléments de paramètre de maille  $h_1$  devient donc le domaine micro  $\Omega_1$ , il est associé à l'espace d'approximation  $\mathcal{V}^{h_1}(\Omega_1)$ . Le sous-domaine maillé grossièrement en  $N_2$  éléments de paramètre de maille  $h_2 > h_1$  devient le domaine macro  $\Omega_2$ , il est associé à l'espace d'approximation  $\mathcal{V}^{h_2}(\Omega_2)$ .



**FIGURE 3.2** – Modèle 1D avec sous-domaines micro et macro

Le problème discrétisé se met sous la forme :

$$\begin{cases} \mathbf{M}^1 \ddot{\mathbf{u}}^1(t) + \mathbf{K}^1 \mathbf{u}^1(t) = -\mathbf{C}^{1^T} \boldsymbol{\mu}(t) \\ \mathbf{M}^2 \ddot{\mathbf{u}}^2(t) + \mathbf{K}^2 \mathbf{u}^2(t) = -\mathbf{C}^{2^T} \boldsymbol{\mu}(t) \\ \mathbf{C}^1 \dot{\mathbf{u}}^1(t) + \mathbf{C}^2 \dot{\mathbf{u}}^2(t) = \mathbf{0} \end{cases} \quad (3.17)$$

où  $\mathbf{M}^i$  et  $\mathbf{K}^i$  sont respectivement les matrices de masse et de raideur. Les vecteurs d'accéléérations, de vitesses et de positions nodaux pour chaque sous-domaine  $\Omega_i$  sont notés respectivement  $\ddot{\mathbf{u}}^i(t)$ ,  $\dot{\mathbf{u}}^i(t)$  et  $\mathbf{u}^i(t)$ . Un raccord en vitesse à l'interface permet de lier les deux sous-domaines  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$ , il est réalisé au moyen des matrices de raccord  $\mathbf{C}^i$  et le vecteur multiplicateur de Lagrange  $\boldsymbol{\mu}(t)$  défini sur l'interface  $\partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2$ . Les matrices  $\mathbf{C}^i$  sont signées et permettent d'extraire les quantités d'interface associés à chaque sous-domaine  $\Omega_i$  dans le but d'imposer la continuité des vitesses.

Il est possible de définir un problème aux valeurs propres généralisé pour chaque sous-domaine  $\Omega_i$  :

$$\mathbf{K}^i \boldsymbol{\phi} - \omega^2 \mathbf{M}^i \boldsymbol{\phi} = \mathbf{0}, \quad \forall i \in \{1, 2\} \quad (3.18)$$

Les pulsations de coupure  $\omega_{c_i}$  associées à (3.18), se déduisent de :

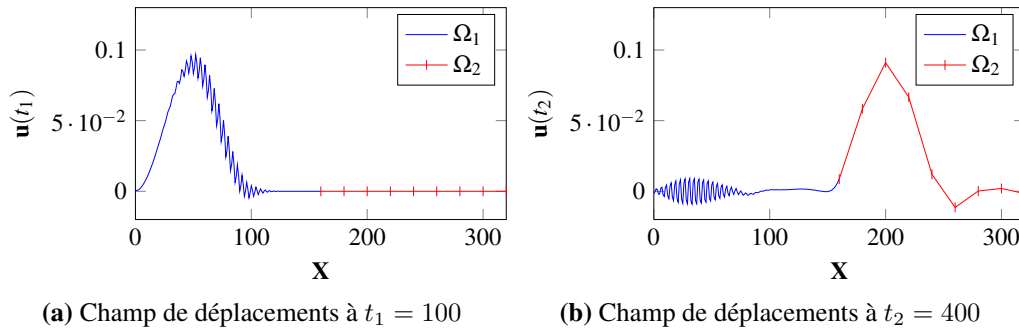
$$\omega_{c_i} = \sup_{\omega} \left( \arg \left( \min_{\omega} |\det(\mathbf{K}^i - \omega^2 \mathbf{M}^i)| \right) \right), \quad \forall i \in \{1, 2\} \quad (3.19)$$

Elles sont liées aux paramètres de discrétisation  $h_i$ . Comme  $h_1 < h_2$  alors  $\omega_{c_1} > \omega_{c_2}$ , l'espace d'approximation  $\mathcal{V}^{h_1}(\Omega_1)$  peut représenter une plus grande gamme de signaux que  $\mathcal{V}^{h_2}(\Omega_2)$ . Les ondes issues de  $\Omega_1$  dont la pulsation est supérieure à  $\omega_{c_2}$  ne pourront donc pas être représentées dans le domaine  $\Omega_2$ .

Pour illustrer ce phénomène, on définit un cas critique 1D d'une onde incidente issue du domaine micro  $\Omega_1$ , mixant hautes et basses fréquences :

$$u(\mathbf{X}) = A \left( \cos \left( \frac{2\pi \mathbf{X}}{5h_2} \right) + 1 \right) \cos \left( \frac{2\pi \mathbf{X}}{2h_1} \right) \quad (3.20)$$

L'onde avant son passage par l'interface est représentée FIG.3.3a. L'onde après son passage par l'interface est ensuite représentée FIG.3.3b. Le rapport entre  $h_1$  et  $h_2$  est de 20, on observe bien sur la FIG.3.3 comment la partie basse fréquence s'est correctement propagée dans le domaine macro  $\Omega_2$  tandis que la partie haute fréquence a été entièrement réfléchiée à l'interface micro/macro.



**FIGURE 3.3** – Illustration des phénomènes de réflexion d'ondes hautes fréquences à l'interface micro/macro

Ces réflexions n'ont aucune réalité physique et ne sont qu'un artéfact dû à l'utilisation d'espaces d'approximation différents. Si la discrétisation avait été parfaitement homogène, aucune réflexion ne se serait produite. Pourtant, ces réflexions ont un impact très concret dans la simulation puisqu'une partie de l'énergie issue de  $\Omega_1$  qui aurait dû être transmise à  $\Omega_2$  se retrouve piégée dans  $\Omega_1$ . La simulation est alors polluée par ces phénomènes d'autant plus gênants qu'ils touchent le sous-domaine utilisant le modèle fin

à savoir la zone d'intérêt du problème.

Puisqu'il n'est pas souhaitable de modifier le paramètre de discrétisation du sous-domaine  $\Omega_2$ , il est nécessaire d'utiliser une méthode permettant de dissiper l'énergie de ces ondes hautes fréquences, sources de réflexions, et ainsi éviter de polluer la simulation.

### 1.3 Calculs de référence

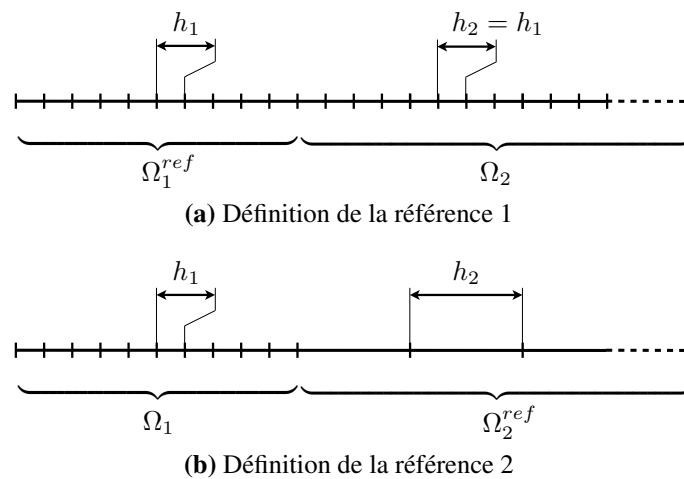
Il y a donc deux objectifs à distinguer, il faut :

- minimiser les réflexions aux interfaces micro/macro dues aux ondes hautes fréquences (i.e. les ondes micro) de  $\Omega_1$  et non représentables dans  $\Omega_2$  ;
- maximiser la transmission des autres ondes (i.e. les ondes macro) de  $\Omega_1$  vers  $\Omega_2$  ou de  $\Omega_2$  vers  $\Omega_1$ .

Il est donc important de définir les références qui vont permettre d'évaluer le respect de chaque objectif. Deux calculs de référence sont nécessaires :

- le premier calcul utilise un seul domaine  $\Omega$  avec un paramètre de discrétisation unique  $h_1$  (voir FIG.3.4a), il permet de définir la référence du sous-domaine  $\Omega_1$  ;
- le second calcul utilise le modèle à deux sous-domaines précédent (voir FIG.3.4b), il permet de définir la référence du sous-domaine  $\Omega_2$  en déterminant la part de l'énergie issue du domaine  $\Omega_1$  qui doit se transmettre au domaine  $\Omega_2$ .

Ces calculs de référence sont valables tant que les ondes effectuent un unique passage du sous-domaine macro au sous-domaine micro ou vice-versa. En effet ces calculs de référence ne permettent pas d'évaluer le gain sur des simulations engageant de multiples aller-retour de signaux entre les deux sous-domaines (sauf, éventuellement, s'il s'agit d'ondes purement macro).



**FIGURE 3.4** – Définition des modèles permettant de définir les calculs de référence pour les sous-domaines  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$



## 2 La *Perfectly Matched Layer* sélective

### 2.1 Objectif

Dans le Chapitre 1, plusieurs méthodes permettant de dissiper l'énergie dans le cadre de problèmes élastodynamiques ont été décrites. La démarche développée dans ce chapitre se propose de créer une zone filtrante et sélective en réadaptant les ingrédients de la *Perfectly Matched Layer* (PML) [Berenger, 1994].

La PML définit habituellement une condition de frontière absorbante et permet de simuler un milieu infini en dissipant toutes les ondes qui l'atteignent. Il convient donc de définir une nouvelle forme de PML qui ne soit absorbante que pour la gamme d'ondes susceptibles de se réfléchir à l'interface micro/macro et de permettre aux autres gammes d'ondes de se propager du domaine micro vers le domaine macro et vice-versa. Cette PML sélective est alors placée sur  $\Omega_{filtre}$ , un sous-domaine de  $\Omega_1$  en amont de l'interface micro/macro comme illustré sur la FIG.3.5. De cette façon, seules les ondes micro se dirigeant vers l'interface sont dissipées tandis que celles présentes dans  $\Omega_1 \setminus \Omega_{filtre}$  ne sont pas affectées. Ainsi la PML sélective n'affecte qu'une zone réduite du domaine micro  $\Omega_1$  et permet de conserver le comportement de référence dans le reste du modèle.

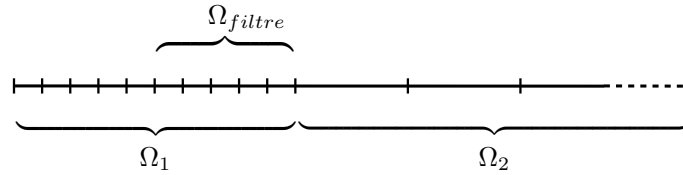


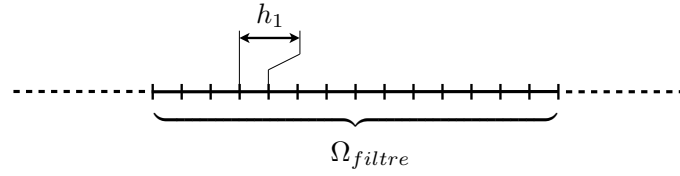
FIGURE 3.5 – Définition de  $\Omega_{filtre}$  dans le modèle 1D

### 2.2 Séparation des champs micro/macro

Le principal enjeu est donc de rendre la PML sélective de telle sorte qu'elle n'absorbe que les ondes micro dans  $\Omega_{filtre}$ . Dans un premier temps, le sous-domaine  $\Omega_{filtre}$  est considéré de façon isolée en occultant la présence de  $\Omega_2$  et  $\Omega_1 \setminus \Omega_{filtre}$ . L'équation du mouvement de  $\Omega_{filtre}$ , une fois discrétisée en  $N_{filtre}$  éléments de paramètre  $h_1$  (voir FIG.3.6), s'écrit :

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{u}(t) = \mathbf{0} \quad (3.21)$$

avec  $\mathbf{M}$  et  $\mathbf{K}$  les matrices de masse et de raideur du sous-domaine  $\Omega_{filtre}$ .

FIGURE 3.6 – Discrétisation associée à  $\Omega_{filtre}$ .

**Définition :** Soit  $\mathbf{P}_m$  un projecteur définissant une partition micro/macro d'un champ  $\mathbf{u}(t)$ , on note alors :

$$\mathbf{u}(t) = \mathbf{u}_M(t) + \mathbf{u}_m(t) \quad \text{tel que} \quad \begin{cases} \mathbf{u}_M(t) = (\mathbf{1} - \mathbf{P}_m) \mathbf{u}(t) = \mathbf{Q}_M \mathbf{u}(t) \\ \mathbf{u}_m(t) = \mathbf{P}_m \mathbf{u}(t) \end{cases} \quad (3.22)$$

où  $\mathbf{u}_M(t)$  et  $\mathbf{u}_m(t)$  sont respectivement les champs macro et micro.

Pour définir la partition des champs micro/macro (3.22), il est possible d'utiliser la base modale de (3.21). Soit  $\{\phi_j\}_{j=1, \dots, N_{filtre}+1}$  la base modale construite à partir des vecteurs propres du problème aux valeurs propres généralisées. Les différentes propriétés de cette base modale sont :

$$\phi_j^T \mathbf{M} \phi_k = \begin{cases} 1 & \text{si } k = j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad \text{et} \quad \phi_j^T \mathbf{K} \phi_k = \begin{cases} \omega_j^2 & \text{si } k = j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.23)$$

avec  $\phi_j \in \mathbb{R}^{(N_{filtre}+1)}$ . Les modes sont classés par ordre croissant, tels que :

$$k < j \Rightarrow \omega_k^2 \leq \omega_j^2 \quad \forall (k, j) \in ([1; N_{filtre} + 1])^2 \quad (3.24)$$

Le champ de déplacement  $\mathbf{u}(t)$  exprimé dans cette base s'écrit :

$$\mathbf{u}(t) = \sum_{j=1}^{N_{filtre}+1} \alpha_j(t) \phi_j \quad (3.25)$$

avec  $\alpha_j(t)$  la fonction du temps associée au mode  $\phi_j$ . Une décomposition micro/macro évidente s'impose :

$$\mathbf{u}_M(t) = \sum_{j=1}^p \alpha_j(t) \phi_j \quad \text{et} \quad \mathbf{u}_m(t) = \sum_{j=p+1}^{N_{filtre}+1} \alpha_j(t) \phi_j \quad (3.26)$$

$\mathbf{u}_M(t)$  est défini par les  $p$  premiers modes de (3.21) correspondant aux valeurs propres  $\omega_j$  les plus basses (mouvements de corps rigide inclus), tandis que  $\mathbf{u}_m(t)$  est défini par les modes restants. Cette partition peut s'appliquer de la même façon sur les champs de vitesse et d'accélération  $\dot{\mathbf{u}}(t)$  et  $\ddot{\mathbf{u}}(t)$ .

Les projecteurs  $\mathbf{Q}_M$  et  $\mathbf{P}_m$  associés à la décomposition (3.26) s'obtiennent à partir de la matrice  $\mathbf{G} = [\phi_1 \dots \phi_p]$ , tels que :

$$\mathbf{Q}_M = \mathbf{G} \mathbf{M}_G^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{M} \quad (3.27)$$

et

$$\mathbf{P}_m = \mathbf{1} - \mathbf{G} \mathbf{M}_G^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{M} \quad (3.28)$$

avec  $\mathbf{M}_G = \mathbf{G}^T \mathbf{M} \mathbf{G}$ .

Remarque : étant donné les propriétés de la base modale (3.23),  $\mathbf{M}_G$  est la matrice identité de dimension  $p \times p$ .

### Décomposition de l'énergie mécanique

L'énergie mécanique, notée  $E^{mec}$ , associée au problème (3.21) s'écrit :

$$E^{mec}(\dot{\mathbf{u}}, \mathbf{u}) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}}^T \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}} + \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \mathbf{K} \mathbf{u} \quad (3.29)$$

En considérant la partition (3.26), (3.29) devient :

$$E^{mec}(\dot{\mathbf{u}}, \mathbf{u}) = \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{u}}_M + \dot{\mathbf{u}}_m)^T \mathbf{M} (\dot{\mathbf{u}}_M + \dot{\mathbf{u}}_m) + \frac{1}{2} (\mathbf{u}_m + \mathbf{u}_M)^T \mathbf{K} (\mathbf{u}_m + \mathbf{u}_M) \quad (3.30)$$

puis en utilisant les propriétés de (3.23) :

$$E^{mec}(\dot{\mathbf{u}}, \mathbf{u}) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}}_M^T \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}}_M + \frac{1}{2} \mathbf{u}_M^T \mathbf{K} \mathbf{u}_M + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}}_m^T \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}}_m + \frac{1}{2} \mathbf{u}_m^T \mathbf{K} \mathbf{u}_m \quad (3.31)$$

$$= E^{mec}(\dot{\mathbf{u}}_M, \mathbf{u}_M) + E^{mec}(\dot{\mathbf{u}}_m, \mathbf{u}_m) \quad (3.32)$$

La séparation des champs micro/macro avec la base modale permet également d'obtenir une séparation de l'énergie mécanique en deux termes ; l'un associé aux quantités macro  $E^{mec}(\dot{\mathbf{u}}_M, \mathbf{u}_M)$  et l'autre associé aux quantités micro  $E^{mec}(\dot{\mathbf{u}}_m, \mathbf{u}_m)$ .

## 2.3 Dissipation des champs micro

Les équations (3.21) et (3.25) donnent :

$$\mathbf{M} \sum_{j=1}^{N_{filtre}+1} \ddot{\alpha}_j(t) \phi_j + \mathbf{K} \sum_{j=1}^{N_{filtre}+1} \alpha_j(t) \phi_j = \mathbf{0} \quad (3.33)$$

En projetant (3.33) sur la base modale  $\{\phi_j\}_{j=1, \dots, n+1}$ ,  $N_{filtre} + 1$  équations différentielles sur les fonctions du temps  $\alpha_j(t)$  apparaissent :

$$\ddot{\alpha}_j(t) + \omega_j^2 \alpha_j(t) = 0 \quad \forall j \in [1; N_{filtre} + 1] \quad (3.34)$$

Chaque équation génère une solution de la forme :

$$\alpha_j(t) = A_j e^{i\omega_j t} \quad \forall j \in [1; N_{\text{filtre}} + 1] \quad (3.35)$$

avec  $A_j$  une constante complexe à fixer en fonction des conditions initiales. Le champ de déplacement  $\mathbf{u}(t)$  s'écrit :

$$\mathbf{u}(t) = \sum_{j=1}^{N_{\text{filtre}}+1} A_j e^{i\omega_j t} \phi_j \quad (3.36)$$

L'objectif est de modifier partiellement l'équation du mouvement (3.21) afin que la solution  $\mathbf{u}(t)$  vérifie la propriété :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{u}_m(t) \rightarrow 0 \quad (3.37)$$

et ce, quelles que soient les conditions initiales.

Cependant, au vu de l'expression de  $\mathbf{u}(t)$  (3.36) et de la définition (3.26), il est évident que  $\mathbf{u}_m(t)$  ne respecte pas la condition (3.37) car défini comme la somme de fonctions périodiques du temps. On modifie alors l'équation (3.34) lorsque  $j > p$  de façon à générer une décroissance dans le temps de la forme  $e^{-ft}$ . Dans ce cas,  $\mathbf{u}_m(t)$  s'écrit :

$$\mathbf{u}_m(t) = \sum_{j=p+1}^{N_{\text{filtre}}+1} A_j e^{i\omega_j t} e^{-ft} \phi_j \quad (3.38)$$

ce qui permet de vérifier la relation (3.37).

**Proposition :** La fonction  $\alpha_j(t) = A_j e^{i\omega_j t} e^{-ft}$  est solution de l'équation différentielle :

$$\ddot{\alpha}_j(t) + 2f\dot{\alpha}_j(t) + f^2\alpha_j(t) + \omega_j^2\alpha_j(t) = 0 \quad (3.39)$$

**Démonstration :** L'équation caractéristique associée à (3.39) s'écrit :

$$r^2 + 2fr + f^2 + \omega_j^2 = 0 \quad (3.40)$$

Soit le discriminant  $\Delta$  de (3.40), tel que  $\Delta = 4f^2 - 4(f^2 + \omega_j^2) = -4\omega_j^2$ , ces racines sont :  $r_{1,2} = -f \pm i\omega_j$ . La solution associée à l'équation différentielle (3.39) se met alors sous la forme :

$$\alpha_j(t) = A_j e^{i\omega_j t} e^{-ft} \quad (3.41)$$

ce qui conclut la démonstration.  $\square$

Contrairement à la PML classique qui est formulée sur les équations locales de la conservation de la quantité de mouvement, la PML sélective est obtenue en raisonnant sur les équations globales de la quantité de mouvement obtenues après avoir discrétiser

spatialement le problème. Le nouveau système de  $(N_{filtre} + 1)$  équations différentielles qui régit l'évolution du modèle se met sous la forme :

$$\ddot{\alpha}_j(t) + \omega_j^2 \alpha_j(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } j \in [1; p] \\ -2f\dot{\alpha}_j(t) - f^2\alpha_j(t) & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.42)$$

ou sous forme matricielle :

$$\mathbf{M}\ddot{\alpha}_j(t)\phi_j + \mathbf{K}\alpha_j(t)\phi_j = \begin{cases} \mathbf{0} & \text{si } j \in [1; p] \\ -2f\mathbf{M}\dot{\alpha}_j(t)\phi_j - f^2\mathbf{M}\alpha_j(t)\phi_j & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.43)$$

Par linéarité des équations qui le composent, (3.43) devient :

$$\mathbf{M} \sum_{j=1}^{N_{filtre}+1} \ddot{\alpha}_j(t)\phi_j + \mathbf{K} \sum_{j=1}^{N_{filtre}+1} \alpha_j(t)\phi_j \quad (3.44)$$

$$= -2f\mathbf{M} \sum_{j=p+1}^{N_{filtre}+1} \dot{\alpha}_j(t)\phi_j - f^2\mathbf{M} \sum_{j=p+1}^{N_{filtre}+1} \alpha_j(t)\phi_j \quad (3.45)$$

soit :

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{u}(t) = -2f\mathbf{M}\dot{\mathbf{u}}_m(t) - f^2\mathbf{M}\mathbf{u}_m(t) \quad (3.46)$$

l'équation du mouvement devient alors :

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{u}(t) + 2f\mathbf{M}\mathbf{P}_m\dot{\mathbf{u}}(t) + f^2\mathbf{M}\mathbf{P}_m\mathbf{u}(t) = \mathbf{0} \quad (3.47)$$

Finalement, l'équation (3.47) remplace (3.21), elle permet d'introduire un phénomène dissipatif sélectif qui est absorbant pour le champ de déplacement micro  $\mathbf{u}_m(t)$  sans toutefois affecter le champ de déplacement macro  $\mathbf{u}_M(t)$ .

Remarque : dans le cas particulier où  $\mathbf{Q}_M = \mathbf{0}$  et  $\mathbf{P}_m = \mathbf{1}$ , l'équation (3.46) redevient l'expression classique de la PML (1.92).

## 2.4 Analyse de stabilité

Dans cette section on analyse la stabilité de la PML sélective associée à un schéma temporel de type Newmark (voir la section 2.1.1 du chapitre 1). Ces travaux reposent essentiellement sur l'utilisation d'un schéma aux différences centrées qui permet de conserver le caractère explicite de la résolution. Ce cas correspond aux valeurs  $\beta = 0$  et  $\gamma = \frac{1}{2}$ .

**Proposition** : le schéma temporel de Newmark  $(\gamma, \beta) = (\frac{1}{2}, 0)$  associé à (3.47) est stable si :

$$\Delta t \leq \frac{2}{\sqrt{\omega_j^2 + f^2}} \quad (3.48)$$

**Démonstration** : voir annexe C.  $\square$

On constate donc que la PML sélective pénalise légèrement la stabilité du schéma en imposant un pas de temps critique plus faible que pour la résolution du même problème sans PML sélective.

## 2.5 Efficacité de l'effet dissipatif sur les phénomènes micro

Plusieurs paramètres ne sont pas encore définis, à savoir :  $L_{filtre}$ ,  $f$  et  $p$ . Ce dernier paramètre influe uniquement sur la gamme d'ondes filtrées alors que  $L_{filtre}$  et  $f$  impactent directement l'efficacité de l'effet dissipatif. Plus la taille de  $\Omega_{filtre}$  est grande et plus les ondes qui traversent la PML sélective ont le temps d'être dissipées, de même plus l'effet amortissant piloté par  $f$  est grand et plus la dissipation se fait rapidement (décroissance en  $e^{-ft}$ ).

Cependant, la taille de  $\Omega_{filtre}$  ne doit pas être trop importante afin de ne pas engendrer de surcoûts de calcul.  $\Omega_{filtre}$  est défini sur le domaine micro  $\Omega_1$ , et réduit de ce fait la précision recherchée dans  $\Omega_1$ . De même, si le paramètre  $f$  est trop élevé, la PML sélective se comportera comme si elle était encastrée dans  $\Omega_{filtre}$  et les ondes micro se réfléchiront directement vers le domaine micro lors des simulations numériques.

Il est possible de fixer les paramètres  $\Omega_{filtre}$  et  $f$  à partir de la célérité des ondes élastiques dans le modèle. Il existe deux types d'onde élastique dans les milieux infinis homogènes isotropes, les ondes de compression et les ondes de cisaillement. La célérité  $c_L$  des ondes de compression, dites longitudinales, s'exprime à partir des propriétés matériaux :

$$c_L = \sqrt{\frac{(1 - \nu) E}{(1 - 2\nu)(1 + \nu) \rho}} \quad (3.49)$$

Il en est de même pour l'expression de la célérité  $c_T$  des ondes de cisaillement, dites transversales :

$$c_T = \sqrt{\frac{E}{2(1 + \nu) \rho}} \quad (3.50)$$

Comme  $c_L > c_T$ , ce sont donc les ondes longitudinales qui traversent les plus rapidement le milieu et qui pourraient être insuffisamment dissipées par la PML sélective.

**Proposition** : La mise en place d'une PML sélective permet d'obtenir des taux de réflexion inférieurs à 1% sous la condition :

$$\frac{L_{filtre}}{c_L} > \ln \left( \frac{1}{0,01} \right) \frac{1}{f} \quad (3.51)$$

**Démonstration** : Il a été établi que l'amortissement dans  $\Omega_{filtre}$  était de la forme  $e^{-ft}$ , une onde qui entrerait à  $t = t_1$  pour en ressortir à  $t = t_2$  subirait donc une atténuation  $\mathcal{T}$

de :

$$\mathcal{T} = 1 - e^{-f\Delta T} \quad (3.52)$$

avec  $\Delta T = t_2 - t_1$ . Connaissant la célérité maximale des ondes élastiques, nous pouvons établir la valeur  $\Delta T_{\min}$  en fonction la taille  $L_{\text{filtre}}$  de  $\Omega_{\text{filtre}}$  :

$$\Delta T_{\min} = \frac{2L_{\text{filtre}}}{c_L} \quad (3.53)$$

Le terme  $2L_{\text{filtre}}$  est introduit car l'onde parcourt un aller-retour dans la zone filtrante  $\Omega_{\text{filtre}}$  avant de revenir à son point de départ. Pour que le taux de réflexion soit globalement inférieur à 1%, il suffit que le taux d'atténuation  $\mathcal{T}$  d'une onde longitudinale micro traversant  $\Omega_{\text{filtre}}$  soit supérieur à 99% :

$$\mathcal{T} > 99\% \quad (3.54)$$

En prenant en compte (3.53) et (3.54), l'équation (3.52) devient :

$$1 - e^{-f \frac{L_{\text{filtre}}}{c_L}} > 99\% \quad (3.55)$$

soit :

$$\frac{L_{\text{filtre}}}{c_L} > \ln \left( \frac{1}{0,01} \right) \frac{1}{f} \quad (3.56)$$

ce qui conclut la démonstration.  $\square$

Le premier critère défini par la relation (3.51) permet d'orienter le choix des paramètres  $f$  et  $L_{\text{filtre}}$  (voir le chapitre 4). Il existe également un lien entre les valeurs propres (c.-à-d. les pulsations) du déplacement micro et le paramètre  $f$  traduisant l'amortissement. Le taux de réflexion de la PML une fois discrétisée dépend en effet de la pulsation  $\omega$  de l'onde incidente [Collino et Monk, 1998]. Ainsi plus la pulsation est faible et plus le taux de réflexion est élevé.

Dans le cas de la PML sélective, seules les ondes micro sont dissipées, or celles-ci correspondent à la gamme d'ondes ayant les plus grandes pulsations. De ce fait, l'un des inconvénients de la PML classique disparaît dès que  $f$  est choisi judicieusement. Il suffit donc de s'assurer que les ondes micro, dont les pulsations sont les plus hautes, se dissipent correctement sans générer de réflexions.

### 3 Discussion autour de la définition du projecteur $P_m$

Nous avons établi une formulation de type PML qui permet de n'absorber qu'une gamme réduite d'ondes. L'équation du mouvement obtenue (3.46) fait apparaître deux termes supplémentaires, le premier sur le vecteur des vitesses nodales et le second sur le vecteur des déplacements nodaux. Ils font tous les deux intervenir la matrice de masse  $M$

qui est déjà connue, ainsi que le coefficient  $f$  qui paramètre l'amortissement. Finalement, le seul opérateur qui n'est pas connu initialement est la matrice de projection  $P_m$  qui dépend elle-même du paramètre  $p$ . Dans les sections suivantes, plusieurs constructions du projecteur  $P_m$  à partir des opérateurs connus sont détaillées.

### 3.1 Projecteur issu de la base modale

Au lieu de raisonner sur le projecteur  $P_m$  et de chercher à identifier les modes non représentables par  $\Omega_2$ , il est possible de travailler sur le projecteur  $Q_M$  en cherchant à définir les modes représentables par  $\Omega_2$ . En effet, ceux-ci seront d'autant moins nombreux que le ratio  $\frac{h_2}{h_1}$  est élevé. La relation (3.26) indique que  $Q_M$  est défini à partir des  $p$  premiers modes propres du problème restreint à  $\Omega_{filtre}$ . Cela soulève plusieurs difficultés :

- le choix du paramètre  $p$  ;
- le calcul des  $p$  premiers modes propres.

Le choix de  $p$  est essentiel, celui-ci définit en effet la gamme d'ondes qui n'est pas dissipée dans  $\Omega_{filtre}$ . Ainsi, plus  $p$  diminue et plus la gamme d'ondes absorbées est grande, diminuant ainsi le risque de réflexion d'ondes à l'interface micro/macro. Cependant, si  $p$  est trop faible, les ondes macro représentables dans le sous-domaine  $\Omega_2$  sont également dissipées par la PML sélective, ce qui affecte la simulation en empêchant le passage des phénomènes macro.

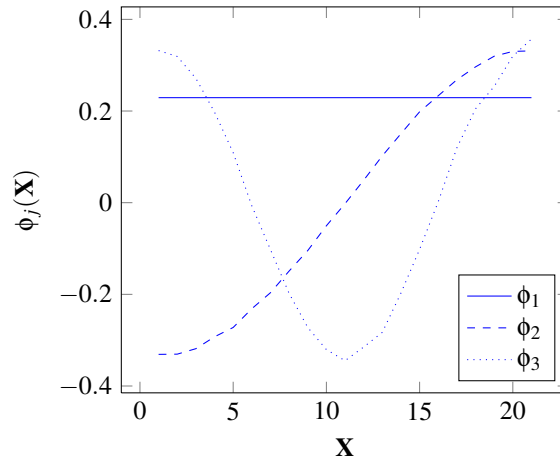
Plusieurs paramètres vont intervenir dans ce choix :  $L_{filtre}$ , la taille de  $\Omega_{filtre}$ , ainsi que les paramètres de discrétisation  $h_1$  et  $h_2$ . En raisonnant dans un premier temps sur un cas 1D où le sous-domaine  $\Omega_{filtre}$  est supposé libre (la présence de  $\Omega_2$  et  $\Omega_1 \setminus \Omega_{filtre}$  n'est pas prise en compte), ces premiers modes propres sont simples à calculer. Ceux-ci correspondent aux valeurs propres les plus faibles et sont représentés sur la FIG.3.7.

Le mode  $\phi_1$  est associé au mouvement de corps rigide, celui-ci ne pose pas de problème puisqu'il est représentable, quel que soit l'espace d'approximation  $\mathcal{V}^{h_j}(\Omega_{filtre})$  utilisé. Dans ce cas 1D linéaire et isotrope,  $\phi_2$  et  $\phi_3$  définissent des modes ayant une forme sinusoïdale de périodicité spatiale notée respectivement  $\lambda_2$  et  $\lambda_3$ . On constate que  $\lambda_2 = 2L_{filtre}$  et  $\lambda_3 = L_{filtre}$ , de même pour le  $j^e$  mode :

$$\lambda_j = \frac{2L_{filtre}}{j-1} \quad (3.57)$$

Il est nécessaire de déterminer un critère pour sélectionner les modes représentables dans  $\mathcal{V}^{h_2}(\Omega_{filtre})$  afin de définir au mieux  $Q_M$ . Plusieurs paramètres vont intervenir dans l'établissement de ce critère : la longueur  $L_{filtre}$  ainsi que le paramètre de discrétisation  $h_2$ . Une méthode empirique indique qu'il faut au moins 6 ou 7 éléments par longueur



FIGURE 3.7 – Premiers modes de  $\Omega_{filtre}$  en 1D

d'onde pour qu'un signal sinusoïdal soit correctement représentable, soit :

$$\frac{\lambda_j}{h_2} \geq 7 \quad (3.58)$$

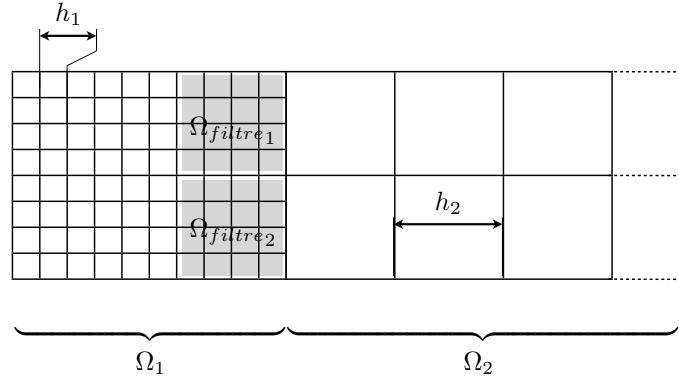
Or le mode  $p$  est le dernier mode, présentant la plus petite périodicité spatiale, sensé être représentable par le domaine macro. À partir de (3.57) et (3.58), on obtient le critère suivant dans le cas 1D :

$$\frac{2L_{filtre}}{7h_2} + 1 \geq p \quad (3.59)$$

Dans des cas 2D ou 3D, la géométrie de  $\Omega_{filtre}$  devient beaucoup plus complexe, ce qui augmente d'autant plus le coût de calcul des modes propres. De plus, le critère empirique qui s'applique en 1D trouve difficilement son équivalent en 2D ou 3D car il est plus difficile de connaître *a priori* la valeur de la périodicité spatiale  $\lambda_j$ . Une solution consiste alors à développer une PML sélective de référence de taille réduite et de géométrie simple  $\Omega_{filtre}^{ref}$ . Puis un assemblage de cette PML sélective élémentaire permet d'établir la PML sélective totale sur  $\Omega_{filtre}$  (voir FIG.3.8). Tous les opérateurs étant alors calculés une seule fois, le coût de mise en place de la PML sélective reste faible.

### 3.2 Projecteur issu de la discrétisation macro

L'utilisation de la base modale est contraignante en dehors des cas simples 1D. De plus, elle ne permet pas de prendre en considération explicitement les informations connues sur le domaine  $\Omega_2$  tel que l'espace d'approximation  $\mathcal{V}^{h_2}(\Omega_2)$ . Or c'est cet espace qui définit, *in fine*, la gamme d'ondes macro représentables par le sous-domaine  $\Omega_2$ , et donc la gamme d'ondes micro à dissiper.



**FIGURE 3.8** – Mise en place d’une PML sélective définie par assemblage de zones PML sélectives élémentaires

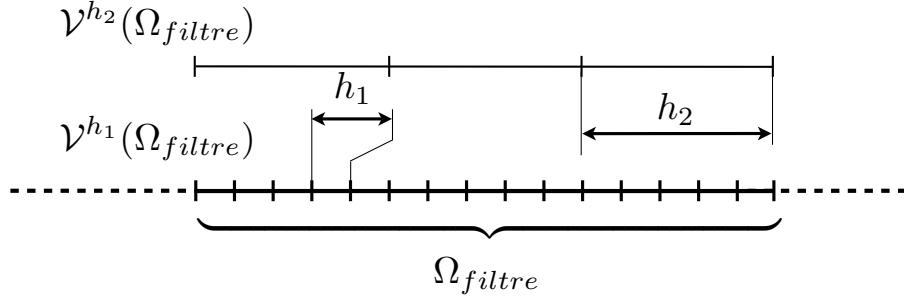
Dans cette deuxième approche, le système d’équations différentielles traduisant l’évolution du milieu (3.47) est inchangé, mais la définition du projecteur  $\mathbf{P}_m$  utilisé est modifiée. Au lieu de définir ce dernier à partir de la base modale, il peut être construit directement à partir des fonctions de forme macro  $\phi^M(\mathbf{X})$  associées aux nœuds macro [To et Li, 2005]. Les nœuds macro de  $\Omega_{filtre}$  sont obtenus par extension de l’espace d’approximation de  $\Omega_2$  à  $\Omega_{filtre}$  (FIG.3.9).

Deux espaces d’approximation  $\mathcal{V}^{h_1}(\Omega_{filtre})$  et  $\mathcal{V}^{h_2}(\Omega_{filtre})$  cohabitent, le premier contenant à la fois les grandeurs totales (micro et macro) par une discrétisation en  $N_{filtre}$  éléments tandis que le second définit uniquement les grandeurs macro par une discrétisation en  $N_{filtre}^M$  éléments.

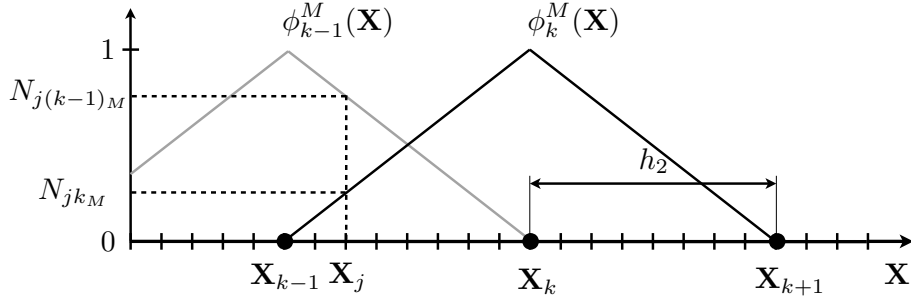
**Définition :** Un champ macro  $\mathbf{u}_M$  de  $\Omega_{filtre}$  est compatible au sens de l’espace d’approximation de  $\Omega_2$  si :

$$\exists \mathbf{d}_M \in \mathbb{R}^{(N_{filtre}^M+1)d} \text{ tel que } \mathbf{u}_M = \mathbf{N}_M \mathbf{d}_M \quad (3.60)$$

où  $\mathbf{d}_M$  représente le vecteur des déplacements macro de la nouvelle discrétisation associée à  $\mathcal{V}^{h_2}(\Omega_{filtre})$  et  $\mathbf{N}_M \in \mathbb{R}^{(N_{filtre}+1)d \times \mathbb{R}^{(N_{filtre}^M+1)d}}$  la matrice d’interpolation des déplacements macro sur le maillage fin (voir FIG.3.10).



**FIGURE 3.9** – Définition des deux espaces d'approximation  $\mathcal{V}^{h1}(\Omega_{filtre})$  et  $\mathcal{V}^{h2}(\Omega_{filtre})$  du domaine  $\Omega_{filtre}$  en 1D



**FIGURE 3.10** – Construction de la matrice  $\mathbf{N}_M$  à partir des fonctions de forme  $\phi_k^M(\mathbf{X})$

En suivant la démarche décrite dans [Wagner et Liu, 2003] et [To et Li, 2005], une façon de définir le projecteur  $\mathbf{P}_m$  est de se donner un critère basé sur le minimum de l'écart entre l'énergie cinétique totale et macro. Soit  $\mathcal{L}$  la fonctionnelle qui définit cet écart :

$$\mathcal{L}(\dot{\mathbf{u}}, \dot{\mathbf{d}}_M) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}}^T \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}} - \frac{1}{2} (\mathbf{N}_M \dot{\mathbf{d}}_M)^T \mathbf{M} (\mathbf{N}_M \dot{\mathbf{d}}_M) \quad (3.61)$$

En tenant compte de (3.60) et (3.22), (3.61) devient en fonction de  $\dot{\mathbf{u}}_m$  et  $\dot{\mathbf{d}}_M$  :

$$\mathcal{L}(\dot{\mathbf{u}}_m, \dot{\mathbf{d}}_M) = \frac{1}{2} \left( \dot{\mathbf{u}}_m + \mathbf{N}_M \dot{\mathbf{d}}_M \right)^T \mathbf{M} \left( \dot{\mathbf{u}}_m + \mathbf{N}_M \dot{\mathbf{d}}_M \right) - \frac{1}{2} \left( \mathbf{N}_M \dot{\mathbf{d}}_M \right)^T \mathbf{M} \mathbf{N}_M \dot{\mathbf{d}}_M \quad (3.62)$$

Le meilleur champ macro  $\dot{\mathbf{d}}_M^{opt}$  au sens de l'énergie cinétique est obtenu en minimisant (3.62) :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\dot{\mathbf{u}}_m, \dot{\mathbf{d}}_M^{opt}) &= \min_{\dot{\mathbf{d}}_M \in \mathbb{R}^{(N_M^M + 1)d}} \mathcal{L}(\dot{\mathbf{u}}_m, \dot{\mathbf{d}}_M) \quad \forall \dot{\mathbf{u}}_m \in \mathbb{R}^{(N_{filtre} + 1)} \\ \iff \frac{\partial \mathcal{L}(\dot{\mathbf{u}}_m, \dot{\mathbf{d}}_M^{opt})}{\partial \dot{\mathbf{d}}_M^{opt}} &= 0 \\ \iff \mathbf{N}_M^T \mathbf{M} \left( \dot{\mathbf{u}}_m + \mathbf{N}_M \dot{\mathbf{d}}_M^{opt} \right) - \mathbf{N}_M^T \mathbf{M} \mathbf{N}_M \dot{\mathbf{d}}_M^{opt} &= 0 \end{aligned} \quad (3.63)$$

En réinjectant (3.22) et (3.60) dans (3.63), une relation liant  $\dot{\mathbf{u}}$  et  $\dot{\mathbf{d}}_M^{opt}$  apparaît :

$$\mathbf{N}_M^T \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{M}_M \dot{\mathbf{d}}_M^{opt} \quad (3.64)$$

avec  $\mathbf{M}_M = \mathbf{N}_M^T \mathbf{M} \mathbf{N}_M$ . Finalement, en intégrant (3.64) et en multipliant par  $\mathbf{N}_M \mathbf{M}_M^{-1}$ , on obtient :

$$\mathbf{N}_M \mathbf{M}_M^{-1} \mathbf{N}_M^T \mathbf{M} \mathbf{u} = \mathbf{N}_M \mathbf{d}_M^{opt} \quad (3.65)$$

ce qui en considérant (3.28) et (3.60), permet d'identifier un projecteur  $\mathbf{Q}_M$  tel que :

$$\mathbf{Q}_M = \mathbf{N}_M \mathbf{M}_M^{-1} \mathbf{N}_M^T \mathbf{M} \quad (3.66)$$

On définit finalement la nouvelle forme du projecteur  $\mathbf{P}_m$  :

$$\mathbf{P}_m = \mathbf{1} - \mathbf{N}_M \mathbf{M}_M^{-1} \mathbf{N}_M^T \mathbf{M} \quad (3.67)$$

L'intérêt de cette nouvelle approche est le caractère explicite du projecteur  $\mathbf{P}_m$ . En effet, il ne nécessite que de construire la matrice  $\mathbf{N}_M$  qui est obtenue par prolongement de la discrétisation de  $\Omega_2$  dans  $\Omega_{filtre}$ , tous les autres opérateurs étant déjà définis.

Remarque : les deux définitions (3.28) et (3.67) du projecteur  $\mathbf{P}_m$  sont similaires, seule la matrice  $\mathbf{G}$  change pour devenir  $\mathbf{N}_M$ . Ainsi la première définition (3.28) est obtenue à partir des modes propres  $\phi_j$  de  $\mathcal{V}^{h1}(\Omega_{filtre})$  tandis que la seconde définition (3.67) est construite à partir des fonctions de forme  $\phi_j^M$  de  $\mathcal{V}^{h2}(\Omega_{filtre})$ .

### Décomposition de l'énergie mécanique

L'énergie mécanique, notée  $E^{mec}$ , se met toujours sous la forme :

$$E^{mec}(\dot{\mathbf{u}}, \mathbf{u}) = \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{u}}_M + \dot{\mathbf{u}}_m)^T \mathbf{M} (\dot{\mathbf{u}}_M + \dot{\mathbf{u}}_m) + \frac{1}{2} (\mathbf{u}_m + \mathbf{u}_M)^T \mathbf{K} (\mathbf{u}_m + \mathbf{u}_M) \quad (3.68)$$

avec

$$\dot{\mathbf{u}}_m^T \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}}_M = \dot{\mathbf{u}}^T \mathbf{P}_m^T \mathbf{M} \mathbf{Q}_M \dot{\mathbf{u}} = 0 \quad (3.69)$$

Ceci implique :

$$E^{mec}(\dot{\mathbf{u}}, \mathbf{u}) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}}_M^T \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}}_M + \frac{1}{2} \mathbf{u}_M^T \mathbf{K} \mathbf{u}_M + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}}_m^T \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}}_m + \frac{1}{2} \mathbf{u}_m^T \mathbf{K} \mathbf{u}_m + \mathbf{u}_m^T \mathbf{K} \mathbf{u}_M \quad (3.70)$$

$$= E^{mec}(\dot{\mathbf{u}}_M, \mathbf{u}_M) + E^{mec}(\dot{\mathbf{u}}_m, \mathbf{u}_m) + \mathbf{u}_m^T \mathbf{K} \mathbf{u}_M \quad (3.71)$$

La séparation des champs micro/macro définie par le nouveau projecteur  $\mathbf{P}_m$  ne permet donc pas d'obtenir une séparation de l'énergie mécanique en deux termes l'un micro et l'autre macro. Ce qui est gagné en terme de construction des opérateurs est perdu sur les propriétés d'orthogonalité des champs micro et macro. De ce fait la dissipation opérée par la PML sélective affecte l'énergie micro et potentiellement l'énergie macro. En effet, un terme croisé sur les quantités micro et macro  $\mathbf{u}_m^T \mathbf{K} \mathbf{u}_M$  demeure.

### 3.3 Projecteur rigide : modes de corps rigide

Deux définitions de  $\mathbf{P}_m$ , construites à partir d'hypothèses différentes, ont pu être établies. Une approche intermédiaire qui satisfait à la fois la propriété de séparation de l'énergie (3.70) ainsi que la définition (3.60) est également envisageable, celle-ci implique la relation suivante :

$$\exists \mathbf{d}_M \in \mathbb{R}^{(N_{filtre}^M+1)d} \text{ tel que } \mathbf{G} (\mathbf{G}^T \mathbf{M} \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{M} \mathbf{u} = \mathbf{N}_M \mathbf{d}_M \quad \forall \mathbf{u} \in \mathbb{R}^{(N_{filtre}+1)d} \quad (3.72)$$

Les seuls paramètres ajustables sont la taille de  $\Omega_{filtre}$  ainsi que le nombre de modes  $p$  utilisés pour définir l'opérateur  $\mathbf{G}$ .

**Proposition :** La relation (3.72) est satisfaite si les modes propres  $\phi_j$  permettant de définir  $\mathbf{N}$  vérifient :

$$\exists \mathbf{d}_j \in \mathbb{R}^{(N_{filtre}^M+1)d} \text{ tel que } \phi_j = \mathbf{N}_M \mathbf{d}_j \quad (3.73)$$

**Démonstration :** Les propriétés de la base modale impliquent que :

$$\forall \mathbf{u}, \quad \exists \{\alpha_j\}_{j \in [1; N_{filtre}+1]} \text{ tel que } \mathbf{u} = \sum_{j=1}^{N_{filtre}+1} \alpha_j \phi_j \quad (3.74)$$

soit :

$$\mathbf{G} (\mathbf{G}^T \mathbf{M} \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{M} \mathbf{u} = \sum_{i=1}^p \alpha_i \phi_i \quad \forall \mathbf{u} \quad (3.75)$$

En supposant que la condition (3.73) est vérifiée, (3.75) devient :

$$\mathbf{G} (\mathbf{G}^T \mathbf{M} \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{M} \mathbf{u} = \sum_{i=1}^p \alpha_i \mathbf{N}_M \mathbf{d}_i \quad \forall \mathbf{u} \quad (3.76)$$

Il ne reste plus qu'à poser  $\mathbf{d} = \sum_{i=1}^p \alpha_i \mathbf{d}_i$  pour conclure la démonstration.  $\square$

Pour satisfaire la proposition précédente, les modes propres de  $\Omega_{filtre}$  définis à partir de l'espace d'approximation  $\mathcal{V}^{h_1}(\Omega_{filtre})$  doivent être représentables dans l'espace d'approximation  $\mathcal{V}^{h_2}(\Omega_{filtre})$ . La vérification de (3.73) est simple en soi mais elle nécessite de calculer préalablement les modes propres  $\phi_j$ , ce qui présente un coût de calcul non négligeable et inutile si le mode n'est pas sélectionné.

Même avec des discrétisations imbriquées telles que  $\mathcal{V}^{h_1}(\Omega_{filtre})$  soit un sous raffinement de  $\mathcal{V}^{h_2}(\Omega_{filtre})$ , il n'y a aucune propriété permettant de conclure sur l'existence d'un mode commun à chacune des discrétisations. Il existe cependant une exception, les modes propres définissant les mouvements de corps rigide. En effet, ces modes sont représentables sous la même forme quel que soit l'espace d'approximation choisi.

Les modes de corps rigides sont simples à calculer et peuvent être établis *a priori* sans avoir à étudier un problème aux valeurs propres généralisées. Cependant, ils donnent une information très minimaliste sur le champ de déplacement macro. La gamme d'ondes dissipées risque d'être beaucoup trop importante en ne laissant passer qu'une petite partie des ondes macro représentables par  $\Omega_2$ . Dans le but de minimiser ce risque, la PML sélective est définie sur le plus petit domaine  $\Omega_{filtre}$  compatible avec la définition (3.60), à savoir la taille d'un élément macro de paramètre  $h_2$ .

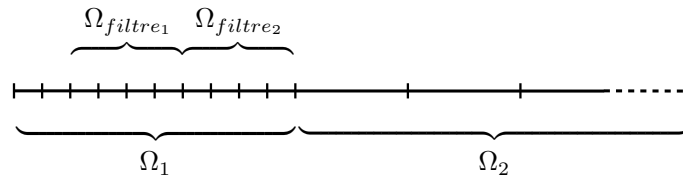


FIGURE 3.11 – PML en série

Finalement, la taille de la zone PML sélective est imposée par le paramètre de discrétisation  $h_2$ . Si jamais cette taille devait être insuffisante pour respecter la condition (3.51) ou bien que la géométrie (notamment en 2D et 3D) ne permette pas d'utiliser qu'un seul élément dans la PML sélective, il est alors possible de disposer plusieurs zones PML sélectives successivement comme défini sur la FIG.3.11.

## 4 Applications en dynamique transitoire

Dans cette section, les analyses théoriques précédentes sont confrontées sur des applications numériques en dynamique transitoire 1D (les applications sur des cas 2D sont réalisées dans le chapitre 4). Les différences dues au choix du projecteur  $\mathbf{P}_m$  sont illustrées et la PML sélective est comparée à d'autres méthodes employées pour traiter les incompatibilités micro/macro (voir [Krenk et Høgsberg, 2005]).

### 4.1 Mise en place de la démarche d'analyse

Dans le but d'étudier le comportement de la PML sélective, on considère un problème 1D composé de deux sous-domaines  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$  ayant respectivement  $N_1 = 160$  éléments de paramètre  $h_1$  et  $N_2 = 8$  éléments de paramètre  $h_2$ , tel que  $h_2 = 20h_1$ . Après discrétisation temporelle, un schéma d'intégration de Newmark explicite de pas de temps  $\Delta t$  (noté aussi  $\Delta t_{explicite}$ ) est appliqué ( $\beta = 0$  et  $\gamma = 0,5$ ). On obtient alors le schéma suivant :

$$\begin{cases} \mathbf{M}^1 \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^1 + 2f \mathbf{M}^1 \mathbf{P}_m \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^1 + f^2 \mathbf{M}^1 \mathbf{P}_m \mathbf{u}_{n+1}^1 = -\mathbf{K}^1 \mathbf{u}_{n+1}^1 - \mathbf{C}^{1^T} \boldsymbol{\mu}_{n+1} \\ \mathbf{M}^2 \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^2 = -\mathbf{K}^2 \mathbf{u}_{n+1}^2 - \mathbf{C}^{2^T} \boldsymbol{\mu}_{n+1} \\ \mathbf{C}^1 \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^1 + \mathbf{C}^2 \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^2 = 0 \end{cases} \quad (3.77)$$

avec

$$\begin{cases} \mathbf{u}_{n+1}^i = \mathbf{u}_n^i + \Delta t \dot{\mathbf{u}}_n^i + \frac{\Delta t^2}{2} \ddot{\mathbf{u}}_n^i \\ \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^i = \dot{\mathbf{u}}_n^i + \frac{\Delta t}{2} (\ddot{\mathbf{u}}_n^i + \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^i) \end{cases}, \quad \forall i \in \{1, 2\} \quad (3.78)$$

Afin de définir l'efficacité de la PML sélective, des signaux de longueur d'onde variable sont initiés en imposant  $\dot{\mathbf{u}}_0^1 = \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{u}_0^2 = \mathbf{0}$  et  $\dot{\mathbf{u}}_0^2 = \mathbf{0}$ . Seul le déplacement initial dans  $\Omega_1$  est non nul et de la forme :

$$\mathbf{u}_0^1 = \begin{bmatrix} u_\lambda(\mathbf{X}_1) \\ \vdots \\ u_\lambda(\mathbf{X}_j) \\ \vdots \\ u_\lambda(\mathbf{X}_{N_1+1}) \end{bmatrix} \quad \text{avec} \quad u_\lambda(\mathbf{X}_j) = \begin{cases} k \left( \cos \left( 2\pi \frac{\mathbf{X}_j}{\lambda} \right) + 1 \right) & \text{si } \mathbf{X}_j < \frac{\lambda}{2} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.79)$$

où  $k$  paramètre l'amplitude du signal tandis que  $\lambda$  définit la longueur d'onde (voir la FIG.3.12). Dans ce cas 1D, on rappelle la relation entre la longueur d'onde spatiale du signal et sa pulsation :

$$\omega = \sqrt{\frac{E}{\rho}} \frac{2\pi}{\lambda} \quad (3.80)$$

avec  $\sqrt{\frac{E}{\rho}} = c_L$ . La longueur d'onde  $\lambda$  est choisie telle que :

$$\lambda = 10qh_1 \quad \text{avec} \quad q \in \mathbb{N}^* \quad (3.81)$$

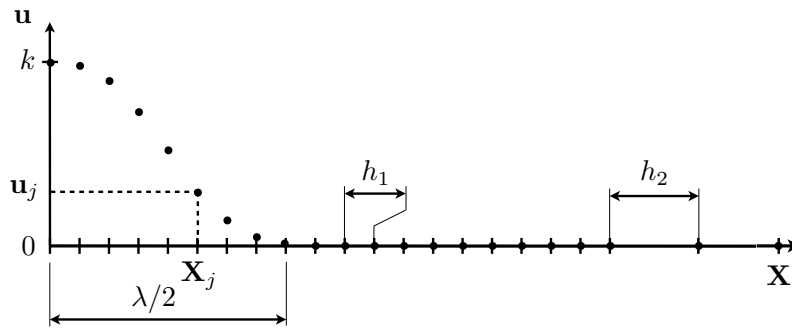
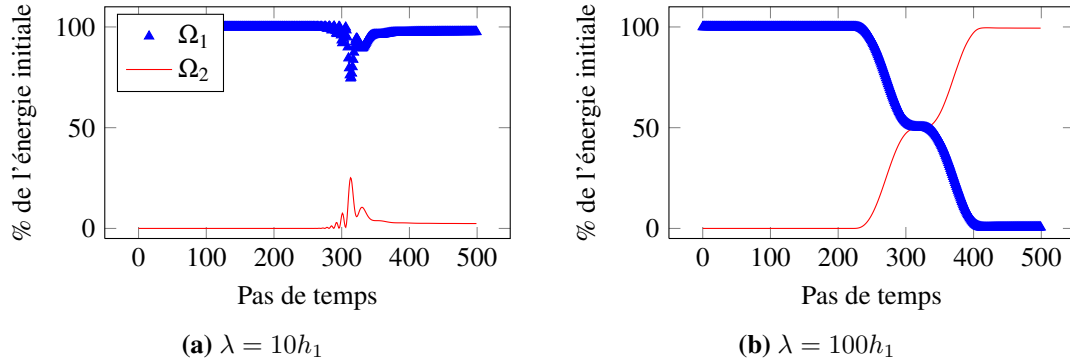


FIGURE 3.12 – Définition de la géométrie et du déplacement initial en 1D

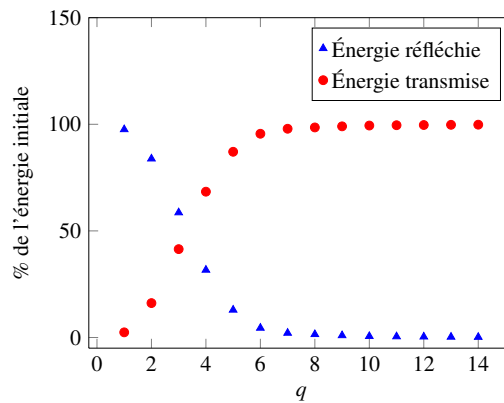
Dans un premier temps le projecteur  $\mathbf{P}_m$  est supposé nul ( $\mathbf{P}_m = \mathbf{0}$ ) et la longueur d'onde  $\lambda$  est fixée à  $10h_1$  ( $q = 1$ ). Ces conditions permettent de définir un cas sans dissipation identique au second calcul de référence de la FIG.3.4b. La FIG.3.13a met en évidence que l'énergie se propage très peu dans le sous-domaine  $\Omega_2$  et reste piégée dans

le sous-domaine  $\Omega_1$ . Au contraire, en posant  $\lambda = 100h_1$  ( $q = 10$ ), l'énergie se transmet entièrement au sous-domaine  $\Omega_2$  (voir FIG.3.13b) lorsque le signal atteint l'interface, entre les pas de temps 250 et 400, traduisant bien l'absence de réflexion à l'interface micro/macro.



**FIGURE 3.13** – Répartition de l'énergie dans le temps avec  $P_m = 0$

Cette démarche est reproduite en faisant varier la valeur de  $q$  de (3.81) dans  $[1; 14]$ . Dans chaque cas, la part de l'énergie initiale qui est réfléchiée dans  $\Omega_1$  et la part qui est transmise dans  $\Omega_2$  sont calculées. Les résultats sont résumés sur la FIG.3.14. Il apparaît que plus le paramètre  $q$  augmente, plus le taux d'énergie transmise est proche de 100%. Au contraire si celui-ci diminue le taux d'énergie transmise tend vers 0 et c'est le taux de réflexion qui tend vers 100%. Ces observations sont cohérentes puisque  $q$  caractérise la longueur d'onde du signal incident or les signaux de grande longueur d'onde sont parfaitement représentables par l'espace d'approximation  $\mathcal{V}^{h_2}(\Omega_2)$ .



**FIGURE 3.14** – Parts de l'énergie réfléchiée et transmise en fonction du paramètre  $q$

**Remarque :** le premier calcul de référence correspondant à une discrétisation homogène  $\bar{h}_1$  dans tout le domaine  $\Omega_1 \cup \Omega_2$  n'est pas illustré. En effet il montre uniquement que,



quelle que soit la valeur de  $q$ , les taux d'énergie réfléchie et transmise sont respectivement de 0% et 100 %.

## 4.2 Étude comparative des projecteurs $\mathbf{P}_m$

Le sous-domaine  $\Omega_{\text{filtre}}$  est placé dans  $\Omega_1$  en amont de l'interface. La zone  $\Omega_{\text{filtre}}$  recouvre 20 éléments de paramètre  $h_1$  de façon à pouvoir y superposer un élément de paramètre  $h_2$  lors de l'utilisation du projecteur mixte. Les deux projecteurs suivants sont comparés :

- $\mathbf{P}_{\text{macro}}$  défini au sens de (3.67) tel que  $\mathbf{P}_{\text{macro}} = \mathbf{N}_M \mathbf{M}_M^{-1} \mathbf{N}_M^T \mathbf{M}$  ;
- $\mathbf{P}_{\text{rigide}}$  défini au sens de (3.28) et (3.72) tel que  $\mathbf{P}_{\text{macro}} = \mathbf{G} \mathbf{M}_G^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{M}$  où  $\mathbf{G}$  n'est constitué que d'un seul mode  $\phi_1$ , le mode de corps rigide.

Le projecteur  $\mathbf{P}_{\text{macro}}$  est étudié dans un premier temps, la répartition de l'énergie au cours du temps est tracée sur la FIG.3.15 pour les deux valeurs de  $q$  utilisées précédemment. Dans le cas  $q = 1$  ou  $\lambda = 10h_1$  (FIG.3.15a), correspondant à un signal initial de très petite longueur d'onde, l'énergie quitte presque entièrement le domaine  $\Omega_1$  sans pour autant se retrouver dans le domaine  $\Omega_2$ , ce qui signifie que l'énergie de l'onde a été dissipée par la PML sélective. Dans le cas  $q = 10$  ou  $\lambda = 100h_1$  (FIG.3.15b), correspondant à un signal initial de grande longueur d'onde, l'énergie se transmet correctement de  $\Omega_1$  à  $\Omega_2$  sans être réfléchie ni dissipée. On retrouve bien un comportement similaire à celui illustré sur la FIG.3.13b.

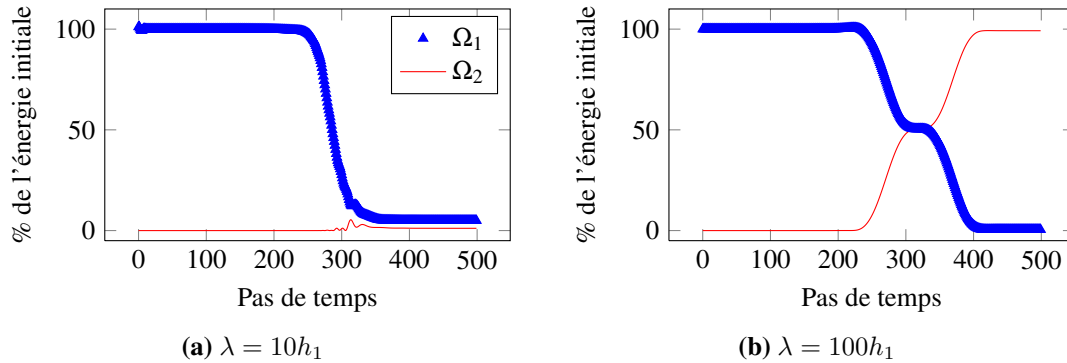
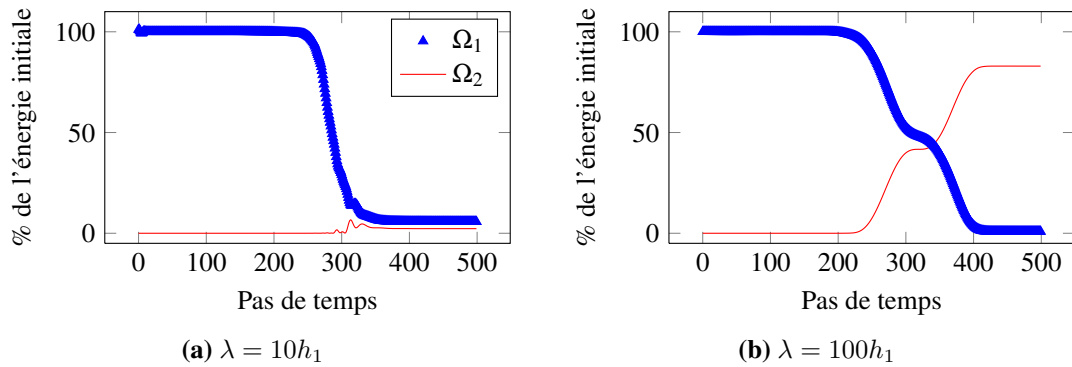


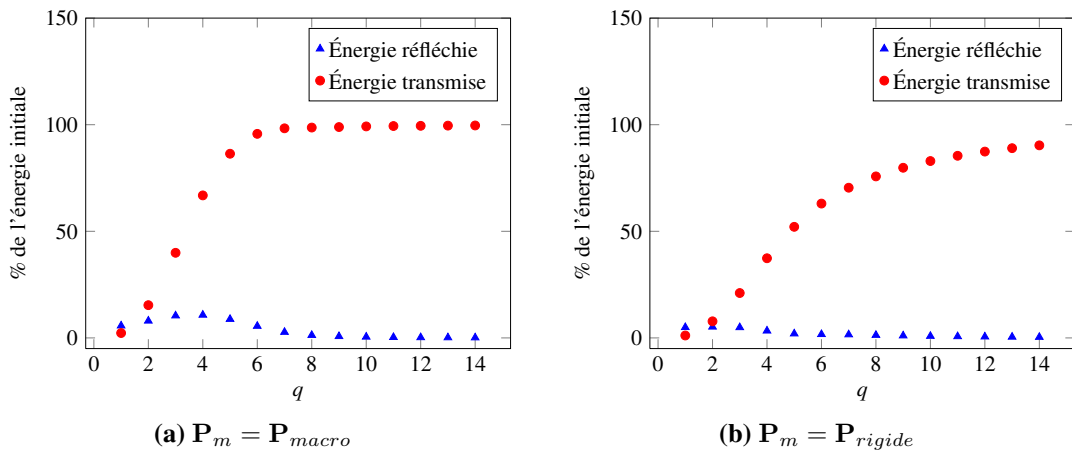
FIGURE 3.15 – Répartition de l'énergie dans le temps avec  $\mathbf{P}_m = \mathbf{P}_{\text{macro}}$

Le deuxième projecteur  $\mathbf{P}_{\text{rigide}}$  est maintenant employé dans  $\Omega_{\text{filtre}}$ . Là encore, la répartition de l'énergie au cours du temps est représentée sur la FIG.3.16. Dans le cas  $q = 1$  (FIG.3.16a), on observe un résultat similaire à celui du projecteur  $\mathbf{P}_{\text{macro}}$ , à savoir une dissipation presque totale de l'énergie de l'onde et de ce fait un taux d'énergie réfléchie très faible. Dans le cas  $q = 10$  (FIG.3.16b), l'énergie se transmet de  $\Omega_1$  à  $\Omega_2$  sans générer de réflexion, mais une partie de l'énergie initiale est dissipée dans  $\Omega_{\text{filtre}}$ .



**FIGURE 3.16** – Répartition de l'énergie dans le temps avec  $P_m = P_{rigide}$

Finalement, la FIG.3.17 résume l'évolution des taux d'énergie réfléchi et transmis en fonction du paramètre  $q$  qui caractérise la longueur d'onde du signal initial. Les deux projecteurs réduisent drastiquement les réflexions, le projecteur  $P_{rigide}$  étant néanmoins plus efficace que  $P_{macro}$ . Cependant, c'est le projecteur  $P_{macro}$  qui permet de conserver la plus grande part d'énergie transmise. Le projecteur  $P_{rigide}$  ne sélectionne qu'une information macro très minimaliste ce qui explique que même lorsque le paramètre  $q$  est très grand soit pour une grande longueur d'onde  $\lambda$ , une partie de l'énergie de l'onde élastique est toujours dissipée.



**FIGURE 3.17** – Parts de l'énergie réfléchi et transmise en fonction du paramètre  $q$

Remarque : le projecteur  $P_{macro}$ , qui n'est qu'une approximation du projecteur  $P_m$  idéal au sens de (3.28), peut dans certaines conditions contribuer à créer de l'énergie (Figure 3.17a pour  $q = 7$ ).

### 4.3 Confrontation à d'autres méthodes

Pour mettre en lumière l'intérêt de la PML sélective, d'autres méthodes ayant pour vocation de limiter les réflexions aux interfaces micro/macro sont introduites. Les comparaisons sont principalement faites à partir des méthodes décrites dans [Krenk et Høgsberg, 2005] qui permettent de dissiper les signaux hautes fréquences à l'origine des réflexions tout en conservant les signaux basses fréquences.

La première comparaison est effectuée sur un problème sans PML sélective :

$$\begin{cases} \mathbf{M}^1 \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^1 + \mathbf{K}^1 \mathbf{u}_{n+1}^1 = -\mathbf{C}^{1T} \boldsymbol{\mu}_{n+1} \\ \mathbf{M}^2 \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^2 + \mathbf{K}^2 \mathbf{u}_{n+1}^2 = -\mathbf{C}^{2T} \boldsymbol{\mu}_{n+1} \\ \mathbf{C}^1 \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^1 + \mathbf{C}^2 \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^2 = \mathbf{0} \end{cases} \quad (3.82)$$

qui correspond au problème initial (3.17). L'action dissipative [Krenk et Høgsberg, 2005] est obtenue par l'utilisation d'un schéma de Newmark dissipatif respectant la condition (1.60). Le schéma d'intégration associé s'écrit alors :

$$\begin{cases} \mathbf{u}_{n+1}^i = \mathbf{u}_n^i + \Delta t \dot{\mathbf{u}}_n^i + \frac{\Delta t^2}{2} ((1-\beta) \ddot{\mathbf{u}}_n^i + \beta \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^i) \\ \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^i = \dot{\mathbf{u}}_n^i + \frac{\Delta t}{2} ((1-\gamma) \ddot{\mathbf{u}}_n^i + \gamma \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^i) \end{cases} \quad \forall i \in \{1, 2\} \quad (3.83)$$

avec

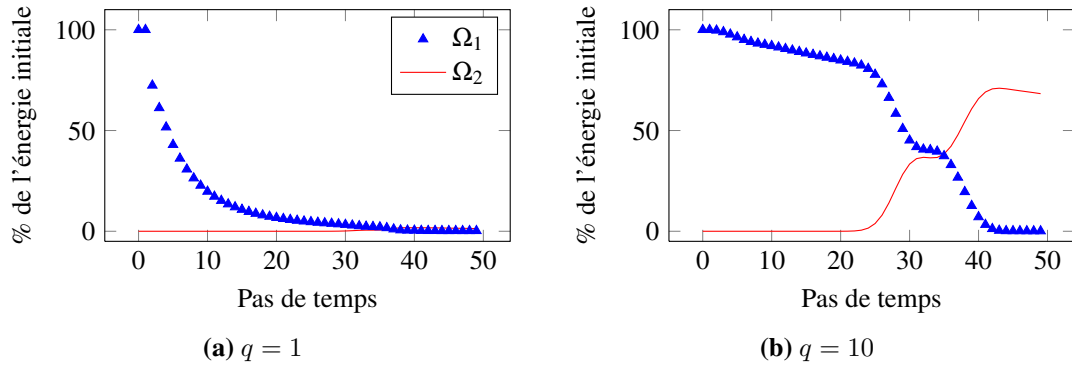
$$\gamma = \frac{1}{2} + \alpha, \quad \beta = \frac{1}{4} (1 + \alpha)^2 \quad \text{et} \quad \alpha \geq 0 \quad (3.84)$$

Par la suite on pose  $\alpha = 0,1$  ce qui représente un bon compromis entre dissipation des hautes fréquences et conservation des basses fréquences ( $\beta = 0,6$  et  $\gamma = 0,3025$ ).

Le schéma étant inconditionnellement stable, il est possible d'utiliser un pas de temps plus grand que celui nécessaire à la stabilité du schéma explicite utilisé. Il faut également noter que l'action dissipative du schéma temporel dépend principalement de la valeur du pas de temps  $\Delta t$  ; si celui-ci est trop petit, l'action dissipative sera quasi nulle. On choisit  $\Delta t_{\text{implicite}} = 10 \Delta t_{\text{explicite}}$ .

La répartition de l'énergie dans le temps est tracée pour deux valeurs du paramètre  $q$  sur la FIG.3.18. Dans le cas  $q = 1$ , l'énergie de l'onde est rapidement dissipée, et ce dès les premiers pas de temps. Au final toute l'énergie a été dissipée et il n'y a donc pas de réflexion. Dans le cas  $q = 10$ , il n'y a pas non plus de réflexion puisque l'énergie se transmet correctement de  $\Omega_1$  à  $\Omega_2$ , cependant cette énergie diminue au cours du temps aussi bien dans  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$  du fait de l'action dissipative du schéma d'intégration.

La même démarche est reproduite en appliquant un filtre linéaire du premier ordre



**FIGURE 3.18** – Répartition de l'énergie dans le temps avec utilisation d'un schéma de Newmark dissipatif (Nwk  $\alpha = 0,1$ )

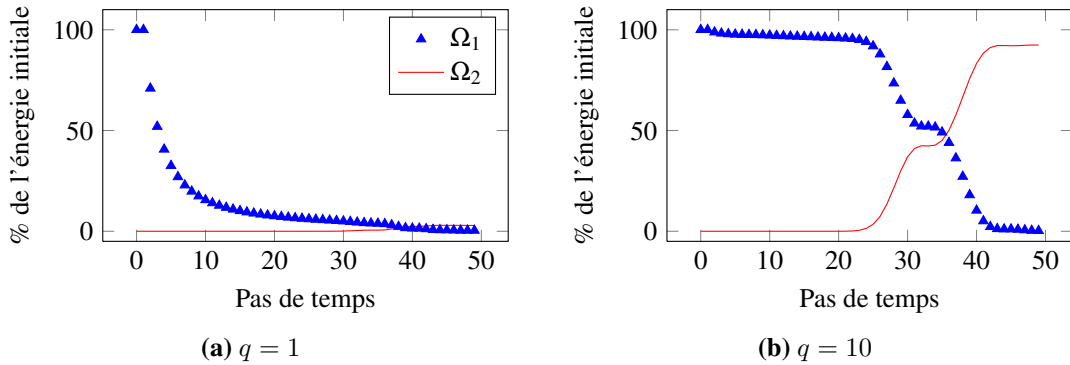
[Krenk et Høgsberg, 2005] à (3.82), ce qui permet d'obtenir :

$$\begin{cases} \mathbf{M}^1 \left( \left( \frac{1}{2} + \nu \right) \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^1 - \nu \ddot{\mathbf{u}}_n^1 \right) + \mathbf{K}^1 \left( \left( \frac{1}{2} + \nu - \alpha \right) \mathbf{u}_{n+1}^1 + (-\nu + \alpha) \mathbf{u}_n^1 \right) = -\mathbf{C}^{1T} \boldsymbol{\mu}_{n+1} \\ \mathbf{M}^2 \left( \left( \frac{1}{2} + \nu \right) \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^2 - \nu \ddot{\mathbf{u}}_n^2 \right) + \mathbf{K}^2 \left( \left( \frac{1}{2} + \nu - \alpha \right) \mathbf{u}_{n+1}^2 + (-\nu + \alpha) \mathbf{u}_n^2 \right) = -\mathbf{C}^{2T} \boldsymbol{\mu}_{n+1} \\ \mathbf{C}^1 \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^1 + \mathbf{C}^2 \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^2 = \mathbf{0} \end{cases} \quad (3.85)$$

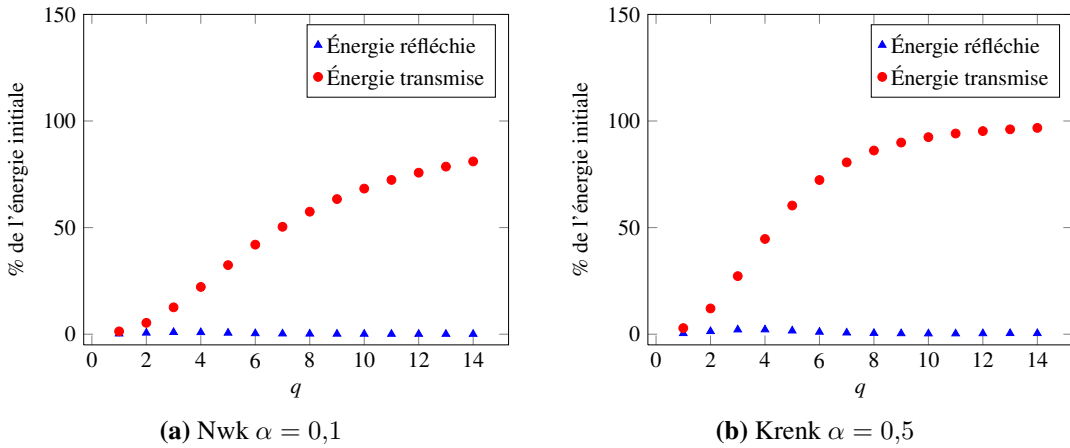
Le schéma d'intégration (3.83) ainsi que les conditions (3.84) restent identiques. Cependant il est nécessaire de choisir un paramètre  $\alpha$  plus grand pour minimiser les réflexions, dans l'application suivante on prend  $\alpha = 0,5$ .

Sur la FIG.3.19a qui correspond au cas  $q = 1$ , l'énergie commence à être dissipée dès les premiers pas de temps aussi efficacement que dans le cas Nwk  $\alpha = 0,1$ . Dans le cas  $q = 10$  FIG.3.19b, l'énergie se transmet presque parfaitement de  $\Omega_1$  à  $\Omega_2$ , on remarque néanmoins une légère perte d'énergie.

Finalement, la FIG.3.20 récapitule l'évolution des taux de réflexion et de transmission en fonction du paramètre  $q$ . Dans le cas Nwk  $\alpha = 0,1$  le taux de réflexion est systématiquement nul mais le taux de transmission est sensiblement réduit même pour des valeurs de  $q$  élevées. Dans le cas Krenk  $\alpha = 0,5$ , le taux de transmission est plus proche de la référence (voir FIG.3.14) mais cela s'obtient au détriment des réflexions qui augmentent légèrement.



**FIGURE 3.19** – Répartition de l'énergie dans le temps avec un filtre du premier ordre (Krenk  $\alpha = 0,5$ )

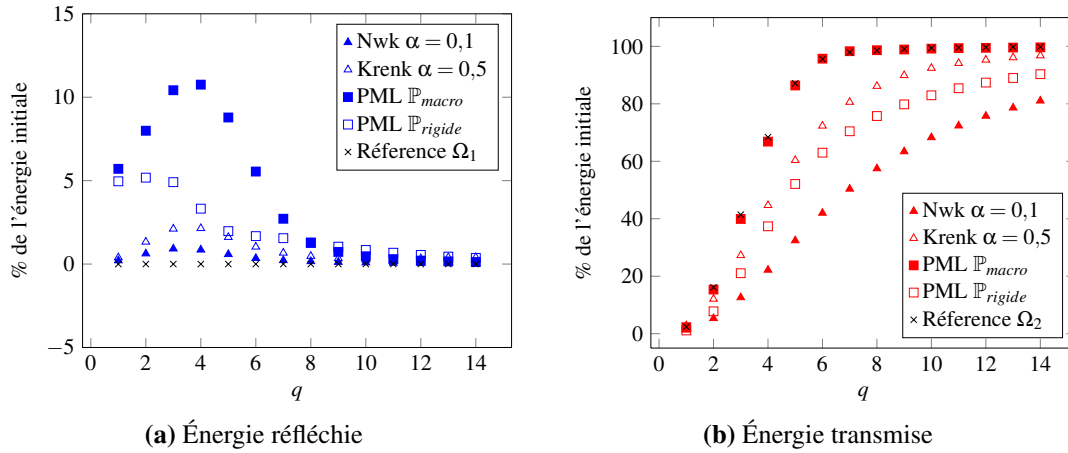


**FIGURE 3.20** – Parts de l'énergie réfléchie et transmise en fonction du paramètre  $q$

Remarque : contrairement à la PML sélective, l'effet dissipatif des méthodes décrites ci-dessus agit dans tout le domaine  $\Omega_1$ . Pour pouvoir comparer les méthodes sur les mêmes bases, il convient de restreindre l'effet dissipatif au domaine  $\Omega_{\text{filtre}}$  mais cela passe nécessairement par l'utilisation d'un schéma d'intégration multi-pas de temps. Il est également important de noter qu'avec ces méthodes alternatives, le caractère explicite de résolution est perdu et devient nécessairement implicite.

## 5 Bilan du chapitre

Tous les résultats précédents sont regroupés sur la FIG.3.21, ce qui permet de comparer plus précisément les taux de réflexion et de transmission entre eux. Les taux références obtenus avec les deux calculs de référence y sont également représentés.



**FIGURE 3.21** – Évolutions de la part de l'énergie réfléchie et transmise en fonction de  $q$

Il est possible de faire plusieurs observations :

- l'utilisation d'un schéma implicite fortement dissipatif Nwk  $\alpha = 0,1$  minimise les réflexions ;
- la PML sélective associée au projecteur  $\mathbf{P}_{macro}$  est la seule à présenter un taux de réflexion supérieure à 5% mais également la seule à atteindre 100 % d'énergie transmise ;
- dans le cas Krenk  $\alpha = 0,5$  et pour la PML sélective associée à  $\mathbf{P}_{rigide}$ , même lorsque  $q = 14$ , le taux de transmission ne dépasse pas 85 – 95%.

Il n'y a donc pas de méthode parmi celles présentées ci-dessus qui permette de satisfaire parfaitement le double objectif de réduire à la fois les réflexions des ondes micro tout en conservant la transmission des ondes macro. Cependant plusieurs progrès notables ont été observés. Il est possible de définir un effet dissipatif localisé sur un sous-domaine de  $\Omega_1$  grâce à la PML sélective avec un schéma explicite. Les méthodes basées sur des schémas implicites (Nwk et Krenk) sont un peu plus efficaces, mais il est important de noter que la résolution devient implicite contrairement à la PML sélective qui reste entièrement explicite. Il est intéressant de noter que l'utilisation de la PML sélective peut être combinée à une méthode de dissipation numérique telle que celles décrites dans [Krenk et Høgsberg, 2005], ce qui peut permettre d'optimiser la dissipation.

Ces résultats sont très encourageants puisqu'il est encore possible d'ajuster la définition de la PML sélective en modifiant sa taille ou la définition du projecteur macro pour en améliorer ses performances. Dans le chapitre suivant, on choisit donc d'utiliser la PML sélective associée au projecteur  $\mathbf{P}_{rigide}$  sur des cas 2D pour limiter les réflexions parasites.



# Chapitre 4

## Modélisation et simulation d'un béton fibré en dynamique

*Dans ce quatrième chapitre, les méthodes développées aux Chapitres 2 et 3 sont appliquées sur un cas concret. Il s'agit de simuler le comportement d'ondes de compression et de cisaillement dans un béton fibré modélisé par un modèle multi-échelle en 2D.*

### Sommaire

---

|          |                                                     |            |
|----------|-----------------------------------------------------|------------|
| <b>1</b> | <b>Introduction . . . . .</b>                       | <b>104</b> |
| <b>2</b> | <b>Définition du modèle multi-échelle . . . . .</b> | <b>104</b> |
| 2.1      | Modèle micro . . . . .                              | 104        |
| 2.2      | Modèle macro . . . . .                              | 111        |
| 2.3      | Interfaces . . . . .                                | 112        |
| <b>3</b> | <b>Applications . . . . .</b>                       | <b>114</b> |
| 3.1      | Résolution . . . . .                                | 114        |
| 3.2      | Résultats . . . . .                                 | 115        |
| <b>4</b> | <b>Bilan du chapitre . . . . .</b>                  | <b>122</b> |

---



# 1 Introduction

Les modèles continus ou discrets locaux classiques ne suffisent pas pour prendre en compte la présence des fibres au sein du béton fibré. Celles-ci, de par leur taille, leur densité ou leur orientation, ont une influence significative sur les mécanismes de rupture du matériau.

Dans [Pros *et al.*, 2012], la présence des fibres est représentée en superposant un modèle de béton classique avec un “nuage” de fibres. Les deux modèles sont alors couplés au moyen d’un lagrangien. L’approche considérée ici vise, au contraire, à introduire directement les fibres dans un modèle discret local [Wittel *et al.*, 2006]. Leur présence est représentée explicitement en ajoutant des interactions non-locales entre les particules du modèle. Cependant cette approche a un coût et l’utiliser sur tout le problème n’a que peu d’intérêt puisque les fissures restent principalement localisées autour des zones sous chargements extrêmes. C’est pourquoi un second modèle continu local est employé en dehors de ces zones pour réduire les coûts de calcul tout en conservant la précision requise. Les deux modèles sont alors couplés au moyen d’un raccord surfacique en vitesse, tandis que l’approximation NL2L-loc et la PML sélective sont mises en place pour traiter les incompatibilités entre modèles. De cette façon, la simulation n’est pas polluée par les réflexions d’onde qui apparaissent habituellement aux interfaces. Les performances de ce nouveau modèle multi-échelle sont alors étudiées au moyen d’essais numériques 2D.

Remarque : dans l’ensemble de ce chapitre, les modèles 2D sont construits en supposant les forces/contraintes planes et déplacement/déformations planes.

## 2 Définition du modèle multi-échelle

### 2.1 Modèle micro

Le modèle micro permet de rendre compte explicitement des phénomènes à l’échelle microscopique se produisant au sein du matériau, tels que la décohésion ou la propagation de fissures. Les particules du modèle discret sont à l’échelle du grain du béton ; or à cette échelle il n’est pas possible de considérer le matériau comme homogène. Une certaine hétérogénéité doit être représentée aussi bien sur la forme et la répartition des grains que sur la distribution des fibres dans le milieu. Dans les sections suivantes, les différentes étapes permettant de définir le modèle micro sont décrites :

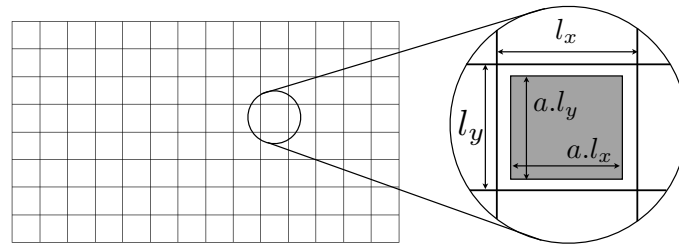
- création de la géométrie,
- mise en place des interactions modélisant la cohésion du béton,
- ajout des interactions modélisant la présence des fibres.

*Couplage de modèles multi-échelles pour la représentation de phénomènes localisés en dynamique transitoire explicite*

### 2.1.1 Géométrie 2D

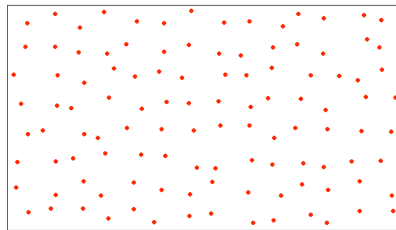
La position du centre de chaque particule est tirée de façon aléatoire dans le domaine rectangulaire  $\Omega$ . Par la suite, une décomposition par polygones de Voronoi permet de découper l'espace et de créer la géométrie des grains.

Pour effectuer le tirage du centre des  $N$  grains, il est possible d'utiliser une méthode de type Monte-Carlo sur l'ensemble du domaine  $\Omega$ . Mais dans le but de maintenir une certaine régularité dans la répartition et la taille des grains, une grille régulière est utilisée pour partitionner le domaine en  $N$  cases (voir la FIG.4.1). La position du centre d'une particule est affectée à chacune de ces cases. La densité de particules est alors directement contrôlée par les pas  $l_x$  et  $l_y$  de la grille.

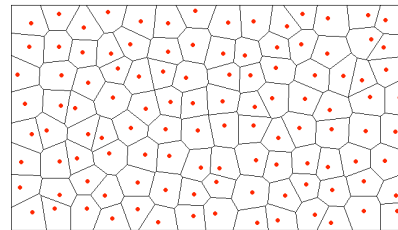


**FIGURE 4.1** – Grille et zone de tirage

L'hétérogénéité est créée en tirant la position du centre de la particule sur chaque case de la grille, un paramètre  $a$  permettant de modifier la fenêtre de tirage de dimension :  $a.l_x \times a.l_y$  (voir la FIG.4.1) [Delaplace, 2008]. En modifiant la valeur du paramètre  $a$  telle que  $0 \leq a \leq 1$ , il est possible d'obtenir des particules plus ou moins régulières ; dans le cas  $a = 0$ , on retrouve un réseau régulier de particules rectangulaires. Une fois la position du centre de chaque particule définie (FIG.4.2a), la décomposition par polygones de Voronoi (FIG.4.2b) permet d'obtenir leur forme.



**(a)** Tirage de la position du centre des particules ( $a = 0,6$ )



**(b)** Polygones de Voronoi associés au tirage

**FIGURE 4.2** – Construction de la géométrie des grains du modèle particulaire

En considérant une épaisseur de matériau  $H$  fixe du même ordre de grandeur que  $l_x$

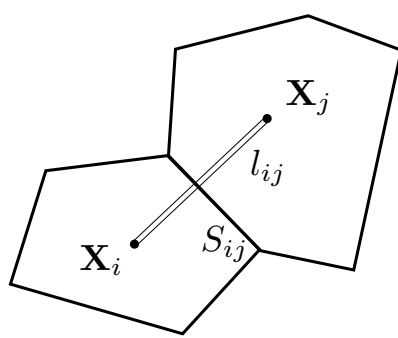
et  $l_y$  et connaissant la masse volumique  $\rho$  du béton ( $\rho = 5000 \text{ kg.m}^{-3}$ ), la masse  $m_i$  et l'inertie  $I_i$  associées à chaque particule  $i$  sont calculées. Ces grandeurs seront nécessaires pour prendre en compte les effets d'inertie du matériau.

### 2.1.2 Modélisation de la cohésion béton/béton

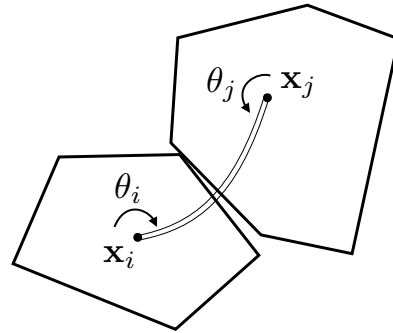
La cohésion de type béton/béton est obtenue en créant des interactions (locales) entre les grains en contact. Chacune de ces interactions est modélisée par une poutre élastique de type Euler-Bernoulli [Delaplace, 2008].

La triangulation de Delaunay, forme duale des polygones de Voronoi, permet d'établir les couples de particules  $(i, j)$  présentant une arête commune. Les centres de chaque couple de particule  $(i, j)$  sont alors reliés par une poutre comme illustré sur la FIG.4.3. Plusieurs caractéristiques géométriques de la poutre dans sa configuration initiale se déduisent de la géométrie des grains :

- la longueur de la poutre  $l_{ij} = |\mathbf{X}_j - \mathbf{X}_i|$  ;
- la section de la poutre  $S_{ij}$ , obtenue en mesurant la longueur de l'arête commune entre les particules  $i$  et  $j$  ;
- l'inertie de la section  $I_{ij}$ , calculée en supposant la section rectangulaire et centrée sur l'axe de la poutre.



(a) Configuration initiale d'une interaction de type poutre



(b) Configuration déformée d'une interaction de type poutre

**FIGURE 4.3** – Modélisation de la cohésion entre deux particules  $i$  et  $j$  par un modèle poutre

Les poutres sont supposées à l'équilibre (énergie nulle) dans leur configuration initiale et localement l'hypothèse des petites déformations s'applique. L'énergie  $\phi_{ij}$  associée à chaque poutre s'exprime à partir des déplacements et rotations de ses deux extrémités :

$$\phi_{ij}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, \theta_i, \theta_j) = \frac{1}{2} \frac{E_b S_{ij}}{l_{ij}} (|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i| - l_{ij})^2 + \frac{1}{2} \frac{E_b I_{ij}}{l_{ij}} (\theta_j - \theta_i)^2 \quad (4.1)$$

avec  $E_b$  le module d'Young de la poutre. Dans le cas d'un béton standard,  $E_b$  est fixé à 40 GPa.

La force  $\mathbf{f}_{j \rightarrow i}^i$  et le moment  $m_{j \rightarrow i}^i$  s'exerçant sur la particule  $i$  se dérivent de l'énergie d'interaction  $\phi_{ij}$  :

$$\mathbf{f}_{j \rightarrow i}^i = \frac{E_b S_{ij}}{l_{ij}} (|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i| - l_{ij}) \mathbf{n}_{ij} \quad (4.2)$$

$$m_{j \rightarrow i}^i = \frac{E_b I_{ij}}{l_{ij}} (\theta_j - \theta_i) \quad (4.3)$$

où  $\mathbf{n}_{ij}$  est le vecteur directeur unitaire de la poutre dans sa configuration courante.

On ajoute également dans le modèle la dégradation du matériau pour modéliser les phénomènes de fissuration. Pour cela, il suffit d'ajouter un critère de rupture fragile en déformation et/ou en rotation de la forme :

$$C_{ij} = \sup \left( \left| \frac{\varepsilon_{ij}}{\varepsilon_{crit}} \right|, \left| \frac{\theta_{ij}}{\theta_{crit}} \right| \right) \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \varepsilon_{ij} = \left| \frac{|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i| - l_{ij}}{l_{ij}} \right| \\ \theta_{ij} = |\theta_i - \theta_j| \end{cases} \quad (4.4)$$

où  $\varepsilon_{crit}$  et  $\theta_{crit}$  sont respectivement la déformation longitudinale critique et la rotation critique. Dans le cas de figure où  $C_{ij} > 1$ , la poutre casse et ne contribue plus aux efforts de cohésion.

Remarque : le contact entre les grains est initialement pris en compte par la présence des poutres élastiques, cependant une fois la poutre rompue le contact disparaît même en cas de refermeture de la fissure. Il est alors nécessaire d'ajouter une procédure permettant de détecter et de modéliser ces contacts (par pénalisation par exemple).

### 2.1.3 Modélisation des fibres

Les poutres élastiques définies précédemment modélisent uniquement les interactions de type béton/béton. De nombreuses fibres sont également réparties dans le matériau et il convient de les modéliser dans le modèle micro. Elles permettent de reprendre une partie des efforts et de l'énergie lorsqu'une fissure se crée, ce qui engendre des faciès de rupture différents par rapport au même matériau sans fibre [Wittel *et al.*, 2006]. Les fibres présentes au sein du béton ne sont pas modélisées explicitement, mais leur présence est prise en compte par l'ajout d'interactions non-locales qui ne travaillent qu'en traction/compression. Chaque fibre est ainsi représentée par une interaction liant les deux grains de béton où sont présentes les extrémités de la fibre comme illustré sur la FIG.4.4. On considère ici des fibres de type "anchor" qui sont recourbées à leurs extrémités.

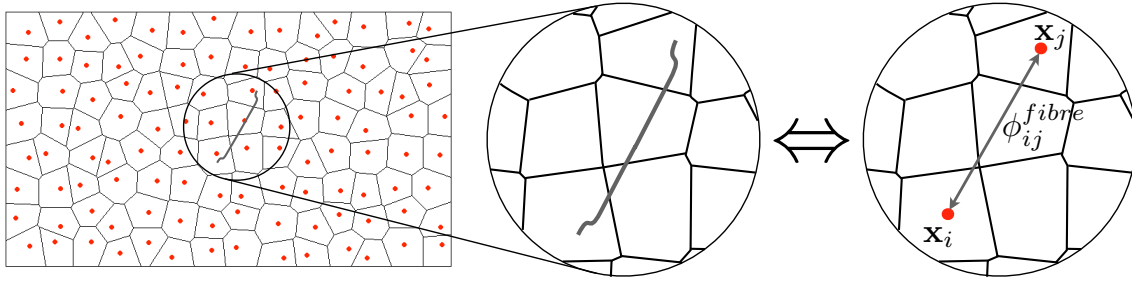


FIGURE 4.4 – Modélisation d'une fibre

Le comportement des fibres peut être décomposé en deux phases distinctes :

- une première phase élastique jusqu'à atteindre une contrainte limite élastique ;
- une seconde phase qui traduit le glissement de la fibre dans le béton jusqu'à rupture du lien fibre/béton.

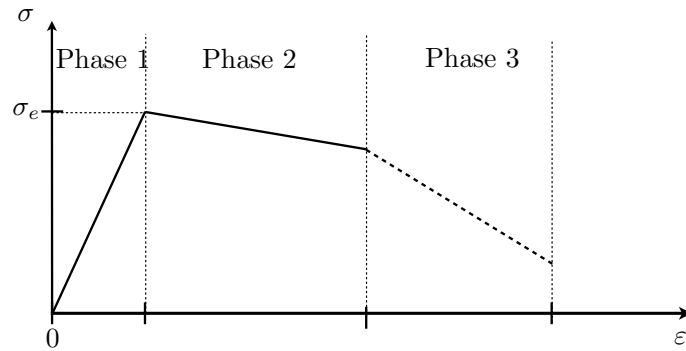


FIGURE 4.5 – Modèle de comportement des fibres

Globalement, la contrainte diminue légèrement durant la seconde phase jusqu'à ce qu'une des deux extrémités de la fibre se désolidarise du grain de béton. À noter qu'il est également possible de considérer une troisième phase similaire à la seconde pendant laquelle la contrainte diminue plus rapidement [Wittel *et al.*, 2006].

Dans un premier temps, chaque fibre est représentée par une interaction basée sur un potentiel quadratique :

$$\phi_{ij}^{fibre}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{1}{2}k(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| - l_{ij})^2 \quad (4.5)$$

avec  $l_{ij} = |\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j|$  la longueur initiale de la fibre et  $k$  la raideur de la fibre. Le paramètre  $k$  peut être établi à partir des caractéristiques géométriques et mécaniques des fibres, tel que :

$$k = \frac{E_f S_f}{l_{ij}} \quad (4.6)$$

où  $E_f$  est le module d'Young du matériau composant la fibre (210 GPa dans le cas d'un acier), et  $S_f$  est la section de cette même fibre (1 mm<sup>2</sup> pour le type de fibre considéré).

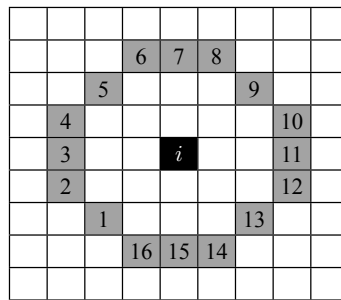
Ces interactions doivent maintenant être réparties dans le matériau de façon aléatoire. Deux démarches complémentaires sont proposées :

- une démarche stochastique : la position de chaque fibre est obtenue à partir d'un tirage aléatoire ;
- une démarche déterministe : toutes les possibilités de fibre sont représentées et leur énergie est pondérée par leur probabilité d'existence.

### Répartition aléatoire des fibres

Cette première démarche consiste à reproduire l'aspect aléatoire dans la distribution des fibres. La grille générée pour définir la géométrie des particules sert également de support à la création des interactions représentant les fibres. Pour chaque particule, aucun, un ou plusieurs voisins à la distance adéquate sont sélectionnés afin de définir une interaction de type fibre. Le tirage des fibres doit amener à retrouver le taux de fibre correspondant à celui du matériau réel, il s'agit ici d'un taux de fibre moyen par grain noté  $\tau_f$ .

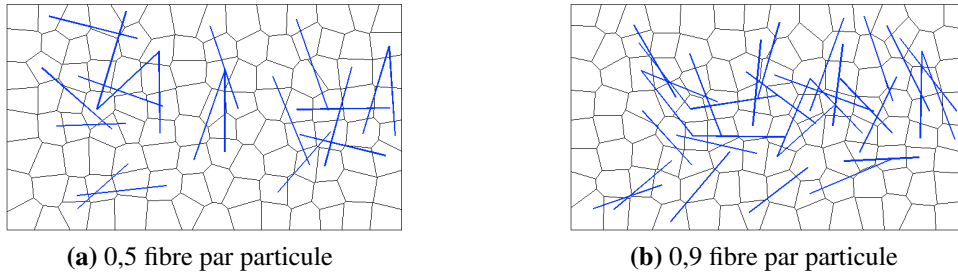
C'est la longueur de la fibre qui définit les voisins pouvant potentiellement être sélectionnés. Soit  $n_f$  le nombre de ces possibilités par particule. Pour des fibres de longueur  $l_{fibre} \approx 3l$  avec  $l = l_x = l_y$ , les  $n_f$  possibilités sont représentées sur la FIG.4.6, elles sont au nombre de 16. Pour éviter que des fibres ne se superposent, le tirage n'est effectué que sur les huit premières possibilités définies pour chaque particule.



**FIGURE 4.6** – Grille de tirage des fibres pour la particule  $i$

Plusieurs exemples de répartition de fibres sur des cas 2D sont illustrés sur la FIG.4.7, un premier tirage présentant un taux de fibres par particule  $\tau_f$  de 0,5 et un second tirage avec un taux de 0,9.

Remarque : plutôt que de taux de fibre  $\tau_f$  il est plus courant de parler de fraction volu-



**FIGURE 4.7** – Définition du modèle micro avec fibres (en bleu)

mique  $\nu_f$  de fibre tel que :

$$\nu_f \approx \frac{\tau_f S_f * l_f}{l_x l_y H} \quad (4.7)$$

avec  $l_f$  la longueur moyenne des fibres et  $H$  l'épaisseur du matériau.

### Répartition déterministe des fibres

Cette seconde démarche consiste à ne plus répartir aléatoirement les fibres, mais à les introduire de façon déterministe. Dans les zones proches des interfaces avec le modèle macro, toutes les possibilités de fibre sont représentées d'où l'aspect déterministe. Le but est d'obtenir une transition douce avec le modèle macro homogène isotrope pour respecter les hypothèses de couplage du chapitre 2. Cependant pour ne pas raidir la structure l'énergie affectée à chaque fibre est pondérée pour retrouver une énergie moyenne équivalente aux zones où les fibres sont disposées aléatoirement.

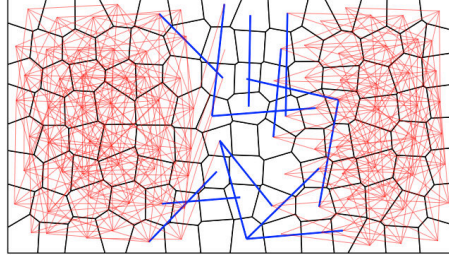
Pour chaque particule, les huit interactions correspondant aux huit premières possibilités de la FIG.4.6 sont définies. L'aspect stochastique de la répartition des particules est directement pris en compte par la pondération  $e$  affectée à chaque énergie d'interaction non-locale, telle que :

$$\phi_{ij}^{fibre}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{1}{2} e k (|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| - l_{ij})^2 \quad (4.8)$$

La pondération  $e$ , avec  $0 \leq e \leq 1$ , est calculée à partir de  $\tau_f$  et  $n_f$  :

$$e = \frac{\tau_f}{n_f} \quad (4.9)$$

Le modèle micro ainsi obtenu est représenté sur la FIG.4.8 avec un taux de fibre par particule fixé à 0,5. Les première et dernière colonnes de particules utilisent une description déterministe des fibres. Elles sont alors présentes dans toutes les directions et apparaissent en rouge sur la FIG.4.8. Dans la zone centrale qui conserve son caractère stochastique, les fibres tirées aléatoirement apparaissent en bleu.



**FIGURE 4.8** – Définition du modèle micro avec fibres stochastiques représentées par des traits épais bleus, et fibres déterministes représentées par des traits fins rouges

### 2.1.4 Modèle global

Finalement, l'équation du mouvement pour chaque particule  $i \in [1, N]$  du modèle micro s'écrit :

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{x}_i(t)}{dt^2} + \frac{\partial E^{int}}{\partial \mathbf{x}_i} = \mathbf{f}_i^{ext}(t) \quad (4.10)$$

$$I_i \frac{d^2 \theta_i(t)}{dt^2} + \frac{\partial E^{int}}{\partial \theta_i} = 0 \quad (4.11)$$

avec  $E^{int} = \sum_i \sum_{j>i} (\phi_{ij} + \phi_{ij}^{fibre})$ . Après discrétisation, cette équation se met également sous forme globale matricielle :

$$\mathbf{M} \ddot{\mathbf{x}}(t) + \mathbf{f}^{int}(\mathbf{x}(t)) = \mathbf{f}^{ext}(t) \quad (4.12)$$

$$\mathbf{I} \ddot{\boldsymbol{\theta}}(t) + \mathbf{C}^{int}(\boldsymbol{\theta}(t)) = 0 \quad (4.13)$$

## 2.2 Modèle macro

En dehors des zones d'intérêt qui subissent les sollicitations extrêmes, le matériau à un comportement globalement élastique. Il est donc peu pertinent d'utiliser le modèle micro capable de représenter les phénomènes de décohésion. Dans ce cadre, un modèle continu classique nettement moins coûteux est mis en place. L'objectif de cette section est de paramétrer le modèle continu afin qu'il soit compatible avec le comportement macroscopique du modèle micro.

### 2.2.1 Modèle continu local

Un modèle continu local semblable à ceux utilisés dans les chapitres précédents est considéré. Le comportement associé est isotrope, élastique et linéaire. Une fois discrétisé au moyen de l'espace d'approximation  $\mathcal{V}^h(\Omega)$ , avec  $h$  le paramètre de discrétisation, le problème se met sous la forme :

$$\mathbf{M}^h \ddot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{K}^h \mathbf{u}(t) = \mathbf{f}^{h,ext}(t) \quad (4.14)$$

où la matrice de raideur  $\mathbf{K}^h$  est caractérisée par les paramètres matériau  $E$  et  $\nu$ .



### 2.2.2 Choix des paramètres matériau

Le choix des paramètres matériau  $E$ ,  $\nu$  et  $\rho$  nécessaires à la mise en place du modèle macro doivent permettre de traduire au mieux le comportement macroscopique du modèle micro. En effet, si les deux modèles ne sont pas compatibles à cette échelle, il est alors inutile de chercher à les coupler sans générer de phénomènes parasites. Dans un premier temps on néglige la présence des fibres dans le domaine macro. Les propriétés mécaniques de la matrice de béton seront alors utilisées :

- la masse volumique  $\rho = 5000 \text{ kg.m}^{-3}$ ,
- le module d'Young  $E = 40 \text{ GPa}$ ,
- le coefficient de Poisson  $\nu = 0,2$ .

Dans [Delaplace, 2008] on trouve une démarche pour identifier les paramètres matériau  $E$  et  $\nu$  du matériau équivalent à partir d'essais de calibration effectués sur un volume élémentaire représentatif (VER) du modèle micro.

## 2.3 Interfaces

L'interface est la zone critique permettant de connecter le modèle micro au modèle macro. Dans un premier temps, le raccord mis en place entre les deux modèles et les précautions prises pour créer les différentes géométries sont détaillés. Par la suite les incompatibilités micro/macro et locale/non-locale sont traitées au niveau de l'interface grâce aux méthodes développées dans les Chapitres 2 et 3.

### Définition du raccord

Un raccord en vitesse est appliqué entre les nœuds d'interface du modèle macro et le centre des particules d'interface du modèle micro. Pour éviter les problèmes de conformité entre l'interface régulière du modèle macro et la position irrégulière des particules d'interface du modèle micro (voir la FIG.4.9), la fenêtre de tirage du centre des particules d'interfaces est calibrée pour que leur position coïncide avec l'interface du modèle macro.

Le modèle macro chevauche légèrement le modèle micro sur la largeur d'une demi particule. Le matériau est donc représenté deux fois dans cette zone, pour corriger cet effet la masse  $m_i$  et l'inertie  $I_i$  associées à chaque particule de l'interface sont divisées par deux. Le problème couplé associé aux équations (4.12) et (4.14) s'écrit donc :

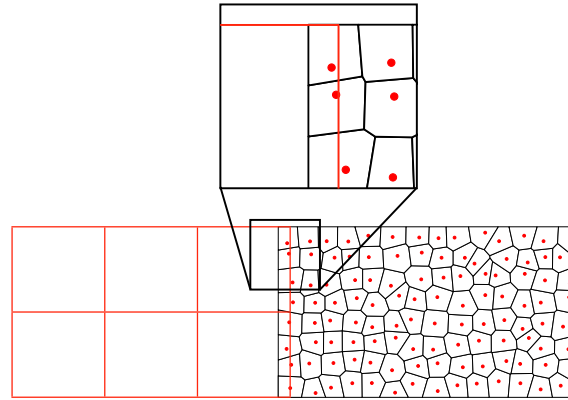
$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{x}}(t) + \mathbf{f}^{int}(\mathbf{x}(t)) = \mathbf{f}^{ext}(t) - \mathbf{C}^T \boldsymbol{\mu}(t) \quad (4.15)$$

$$\mathbf{I}\ddot{\boldsymbol{\theta}}(t) + \mathbf{C}^{int}(\boldsymbol{\theta}(t)) = \mathbf{0} \quad (4.16)$$

$$\mathbf{M}^h \ddot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{K}^h \mathbf{u}(t) = \mathbf{f}^{h,ext}(t) - \mathbf{C}^{h,T} \boldsymbol{\mu}(t) \quad (4.17)$$

$$\mathbf{C}\dot{\mathbf{x}}(t) + \mathbf{C}^h \dot{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{0} \quad (4.18)$$

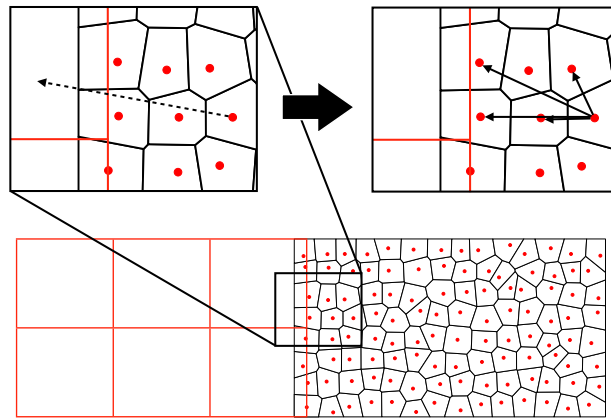
avec  $\boldsymbol{\mu}(t)$  le multiplicateur de Lagrange défini sur l'espace des particules de l'interface du modèle micro.



**FIGURE 4.9** – Exemple de géométrie non conforme à l'interface

### Traitement des incompatibilités

Les fibres qui sortent du domaine micro pour aller dans le domaine macro, comme illustré FIG.4.10, ne peuvent pas être supprimées. En effet cela fragiliserait artificiellement l'interface entre les deux modèles.



**FIGURE 4.10** – Utilisation de l'approximation NL2L-loc à l'interface entre les deux modèles

Afin de prendre en compte ces fibres, sans générer d'incompatibilités de type local/non-local, l'approximation NL2L-loc du chapitre 2 est utilisée pour reconstruire l'énergie de l'interaction associée. Cette correction intervient directement dans la définition de l'énergie intérieure  $E^{int}$  et donc dans la matrice de raideur  $\mathbf{K}$  associée.

La seconde incompatibilité résulte de l'impossibilité du modèle macro à représenter les phénomènes microscopiques. Une PML sélective est mise en place à proximité de l'interface. C'est le projecteur rigide (voir le Chapitre 3 section 3.3) qui est utilisé afin de

dissocier les quantités micro et macro. L'équation (4.15) devient :

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{x}}(t) + 2f\mathbf{M}\mathbf{P}_m\dot{\mathbf{x}}(t) + f^2\mathbf{M}\mathbf{P}_m\mathbf{x}(t) + \mathbf{f}^{int}(\mathbf{x}(t)) = \mathbf{f}^{ext}(t) - \mathbf{C}^T\boldsymbol{\mu}(t) \quad (4.19)$$

On rappelle que le projecteur  $\mathbf{P}_m$  est défini par patch. Chaque patch correspond à un ensemble de particules de béton de la taille d'un élément fini du modèle macro (voir les FIG.3.8 et 3.11).

### 3 Applications

#### 3.1 Résolution

L'initialisation permet de définir les conditions initiales au pas de temps  $n = 0$  correspondant à l'instant  $t = 0$ . Les déplacements et les vitesses initiales sont donnés par les relations suivantes :

$$\begin{cases} \mathbf{u}_0 = \mathbf{u}(t = 0) \\ \dot{\mathbf{u}}_0 = \dot{\mathbf{u}}(t = 0) \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \mathbf{x}_0 = \mathbf{x}(t = 0) \\ \dot{\mathbf{x}}_0 = \dot{\mathbf{x}}(t = 0) \end{cases} \quad (4.20)$$

Les accélérations sont obtenues par :

$$\ddot{\mathbf{u}}_0 = \mathbf{M}^{h-1} \left( -\mathbf{K}^h \mathbf{u}_0 + \mathbf{f}_0^{h,ext} \right) \quad \text{et} \quad \ddot{\mathbf{x}}_0 = \mathbf{M}^{-1} \left( -\mathbf{K} \mathbf{x}_0 + \mathbf{f}_0^{ext} \right) \quad (4.21)$$

Un algorithme itératif permet de définir l'évolution du problème sur les  $N$  pas de temps, les différentes étapes le composant sont décrites dans le TAB.4.1. L'algorithme est défini de façon à ce qu'il soit le plus explicite possible (pas d'inversion de matrice) et qu'il permette de paralléliser les calculs sur chaque sous-domaine.

Dans un premier temps, de l'étape  $n.1$  à  $n.4$ , les évolutions libres des vitesses et des accélérations annotées d'un exposant  $*$  sont calculées. Ces opérations peuvent être réalisées en parallèle pour chaque modèle. De plus si la matrice de masse  $\mathbf{M}^h$  du modèle macro est diagonalisée, tous les calculs de cette première phase sont explicites. L'utilisation d'une prédiction de vitesse à l'étape  $n.2$  permet de conserver un calcul explicite de l'accélération à l'étape  $n.3$ .

Le seul calcul non parallélisable et non explicite a lieu à l'étape  $n.5$ . Il est alors nécessaire d'inverser l'opérateur  $\mathbf{H}$ , du problème condensé à l'interface, il s'écrit :

$$\mathbf{H} = \mathbf{C}^h \mathbf{M}^{h-1} \mathbf{C}^{hT} + \mathbf{C} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{C}^T \quad (4.22)$$

---

|                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Pour $n=1$ à $N$ |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| étape $n.1$      | $\begin{cases} \mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \Delta t \dot{\mathbf{u}}_n + \frac{\Delta t^2}{2} \ddot{\mathbf{u}}_n \\ \mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \Delta t \dot{\mathbf{x}}_n + \frac{\Delta t^2}{2} \ddot{\mathbf{x}}_n \end{cases}$                                                                                                            |
| étape $n.2$      | $\dot{\mathbf{x}}_{n+1}^p = \dot{\mathbf{x}}_n + \frac{\Delta t}{2} \ddot{\mathbf{x}}_n$                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| étape $n.3$      | $\begin{cases} \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^* = \mathbf{M}^{h-1} \left( -\mathbf{K}^h \mathbf{u}_{n+1} + \mathbf{f}_{n+1}^{h,ext} \right) \\ \ddot{\mathbf{x}}_{n+1}^* = -2f\mathbf{P}_m \dot{\mathbf{x}}_{n+1}^p - f^2 \mathbf{P}_m \mathbf{x}_{n+1} + \mathbf{M}^{-1} \mathbf{f}^{int}(\mathbf{x}_{n+1}) + \mathbf{M}^{-1} \mathbf{f}_{n+1}^{ext} \end{cases}$ |
| étape $n.4$      | $\begin{cases} \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^* = \dot{\mathbf{u}}_n + \frac{\Delta t}{2} (\ddot{\mathbf{u}}_n + \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^*) \\ \dot{\mathbf{x}}_{n+1}^* = \dot{\mathbf{x}}_{n+1}^p + \frac{\Delta t}{2} \ddot{\mathbf{x}}_{n+1}^* \end{cases}$                                                                                                      |
| étape $n.5$      | $\mu_{n+1} = \frac{2}{\Delta t} \mathbf{H}^{-1} (\mathbf{C}^h \dot{\mathbf{u}}_{n+1}^* + \mathbf{C} \dot{\mathbf{x}}_{n+1}^*)$                                                                                                                                                                                                                              |
| étape $n.6$      | $\begin{cases} \ddot{\mathbf{u}}_{n+1} = \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}^* - \mathbf{M}^{h-1} \mathbf{C}^{hT} \mu_{n+1} \\ \ddot{\mathbf{x}}_{n+1} = \ddot{\mathbf{x}}_{n+1}^* - \mathbf{M}^{-1} \mathbf{C}^T \mu_{n+1} \end{cases}$                                                                                                                                |
| étape $n.7$      | $\begin{cases} \dot{\mathbf{u}}_{n+1} = \dot{\mathbf{u}}_n + \frac{\Delta t}{2} (\ddot{\mathbf{u}}_n + \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}) \\ \dot{\mathbf{x}}_{n+1} = \dot{\mathbf{x}}_{n+1}^p + \frac{\Delta t}{2} \ddot{\mathbf{x}}_{n+1} \end{cases}$                                                                                                              |
| Fin Pour         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |

---

TABLE 4.1 – Algorithme de résolution

Finalement, les actualisations des vitesses et des accélérations à l'étape  $n.6$  et  $n.7$  peuvent également être menées en parallèle sur chaque sous-domaine et correspondent uniquement à des calculs explicites.

Remarque : le schéma d'intégration de l'algorithme est un schéma de Newmark aux différences centrées :  $\beta = 0$  et  $\gamma = 0,5$ .

### 3.2 Résultats

Le comportement du béton fibré est simulé dans un cas dynamique en 2D. Les propriétés des différents matériaux le constituant, béton et fibres, sont les mêmes que celles définies précédemment. On considère un domaine d'étude rectangulaire  $\Omega$  de longueur  $L_x$ , de largeur  $L_y$  et d'épaisseur  $H$ , tel que :

- $L_x = 240.10^{-2}\text{m}$  ;
- $L_y = 30.10^{-2}\text{m}$  ;
- $H = 1.10^{-2}\text{m}$ .

Trois sous-domaines partitionnent le domaine de définition  $\Omega$ . Dans le sous-domaine central (région d'intérêt) c'est le modèle micro qui modélise le matériau sur une longueur

$L_{micro} = \frac{L_x}{4}$ . Le modèle macro est utilisé sur les deux sous-domaines latéraux de longueur  $L_{macro} = \frac{3L_x}{8}$ .

La grille partitionnant le domaine microscopique a pour pas  $l_x$  selon  $e_x$  et  $l_y$  selon  $e_y$ , avec  $l_x = l_y = H$ . Le paramètre  $a$  qui caractérise la fenêtre de tirage du centre des particules est fixé à 0,5. Le taux de fibre  $\tau_f$  par grain de béton est fixé à 1 et utilise les  $n_f = 16$  combinaisons définies précédemment.

Le paramètre de discrétisation  $h$  caractérisant l'espace d'approximation dans les sous-domaines macroscopique est fixé à  $10 \cdot 10^{-2} \text{m}$ . Ceci donne pour chaque sous-domaine macroscopique 3 éléments dans la largeur et 9 éléments dans la longueur. La FIG.4.11 permet d'illustrer la géométrie du modèle obtenu.

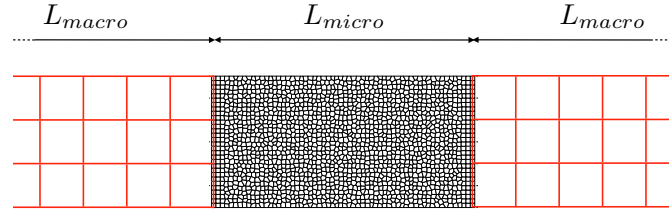


FIGURE 4.11 – Modélisation multiéchelle d'un béton fibré en 2D

Afin de répondre au critère de stabilité du schéma d'intégration, il est nécessaire d'utiliser un pas de temps  $\Delta t$  inférieur au pas de temps critique  $\Delta t_c$ . Ce dernier est caractérisé par la plus grande pulsation propre  $\omega_c$  du modèle, tel que :

$$\omega_c^2 \Delta t_c^2 = 4 \quad (4.23)$$

Le pas de temps critique est logiquement imposé par le modèle micro. Il est possible d'estimer  $\omega_c$  à l'aide de la relation suivante :

$$\omega_c \approx \max_{(i,j) \in [1;N]^2} 2 \sqrt{\frac{E_b S_{ij}}{l_{ij} m_i}} \quad (4.24)$$

Pour ne pas avoir à itérer sur les  $N$  particules du modèle micro, on note que :

$$S_{ij} \approx H^2, \quad l_{ij} \approx H \quad \text{et} \quad m_i \approx \rho H^3 \quad (4.25)$$

À partir des équations (4.23), (4.24) et (4.25), on obtient un ordre de grandeur du pas de temps critique  $\Delta t_c$  :

$$\Delta t_c \sim \sqrt{\frac{\rho H^2}{E_b}} \quad (4.26)$$

L'application numérique de (4.26) donne  $\Delta t_c \sim 3,5355.10^{-6}$ s. Étant donné la disparité dans la taille des éléments et dans le but de conserver une marge suffisante,  $\Delta t$  est fixé à  $1.10^{-6}$ s.

Les derniers paramètres à fixer sont la taille de la PML sélective ainsi que le coefficient d'amortissement  $f$  associé. La PML sélective est définie sur la largeur de deux éléments finis du modèle macro, la largeur  $L_{\text{filtre}}$  vaut donc  $2h$ . La valeur de  $f$  optimale peut être définie à partir de la relation (3.51) :

$$f > \frac{-\ln(0,01)}{2L_{\text{filtre}}} \sqrt{\frac{E_b}{\rho}} \quad (4.27)$$

L'application numérique de (4.27) donne  $f > 32500 \text{rad.s}^{-1}$ .

### 3.2.1 Ondes élastiques

Le modèle est testé pour évaluer le comportement de la PML sélective en 2D dans le cas de propagation d'ondes élastiques. Différentes ondes de compression, c.-à-d. longitudinales, ainsi que des ondes de cisaillement, c.-à-d. transversales, sont initiées afin d'étudier leur transfert d'un modèle à l'autre.

#### Ondes longitudinales

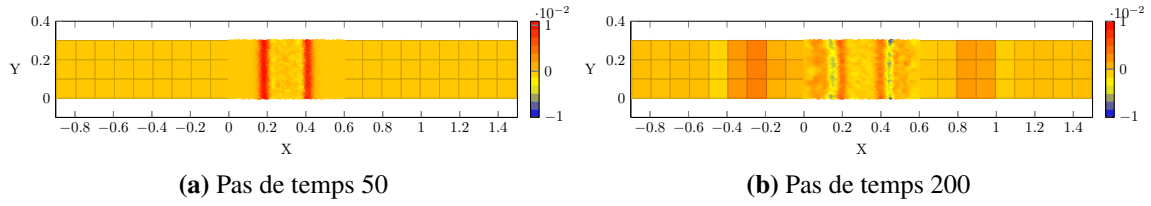
Les conditions initiales en déplacement sont imposées afin de générer une onde longitudinale en direction de chacune des interfaces. La position  $\mathbf{x}_{i0}$  de chaque particule  $i \in [1; N]$  à  $t = 0$  est donnée par :

$$\mathbf{x}_{i0} = \begin{cases} A_p \left( \cos \left( \pi \frac{2\mathbf{X}_i \cdot \mathbf{e}_x - L_x}{\lambda} \right) + 1 \right) \mathbf{e}_x & \text{si } \left| \mathbf{X}_i \cdot \mathbf{e}_x - \frac{L_x}{2} \right| \leq \frac{\lambda}{2} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.28)$$

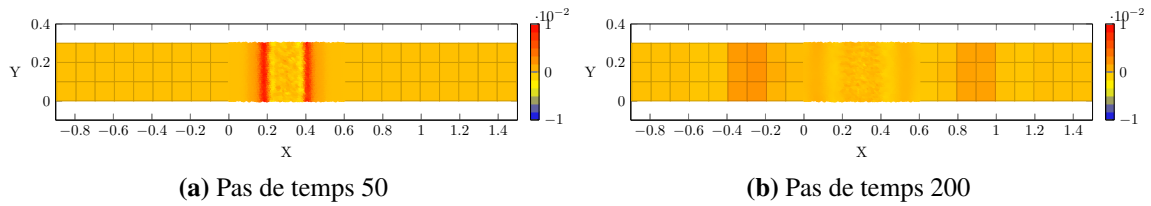
avec  $A_p$  l'amplitude de l'onde et  $\lambda$  la longueur d'onde. En faisant varier la valeur de  $\lambda$ , il est possible d'initier aussi bien des ondes micro que la PML sélective doit absorber que des ondes macro transmissibles au modèle macro.

Plusieurs exemples de propagation d'onde avec ou sans PML sélective sont illustrés sur les figures suivantes pour des ondes de longueur d'onde  $\lambda = 8H$  et  $\lambda = 48H$ .

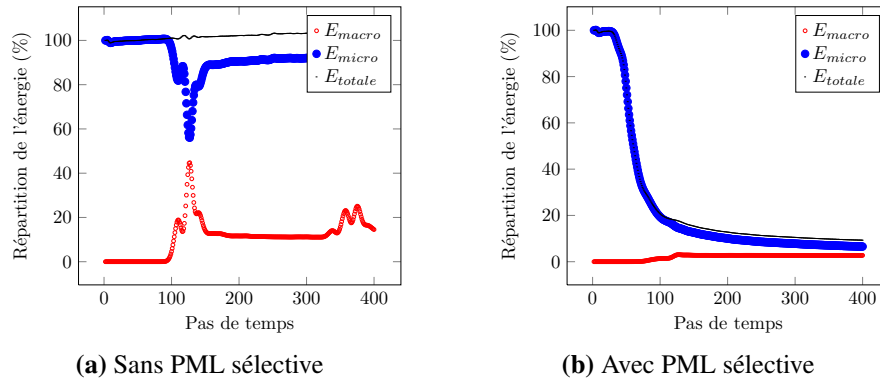
Sur les FIG.4.12 et 4.13 sont représentées des snapshots aux pas de temps 50 et 200 de la composante suivant  $\mathbf{e}_x$  du champ de déplacement avec  $\lambda = 8H$ . Ces pas de temps correspondent respectivement à un instant où la double onde longitudinale n'a atteint aucune des deux interfaces micro/macro et à un instant après que cette même onde ait franchi chacune des deux interfaces. Il apparaît sur la FIG.4.12b que l'onde s'est fortement réfléchiée, presque toute l'énergie initiale reste piégée dans le domaine micro sur la FIG.4.14.



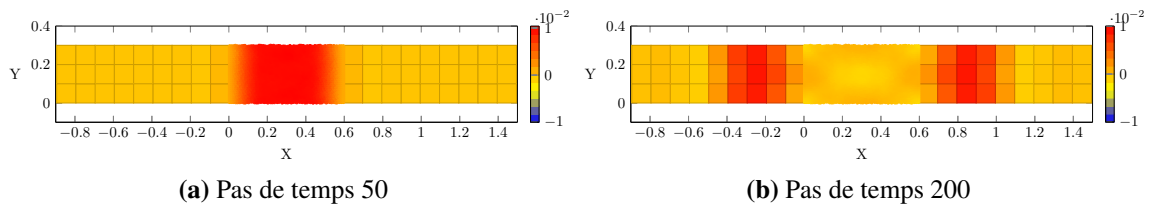
**FIGURE 4.12** – Composante suivant  $e_x$  du champ de déplacement sans PML sélective pour une onde longitudinale de longueur d'onde  $\lambda = 8H$



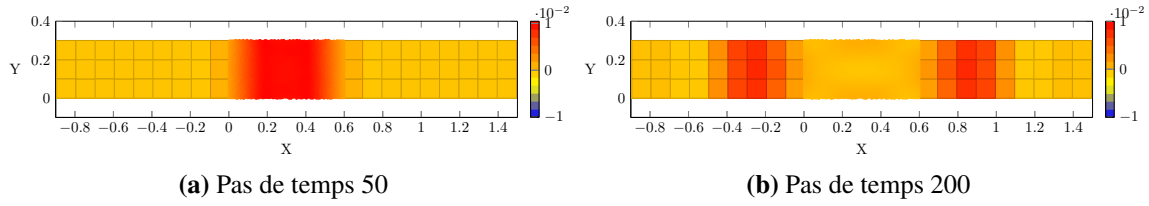
**FIGURE 4.13** – Composante suivant  $e_x$  du champ de déplacement avec PML sélective pour une onde longitudinale de longueur d'onde  $\lambda = 8H$



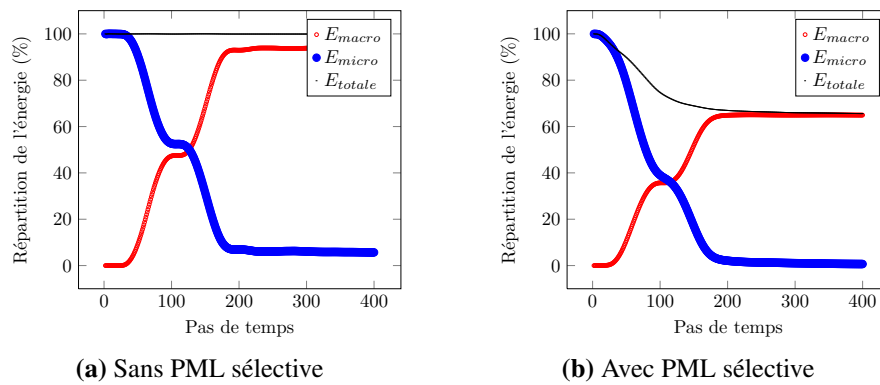
**FIGURE 4.14** – Répartition de l'énergie dans le temps pour une onde longitudinale de longueur d'onde  $\lambda = 8H$



**FIGURE 4.15** – Composante suivant  $e_x$  du champ de déplacement sans PML sélective pour une onde longitudinale de longueur d'onde  $\lambda = 48H$



**FIGURE 4.16** – Composante suivant  $e_x$  du champ de déplacement avec PML sélective pour une onde longitudinale de longueur d'onde  $\lambda = 48H$



**FIGURE 4.17** – Répartition de l'énergie dans le temps pour une onde longitudinale de longueur d'onde  $\lambda = 48H$

Au contraire sur la FIG.4.13a, il n'y a presque pas de réflexion lorsque la PML sélective est mise en place. Cette dernière a en effet dissipé l'énergie issue de la double onde longitudinale (voir FIG.4.14).

La même démarche est reproduite avec un signal de longueur d'onde  $\lambda = 48H$ . Les pas de temps 50 et 200 sont de nouveau représentés sur les FIG.4.15 et 4.16. Dans les deux cas, avec ou sans PML, aucune réflexion n'apparaît comme l'indique la FIG.4.17.

Finalement les résultats observés en 1D se confirment en 2D dans le cas des ondes longitudinales. La PML sélective est capable de dissiper efficacement les ondes longitudinales micro et de transmettre les ondes longitudinales macro (cependant elles sont partiellement dissipées à hauteur de 20% de l'énergie initiale).

## Ondes transversales

Les conditions initiales en déplacement sont modifiées afin de générer une double onde transversale en direction de chacune des interfaces. La position  $x_{i0}$  de chaque parti-

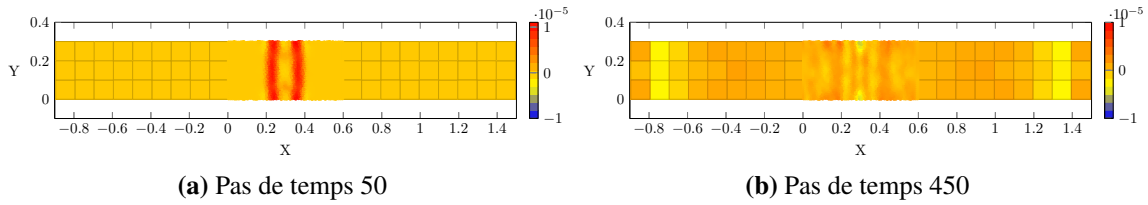


cule  $i \in [1; N]$  à  $t = 0$  est donnée par :

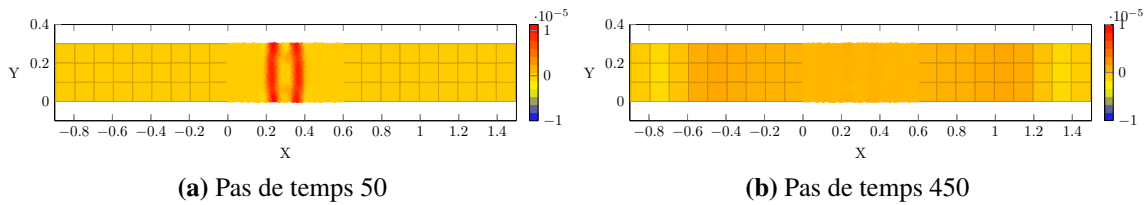
$$\mathbf{x}_{i0} = \begin{cases} A_p \left( \cos \left( \pi \frac{2\mathbf{X}_i \cdot \mathbf{e}_x - L_x}{\lambda} \right) + 1 \right) \mathbf{e}_y & \text{si } \left| \mathbf{X}_i \cdot \mathbf{e}_x - \frac{L_x}{2} \right| \leq \frac{\lambda}{2} \\ \mathbf{0} & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.29)$$

avec  $A_p$  l'amplitude de l'onde et  $\lambda$  la longueur d'onde.

Comme précédemment, plusieurs exemples de propagation d'onde avec ou sans PML sélective sont illustrés sur les figures suivantes pour des ondes de longueur d'onde  $\lambda = 10H$  et  $\lambda = 48H$ .



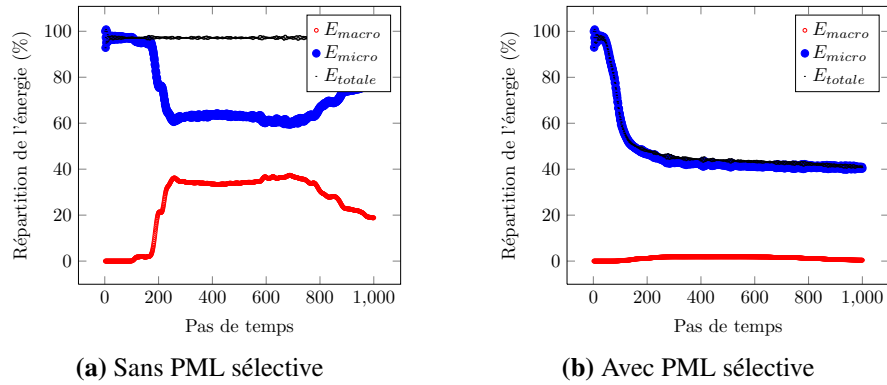
**FIGURE 4.18** – Composante suivant  $\mathbf{e}_y$  du champ de déplacement sans PML sélective pour une onde transversale de longueur d'onde  $\lambda = 10H$



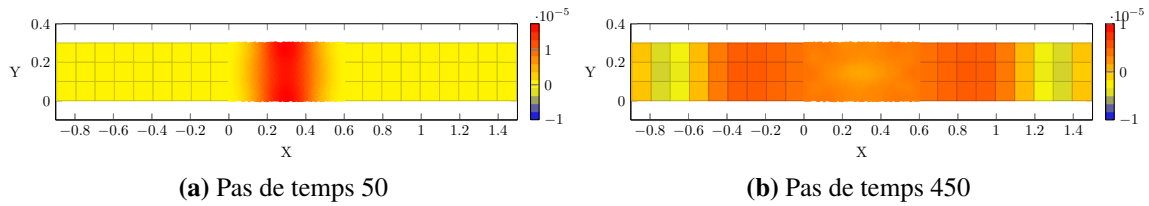
**FIGURE 4.19** – Composante suivant  $\mathbf{e}_y$  du champ de déplacement avec PML sélective pour une onde transversale de longueur d'onde  $\lambda = 10H$

Dans le premier cas de figure, il s'agit d'une onde transversale micro de longueur d'onde  $\lambda = 10H$ . Le comportement avec et sans PML sélective est alors similaire à celui observé pour une onde longitudinale micro. La PML sélective permet en effet de réduire drastiquement les réflexions aux interfaces micro/macro. La principale différence est la vitesse de propagation des ondes qui est beaucoup plus lente dans le cas de l'onde transversale. De ce fait, les seconds snapshots des FIG.4.21 et 4.22 sont réalisés au pas de temps 450 au lieu de 200.

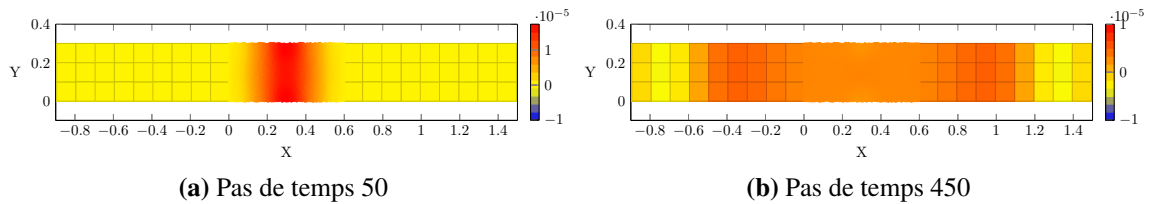
La propagation d'une onde transversale macro de longueur d'onde  $\lambda = 48H$  qui est représentée sur les FIG.4.21 et 4.22 est similaire à celle d'une onde longitudinale macro. Il n'y a aucune réflexion que ce soit avec ou sans la PML sélective. Cependant



**FIGURE 4.20** – Répartition de l'énergie dans le temps pour une onde transversale de longueur d'onde  $\lambda = 10H$

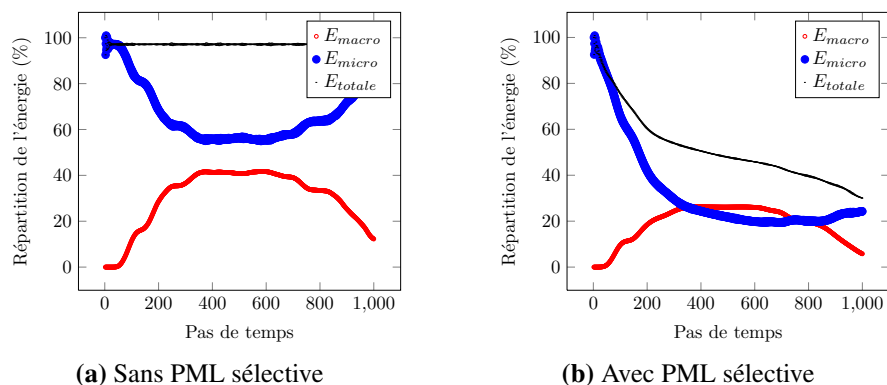


**FIGURE 4.21** – Composante suivant  $e_y$  du champ de déplacement sans PML sélective pour une onde transversale de longueur d'onde  $\lambda = 48H$



**FIGURE 4.22** – Composante suivant  $e_y$  du champ de déplacement avec PML sélective pour une onde transversale de longueur d'onde  $\lambda = 48H$

l'effet dissipatif résiduel qui agit sur les ondes macro a plus d'impact dans le cas d'une onde transversale que longitudinale (FIG.4.23). La vitesse de propagation des ondes transversales étant plus faible, l'onde passe plus de temps dans la PML et subit donc plus longtemps l'effet dissipatif de la PML sélective.



**FIGURE 4.23** – Répartition de l'énergie dans le temps pour une onde transversale de longueur d'onde  $\lambda = 48H$

## 4 Bilan du chapitre

Ce chapitre a permis de mettre en place une démarche de modélisation multi-échelle d'un béton fibré. Après avoir défini chacune des deux échelles de modèles, la PML sélective ainsi que l'approximation NL2L-loc ont été introduites pour traiter les différentes incompatibilités de modèles. Les résultats sont concluants et montrent qu'il est possible dans le cas d'onde élastique, de s'affranchir des réflexions parasites habituellement inhérentes à l'utilisation de modèles multi-échelles en dynamique. Il est donc possible de l'employer pour des problèmes présentant des chargements plus complexes tels que des cas d'impact.

# Conclusions et perspectives

Les travaux réalisés dans le cadre de cette thèse, et résumés au sein de ce rapport, ont eu pour but de simuler des phénomènes localisés en dynamique transitoire dans des structures de grande dimension. Les modèles multi-échelles sont de plus en plus employés dans ce type de contexte, mais peuvent présenter des phénomènes parasites tels que des réflexions d'onde. Les travaux présentés ont permis de mettre en avant de nouvelles approches permettant de s'affranchir de tels phénomènes.

Le premier des quatre chapitres de ce rapport a contribué à édifier un état des lieux des méthodes multi-échelles en temps et en espace. Il a été mis en avant que la plupart de ces modèles font apparaître des réflexions parasites au niveau des interfaces entre modèles. Une deuxième revue sur les méthodes de dissipation y a été décrite afin de fournir des outils permettant de résoudre ce problème de réflexions parasites. Le choix d'utiliser un modèle intermédiaire entre les deux échelles s'est imposé afin de séparer les différentes sources d'incompatibilités.

Le deuxième chapitre a traité de la première incompatibilité de type local/non-local entre un modèle discret non-local et discret local équivalent. Les travaux ont été décrits dans le formalisme de la *Quasi-Continuum method* et ont conduit à définir le modèle discret local c.-à-d. le modèle intermédiaire. Le principe d'approximation de l'énergie géométriquement consistante a alors été introduit pour obtenir un modèle couplé local/non-local sans "ghost forces". Plusieurs solutions ont été proposées ce qui a amené à la sélection du schéma NL2L-loc, seul à même capable de montrer des résultats satisfaisants à la fois en statique et en dynamique. Cependant des applications dynamiques ont mis en évidence que ce principe n'était pas suffisant pour réduire les phénomènes de réflexions parasites.

La seconde incompatibilité de type micro/macro, traité dans le troisième chapitre, a nécessité d'introduire une zone filtrante au sein du modèle micro. Il s'agissait de dissiper les phénomènes de réflexion d'onde dus à l'incapacité du modèle macro à représenter les phénomènes micro. Après avoir défini un critère pour séparer les événements micro et macro à l'aide de différents projecteurs, une nouvelle PML sélective a été développée pour dissiper les phénomènes micro. Celle-ci s'est bien révélée absorbante pour les phénomènes micro et perméable pour les phénomènes macro.

Le dernier chapitre a été l'occasion de mettre en œuvre les nouvelles approches de ces travaux sur des cas plus complexes et plus proches des problématiques industrielles. Le cas étudié est celui d'un béton fibré pour lequel un modèle discret non-local est nécessaire afin de représenter les mécanismes de dégradation. La mise en œuvre de

l'approximation NL2L-loc et la PML sélective ont montré qu'il était alors possible de réduire les réflexions parasites à l'interface avec un modèle continu local.

Les perspectives de recherche induites par ces travaux sont nombreuses. Il existe en effet d'autres approximations de l'énergie géométriquement consistantes, seulement deux ont été étudiées ici et elles ont déjà pu mettre en évidence que leurs comportements étaient sensiblement différents en dynamique. Il est donc possible qu'une autre approximation puisse éventuellement donner de meilleurs résultats que l'approximation NL2L-loc. De plus, il serait intéressant d'utiliser ces nouvelles approximations dans des codes dédiés existants tel que le QC code (<http://qcmethod.org>) de façon à traiter des problèmes plus complexes en 2D et en 3D.

De même la formulation de la PML sélective proposée laisse beaucoup de possibilités sur le choix du projecteur macro ainsi que sur la façon de la disposer dans le problème. Un projecteur basé sur les ondelettes [Mehraeen et Chen, 2004] peut être une piste prometteuse car il est défini à partir de fonctions plus locales que les modes propres de la structure. Il serait également intéressant de mettre en place la PML sélective dans d'autres contextes de changement d'échelle. Le passage d'un modèle hétérogène vers un modèle homogène équivalent [Capdeville *et al.*, 2010] définit ainsi un autre exemple de changement d'échelle (échelle d'homogénéisation). Les applications sont donc nombreuses par rapport aux quelques exemples qui ont pu être traités dans ce rapport.

Finalement, les travaux réalisés dans le cadre de cette thèse ont permis d'explorer un certain nombre de difficultés inhérentes à l'utilisation de modèle multi-échelle en dynamique transitoire. Plusieurs avancées importantes ont été effectuées dans le contrôle et la réduction des phénomènes de réflexions d'onde. Même si les exemples traités sont encore loin des cas industriels, ces premiers résultats montrent que les progrès attendus sont bien présents. De plus la définition de ces nouvelles méthodes est suffisamment générale pour s'adapter à une grande gamme de modèles continus, discrets... tout en permettant l'usage de schéma d'intégration implicite ou explicite.

# Annexe A

## Démonstrations

### 1 Démonstration de la Proposition (2.28) :

Les hypothèses déjà faites sur les énergies d'interaction permettent de satisfaire automatiquement la condition (2.17) dans le cas des particules  $k \in \mathcal{J}_e \cup \mathcal{J}_l$ . Seuls les cas des particules  $k \in \mathcal{J}_{q,nl} \cup \mathcal{J}_q$  doivent être traités, soit :

$$\sum_{(i,j) \in \mathcal{D}_{n,m}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) = 0 \quad ; \quad \mathcal{D}_{n,m} = \{(i,j) \setminus (|\mathbf{R}_{ij}| = R_n, \mathbf{R}_{ij} // \boldsymbol{\tau}_m)\}$$

Dans le but de simplifier les notations, on omet par la suite de préciser que  $(i,j) \in \mathcal{D}_{n,m}$ .

1) Dans un premier temps,  $k$  appartient à  $\mathcal{J}_{q,nl}$  :

$$\begin{aligned} & \sum_{(i,j)} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\ &= \sum_j \text{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_k(j) \frac{\partial \mathbf{r}_k(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) + \sum_{i \neq k} \sum_j \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Si  $i \neq k$ , alors :

$$\omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} = \begin{cases} \frac{\partial \mathbf{r}_i^e(j)}{\partial \mathbf{x}_k} & \text{si } j = k \text{ et } i \in \mathcal{J} \setminus \mathcal{J}_l \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Ainsi, cela induit :

$$\begin{aligned} & \sum_{(i,j)} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\ &= \sum_{j \in \mathcal{J} \setminus \mathcal{J}_l} \text{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^e(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) + \sum_{j \in \mathcal{J}_l} \text{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_k(j) \frac{\partial \mathbf{r}_k^q(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \quad (\text{A.3}) \\ &+ \sum_{i \in \mathcal{J} \setminus \mathcal{J}_l} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ik} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^e(k)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \end{aligned}$$

En considérant le fait que  $\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m = -\mathbf{R}_{jk} \cdot \boldsymbol{\tau}_m$  et  $\frac{\partial \mathbf{r}_k^e(j)}{\partial \mathbf{x}_k} = -\frac{\partial \mathbf{r}_j^e(k)}{\partial \mathbf{x}_k} = -1$ , l'équation (A.3) devient :

$$\sum_{(i,j)} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) = -2 \sum_{j \in \mathcal{J} \setminus \mathcal{J}_l} \text{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) + \sum_{j \in \mathcal{J}_l} \text{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_k(j) \frac{\partial \mathbf{r}_k^q(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \quad (\text{A.4})$$

De par la géométrie du réseau, il n'y a que deux indices  $j$  tels que  $|\mathbf{R}_{kj}| = R_n$  et  $\mathbf{R}_{kj} // \boldsymbol{\tau}_m$ . Deux cas doivent être distingués, le premier cas correspond à celui où les deux particules appartiennent à  $\mathcal{J} \setminus \mathcal{J}_l$  formant des directions qui s'opposent, ce qui signifie que :

$$\sum_{(i,j)} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) = 2 - 2 = 0 \quad (\text{A.5})$$

Le second cas est celui où l'une des deux particules appartient à  $\mathcal{J}_l$  et l'autre appartient à  $\mathcal{J} \setminus \mathcal{J}_l$ . Ici aussi, elles forment des directions qui s'opposent telles que :

$$\sum_{(i,j)} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) = 2 + \omega_k(j) \frac{\partial \mathbf{r}_k^q(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \quad (\text{A.6})$$

ce qui conduit à la condition :

$$\sum_{(i,j)} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) = 0 \Leftrightarrow \omega_k(j) = -2 \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^q(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right)^{-1} \quad (\text{A.7})$$

et implique (2.28).

2) Maintenant  $k$  appartient à  $\mathcal{J}_b$ . Pour simplifier la démonstration, seuls les cas 2D sont considérés. Sans perte de généralité, la direction de l'interface est supposée définie par  $\mathbf{e}_1$  et les coordonnées de la particule  $k$  sont notées  $(k, 0)$  dans le repère  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$  (voir la FIG.A.1). Soient  $\boldsymbol{\tau} = a\mathbf{e}_1 + b\mathbf{e}_2$  avec  $(a, b) \neq (0, 0) \in \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$  définissant  $R_n$  et  $\boldsymbol{\tau}_m$ . En

suivant les mêmes arguments que dans le cas 1), on a :

$$\begin{aligned}
& \sum_{(i,j)} \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&= \sum_j \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_k(j) \frac{\partial \mathbf{r}_k(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) + \sum_{i \neq k} \sum_{j \neq k} \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&+ \sum_i \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{ik} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(k) \frac{\partial \mathbf{r}_i(k)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&= 2 \sum_{j \in \mathcal{J}_e \cup \mathcal{J}_{q,nl}} \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^e(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) + \sum_{j \in \mathcal{J}_l \cup \mathcal{J}_q} \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^L(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&+ \sum_{i \neq k \in \mathcal{J}_l \cup \mathcal{J}_q} \sum_j \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^L(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&+ \sum_{i \in \mathcal{J}_{q,nl}} \sum_{j \in \mathcal{J}_l} \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( -2 \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^q(j)}{\partial \mathbf{x}_i} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{r}_i^q(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right)
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Les termes sans contributions ont été supprimés.

Si  $b > 0$ , le premier terme du second membre de (A.8) s'écrit :

$$2 \sum_{j \in \mathcal{J}_e \cup \mathcal{J}_{q,nl}} \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^e(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) = -2 \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{(k,0)(k-a,-b)} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) = 2 \tag{A.9}$$

et le deuxième terme s'écrit :

$$\sum_{j \in \mathcal{J}_l \cup \mathcal{J}_q} \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^L(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) = -\operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{(k,0)(k+a,b)} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) (a+b) \tag{A.10}$$

avec  $\mathbf{R}_{(k,0)(k+a,b)} = a\mathbf{e}_1 + b\mathbf{e}_2$ . Cela conduit à :

$$\sum_{j \in \mathcal{J}_l \cup \mathcal{J}_b} \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^{CB}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) = -(a+b) \tag{A.11}$$

Si  $a \geq 0$ , le troisième terme du second membre de (A.8) s'écrit :

$$\begin{aligned}
& \sum_{i \neq k \in \mathcal{J}_l \cup \mathcal{J}_q} \sum_j \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^L(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&= \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{(k,1)(k-a,1-b)} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) b + \operatorname{sgn}(\mathbf{R}_{(k-1,0)(k-1+a,b)} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) a \\
&= -b + a
\end{aligned} \tag{A.12}$$



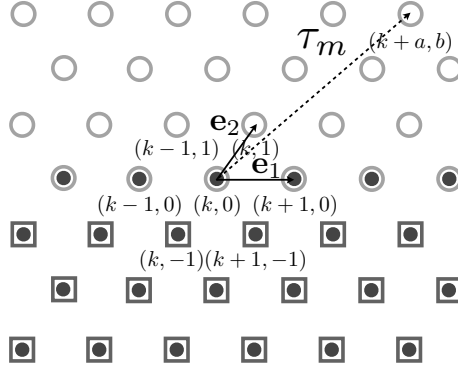


FIGURE A.1 – Système de coordonnées locales du réseau.

Le deuxième terme du second membre de (A.8) s'écrit :

$$\begin{aligned} & \sum_{i \in \mathcal{J}_{q, nl}} \sum_{j \in \mathcal{J}_l} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( -2 \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^q(j)}{\partial \mathbf{x}_i} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{r}_i^q(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\ &= 2 \sum_{p=-1}^{-b+1} \left[ \sum_n \left( \frac{\partial \mathbf{r}_{(k+n, p)}^q(k+n+a, p+b)}{\partial \mathbf{x}_{(k+n, p)}} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{r}_{(k+n, p)}^q(k+n+a, p+b)}{\partial \mathbf{x}_{(k, 0)}} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Soient deux propriétés des schémas de reconstruction :

$$\left( \frac{\partial \mathbf{r}_{(k+n, p)}^q(k+n+a, p+b)}{\partial \mathbf{x}_{(k+n, p)}} \right)^{-1} = \left( \frac{\partial \mathbf{r}_{(k, p)}^q(k+a, p+b)}{\partial \mathbf{x}_{(k, p)}} \right)^{-1} \quad \forall n \quad (\text{A.14})$$

et

$$\begin{aligned} \sum_n \frac{\partial \mathbf{r}_{(k+n, p)}^b(k+n+a, p+b)}{\partial \mathbf{x}_{(k, 0)}} &= \sum_{l_i \in \mathcal{J}_q} \alpha_{(k, p)}^{l_i}(k+a, p+b) \\ &= \frac{\partial \mathbf{r}_{(k, p)}^q(k+a, p+b)}{\partial \mathbf{x}_{(k, p)}} \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Ainsi, en combinant (A.13), (A.14) et (A.15), l'équation (A.13) devient :

$$\sum_{i \in \mathcal{J}_{q, nl}} \sum_{j \in \mathcal{J}_l} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( -2 \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^q(j)}{\partial \mathbf{x}_i} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{r}_i^q(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) = 2 \sum_{p=-1}^{-b+1} 1 = 2(b-1) \quad (\text{A.16})$$

En sommant tous les termes précédents, on en déduit :

$$\sum_{(i, j)} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) = 2 - (a+b) - b + a + 2(b-1) = 0 \quad (\text{A.17})$$

En conclusion, les particules de  $\mathcal{J}_q \cup \mathcal{J}_{q, nl}$  satisfont (2.17) ce qui signifie que l'approximation est géométriquement consistante (la preuve a été établie avec  $(a, b) \in \mathbb{Z}^+ \times \mathbb{Z}^{+*}$ , les autres cas peuvent être déduits en suivant la même démarche).

## 2 Démonstration du corollaire de conservation de l'énergie :

Pour simplifier la démonstration, celle-ci est limitée à des cas 2D et les notations et conventions de la démonstration précédente sont utilisées. Soit une particule de  $k \in \mathcal{J}_b$  et  $\mathcal{J}_k$  le sous-ensemble de particules dont les coordonnées s'écrivent  $(k, p)$  dans le repère  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ , avec  $p \in \mathbb{Z}$ .

Comme seule la pondération de l'énergie des particules  $i \in \mathcal{J}_{q,nl}$  qui interagissent avec des particules  $j \in \mathcal{J}_l$  est modifiée, la conservation de l'énergie doit être vérifiée uniquement pour les paires  $(i, j) \in \mathcal{D}_{n,m}^k = \mathcal{D}_{n,m} \cap [(\mathcal{J}_{q,nl} \cap \mathcal{J}_k) \times \mathcal{J}_l]$ , ce qui s'écrit :

$$\sum_{(i,j) \in \mathcal{D}_{n,m}^k} \omega_i(j) = \text{card}(\mathcal{D}_{n,m}^k) \quad (\text{A.18})$$

Pour  $\boldsymbol{\tau} = a\mathbf{e}_1 + b\mathbf{e}_2$  donné, on obtient :

$$\sum_{(i,j) \in \mathcal{D}_{n,m}^k} \omega_i(j) = \sum_{p=-1}^{-b+1} \omega_{(k,p)}(k+a, p+b) \quad (\text{A.19})$$

En utilisant (2.27) et (2.28), l'équation (A.19) devient :

$$\sum_{(i,j) \in \mathcal{D}_{n,m}^k} \omega_i(j) = \sum_{p=-1}^{-b+1} \frac{2}{\sum_{l_i \in \mathcal{J}_q} \alpha_{(k,p)}^{l_i}(k+a, p+b)} \quad (\text{A.20})$$

Les coordonnées de  $l_1 \in \mathcal{J}_b$  et de  $l_2 \in \mathcal{J}_b$  sont nécessairement de la forme  $(l, 0)$  et  $(l+1, 0)$ , avec  $l \in \mathbb{Z}$ , ce qui implique :

$$a = \alpha_{(k,p)}^{l_1}(k+a, p+b)(l-k) + \alpha_{(k,p)}^{l_2}(k+a, p+b)(l+1-k) \quad (\text{A.21})$$

$$b = \alpha_{(k,p)}^{l_1}(k+a, p+b)(-p) + \alpha_{(k,p)}^{l_2}(k+a, p+b)(-p) \quad (\text{A.22})$$

En combinant (A.20) et (A.22), on en déduit :

$$\sum_{(i,j) \in \mathcal{D}_{n,m}^k} \omega_i(j) = \sum_{p=-1}^{-b+1} 2 \frac{-p}{b} = b-1 \quad (\text{A.23})$$

D'autre part, il est clair que  $\text{card}(\mathcal{D}_{n,m}^k) = b-1$  ce qui conclut la démonstration.

### 3 Démonstration du corollaire (2.32) :

En suivant la même démarche que précédemment pour les particules  $k \in \mathcal{J}_{b_1}$  pour une interface plane, l'expression de  $\omega_k^{corr}(j)$  est obtenue en résolvant l'équation suivante :

$$\begin{aligned}
& \sum_{(i,j)} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&= 2 \sum_{j \in \mathcal{J}_e \cup \mathcal{J}_{q, nl} \cup \mathcal{J}_{q_2} \setminus \mathcal{J}_{q_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^e(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) + \sum_{j \in \mathcal{J}_{l_1} \cup \mathcal{J}_{q_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^L(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&+ \sum_{j \in \mathcal{J}_l \setminus \mathcal{J}_{l_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( -2 \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^{q_2}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right)^{-1} + \omega_k^{corr}(j) \right) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^{q_2}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&+ \sum_{i \in \mathcal{J}_{q, nl}} \sum_{j \in \mathcal{J}_{l_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( -2 \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^{q_1}(j)}{\partial \mathbf{x}_i} \right)^{-1} \right) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^{q_1}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&+ \sum_{i \neq k \in \mathcal{J}_{l_1} \cup \mathcal{J}_{q_1}} \sum_j \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^L(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&+ \sum_{i \in \mathcal{J}_{q_2} \setminus \mathcal{J}_{q_1}} \sum_{j \in \mathcal{J}_{l_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( -2 \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^{q_1}(j)}{\partial \mathbf{x}_i} \right)^{-1} + \omega_i^{corr}(j) \right) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^{q_1}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right)
\end{aligned} \tag{A.24}$$

Les termes sans contributions ont été supprimés.

Comme  $\left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^{q_2}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right)^{-1} \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^{q_2}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) = - \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^e(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right)$ , on en déduit :

$$\begin{aligned}
& \sum_{(i,j)} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&= 2 \sum_{j \in \mathcal{J} \setminus (\mathcal{J}_{l_1} \cup \mathcal{J}_{q_1})} \text{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^e(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) + \sum_{j \in \mathcal{J}_{l_1} \cup \mathcal{J}_{q_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^L(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&+ \sum_{i \neq k \in \mathcal{J}_{l_1} \cup \mathcal{J}_{q_1}} \sum_j \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^L(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) + \sum_{j \in \mathcal{J}_{l_2} \setminus \mathcal{J}_{l_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \omega_k^{corr}(j) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^{q_2}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&+ \sum_{i \in \mathcal{J}_{q, nl} \cup \mathcal{J}_{q_2} \setminus \mathcal{J}_{q_1}} \sum_{j \in \mathcal{J}_{l_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( -2 \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^{q_1}(j)}{\partial \mathbf{x}_i} \right)^{-1} \right) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^{q_1}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&+ \sum_{i \in \mathcal{J}_{q_2} \setminus \mathcal{J}_{q_1}} \sum_{j \in \mathcal{J}_{l_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \omega_i^{corr}(j) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^{q_1}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right)
\end{aligned} \tag{A.25}$$

En soustrayant (A.8), où une seule interface  $b_1$  est considérée, il est possible d'écrire la relation suivante :

$$\begin{aligned}
& \sum_{(i,j)} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( \omega_i(j) \frac{\partial \mathbf{r}_i(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&= \sum_{j \in \mathcal{J}_l \setminus \mathcal{J}_{l_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{kj} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \omega_k^{corr}(j) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_k^{q_2}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \\
&\quad - \left[ \sum_{i \in \mathcal{J}_l \setminus \mathcal{J}_{l_1}} \sum_{j \in \mathcal{J}_{l_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \left( -2 \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^{q_1}(j)}{\partial \mathbf{x}_i} \right)^{-1} \right) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^{q_1}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right) \right]^{(*)} \quad (\text{A.26}) \\
&\quad + \sum_{i \in \mathcal{J}_{q_2} \setminus \mathcal{J}_{q_1}} \sum_{j \in \mathcal{J}_{l_1}} \text{sgn}(\mathbf{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{\tau}_m) \omega_i^{corr}(j) \left( \frac{\partial \mathbf{r}_i^{q_1}(j)}{\partial \mathbf{x}_k} \right)
\end{aligned}$$

avec le terme  $(*)$  qui correspond au cas où la seconde interface  $q_2$  n'existe pas. Finalement, les conditions (2.17) et (A.26) concluent la démonstration.

À noter que la même vérification doit être effectuée pour les particules  $k \in \mathcal{J}_{q_2}$ , ce qui induit une condition similaire en intervertissant les indices 1 et 2.



## Annexe B

# Estimation d'erreur de modèle locale

### Résidu et quantité d'intérêt

Les notations suivantes sont définies :

$$\left\{ \begin{array}{l} a(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \frac{\partial E^e}{\partial \mathbf{x}_i}(\mathbf{x}) \\ a_0(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \frac{\partial E^{QC_0}}{\partial \mathbf{x}_i}(\mathbf{x}) \end{array} \right. \quad \text{et} \quad l(\mathbf{v}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \mathbf{f}_i^{ext} \quad (\text{B.1})$$

Les problèmes (2.35) et (2.36) associés au modèle de référence et approché s'écrivent alors :

$$\text{Trouver } \mathbf{x} \in \mathcal{U} \text{ tel que : } a(\mathbf{X}; \mathbf{V}) = l(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V} \quad (\text{B.2})$$

et

$$\text{Trouver } \mathbf{x}_0 \in \mathcal{U} \text{ tel que : } a_0(\mathbf{x}_0; \mathbf{v}) = l(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V} \quad (\text{B.3})$$

Le résidu  $R$  est défini à partir de (B.2), tel que :

$$R(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = l(\mathbf{v}) - a(\mathbf{x}; \mathbf{v}) \quad (\text{B.4})$$

Soit  $I(\mathbf{x})$  une quantité d'intérêt locale linéaire telle que :

$$I(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{f}_i^{adj} \mathbf{x}_i \quad (\text{B.5})$$

Elle est définie à partir d'un problème de minimisation trivial :

$$I(\mathbf{x}) = \min_{\mathbf{w} / a(\mathbf{w}; \mathbf{v}) = l(\mathbf{v}) \forall \mathbf{v}} I(\mathbf{w}) \quad (\text{B.6})$$

### Problème adjoint

Soit la fonctionnelle  $\mathcal{L}$ , telle que :

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}; \mathbf{p}) = I(\mathbf{w}) - [a(\mathbf{w}, \mathbf{p}) - l(\mathbf{p})] \quad (\text{B.7})$$

ce qui implique :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{w}, \mathbf{p}) = 0 \implies a(\mathbf{w}; \mathbf{p}) = l(\mathbf{p}) \quad \forall \mathbf{p} \quad (\text{B.8})$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{w}}(\mathbf{w}, \mathbf{p}) = 0 \implies a'(\mathbf{w}; \delta \mathbf{w}, \mathbf{p}) = I'(\mathbf{w}; \delta \mathbf{w}) \quad \forall \delta \mathbf{w} \quad (\text{B.9})$$

où (B.9) est le problème adjoint associé au problème de référence et à la quantité d'intérêt  $I(\mathbf{w})$ .

### Estimateur d'erreur locale

L'écart sur la quantité d'intérêt entre la solution de référence  $I(\mathbf{x})$  et approchée  $I(\mathbf{x}_0)$  doit être estimé. On a par un développement au 1<sup>er</sup> ordre :

$$I(\mathbf{x}) - I(\mathbf{x}_0) \approx I'(\mathbf{x}_0, \mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad (\text{B.10})$$

avec l'équation (B.9), (B.10) devient :

$$I(\mathbf{x}) - I(\mathbf{x}_0) \approx a'(\mathbf{x}_0; \mathbf{x} - \mathbf{x}_0, \mathbf{p}) \approx a(\mathbf{x}; \mathbf{p}) - a(\mathbf{x}_0; \mathbf{p}) \quad (\text{B.11})$$

Nous en déduisons alors :

$$I(\mathbf{x}) - I(\mathbf{x}_0) \approx l(\mathbf{p}) - (l(\mathbf{p}) - R(\mathbf{x}_0, \mathbf{p})) \quad (\text{B.12})$$

soit :

$$I(\mathbf{x}) - I(\mathbf{x}_0) \approx R(\mathbf{x}_0, \mathbf{p}) \quad (\text{B.13})$$

Comme il n'est pas envisageable d'utiliser le modèle de référence pour établir le calcul du résidu, le deuxième modèle approché avec  $E^{QC_{00}}$  est employé. Le calcul du champ adjoint  $p_{00}$  est également obtenu à partir du deuxième modèle approché. Finalement (B.13) devient :

$$I(\mathbf{x}) - I(\mathbf{x}_0) \approx R_{00}(\mathbf{x}_0, \mathbf{p}_{00}) \quad (\text{B.14})$$

## Annexe C

### Analyse de stabilité de la PML sélective

Pour résoudre (3.47), on utilise un schéma temporel de type Newmark, soit :

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_{n+1} &= \mathbf{u}_n + \Delta t \dot{\mathbf{u}}_n + \frac{\Delta t^2}{2} ((1 - 2\beta) \ddot{\mathbf{u}}_n + 2\beta \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}) \\ \dot{\mathbf{u}}_{n+1} &= \dot{\mathbf{u}}_n + \Delta t ((1 - \gamma) \ddot{\mathbf{u}}_n + \gamma \ddot{\mathbf{u}}_{n+1})\end{aligned}\quad (\text{C.1})$$

qui devient :

$$\begin{aligned}\mathbf{M} (\mathbf{u}_{n+1} - \beta \Delta t^2 \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}) &= \mathbf{M} \left( \mathbf{u}_n + \Delta t \dot{\mathbf{u}}_n + \frac{\Delta t^2}{2} (1 - 2\beta) \ddot{\mathbf{u}}_n \right) \\ \mathbf{M} (\dot{\mathbf{u}}_{n+1} - \gamma \Delta t \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}) &= \mathbf{M} (\dot{\mathbf{u}}_n + \Delta t (1 - \gamma) \ddot{\mathbf{u}}_n)\end{aligned}\quad (\text{C.2})$$

En considérant (3.47) au pas de temps  $n$  et  $n + 1$  sur les relations précédentes, on obtient :

$$\begin{aligned}\mathbf{M} \mathbf{u}_{n+1} + \beta \Delta t^2 (\mathbf{K} \mathbf{u}_{n+1} + 2f \mathbf{M} \mathbf{P}_m \dot{\mathbf{u}}_{n+1} + f^2 \mathbf{M} \mathbf{P}_m \mathbf{u}_{n+1}) \\ = \mathbf{M} (\mathbf{u}_n + \Delta t \dot{\mathbf{u}}_n) + \Delta t^2 \left( \beta - \frac{1}{2} \right) (\mathbf{K} \mathbf{u}_n + 2f \mathbf{M} \mathbf{P}_m \dot{\mathbf{u}}_n + f^2 \mathbf{M} \mathbf{P}_m \mathbf{u}_n) \\ \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}}_{n+1} + \gamma (\mathbf{K} \mathbf{u}_{n+1} + 2f \mathbf{M} \mathbf{P}_m \dot{\mathbf{u}}_{n+1} + f^2 \mathbf{M} \mathbf{P}_m \mathbf{u}_{n+1}) \\ = \mathbf{M} \dot{\mathbf{u}}_n + \Delta t (\gamma - 1) (\mathbf{K} \mathbf{u}_n + 2f \mathbf{M} \mathbf{P}_m \dot{\mathbf{u}}_n + f^2 \mathbf{M} \mathbf{P}_m \mathbf{u}_n)\end{aligned}\quad (\text{C.3})$$

Ce qui permet d'écrire le système suivant :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M} + \beta \Delta t^2 (\mathbf{K} + f^2 \mathbf{M} \mathbf{P}_m) & 2\beta \Delta t^2 f \mathbf{M} \mathbf{P}_m \\ \gamma \Delta t (\mathbf{K} + f^2 \mathbf{M} \mathbf{P}_m) & \mathbf{M} + 2\gamma \Delta t^2 f \mathbf{M} \mathbf{P}_m \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{n+1} \\ \dot{\mathbf{u}}_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{M} + \Delta t^2 \left( \beta - \frac{1}{2} \right) (\mathbf{K} + f^2 \mathbf{M} \mathbf{P}_m) & \Delta t \mathbf{M} + 2\Delta t^2 \left( \beta - \frac{1}{2} \right) f \mathbf{M} \mathbf{P}_m \\ \Delta t (\gamma - 1) (\mathbf{K} + f^2 \mathbf{M} \mathbf{P}_m) & \mathbf{M} + 2\Delta t (\gamma - 1) f \mathbf{M} \mathbf{P}_m \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_n \\ \dot{\mathbf{u}}_n \end{pmatrix}\quad (\text{C.4})$$



En utilisant la décomposition modale (3.25), (3.26) et les propriétés (3.23), (C.4) devient :

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 1 + \beta \Delta t^2 \omega_j^2 & 0 \\ \gamma \Delta t \omega_j^2 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} (\alpha_j)_{n+1} \\ (\dot{\alpha}_j)_{n+1} \end{pmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 + \Delta t^2 (\beta - \frac{1}{2}) \omega_j^2 & \Delta t \\ \Delta t (\gamma - 1) \omega_j^2 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} (\alpha_j)_n \\ (\dot{\alpha}_j)_n \end{pmatrix} \quad \text{if } j \geq p \\ \begin{bmatrix} 1 + \beta \Delta t^2 (\omega_j^2 + f^2) & 2\beta \Delta t^2 f \\ \gamma \Delta t (\omega_j^2 + f^2) & 1 + 2\gamma \Delta t^2 f \end{bmatrix} \begin{pmatrix} (\alpha_j)_{n+1} \\ (\dot{\alpha}_j)_{n+1} \end{pmatrix} &= \\ \begin{bmatrix} 1 + \Delta t^2 (\beta - \frac{1}{2}) (\omega_j^2 + f^2) & \Delta t + 2\Delta t^2 (\beta - \frac{1}{2}) f \\ \Delta t (\gamma - 1) (\omega_j^2 + f^2) & 1 + 2\Delta t (\gamma - 1) f \end{bmatrix} \begin{pmatrix} (\alpha_j)_n \\ (\dot{\alpha}_j)_n \end{pmatrix} &\quad \text{if } j \leq p + 1 \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

soit une relation de la forme :

$$\begin{pmatrix} (\alpha_j)_{n+1} \\ (\dot{\alpha}_j)_{n+1} \end{pmatrix} = \mathbf{R}_j \begin{pmatrix} (\alpha_j)_n \\ (\dot{\alpha}_j)_n \end{pmatrix} \quad (\text{C.6})$$

Comme  $\mathbf{R}_j$  est non-symétrique, le schéma est stable si ses racines  $\lambda_j^1$  et  $\lambda_j^2$  vérifient :

$$\begin{cases} |\lambda_j^1| \leq 1, |\lambda_j^2| \leq 1 & \text{if } \lambda_j^1 \neq \lambda_j^2 \\ |\lambda_j^1| = |\lambda_j^2| < 1 & \text{if } \lambda_j^1 = \lambda_j^2 \end{cases} \quad (\text{C.7})$$

En écrivant l'équation caractéristique  $\lambda^2 - 2A\lambda + B = 0$ , les conditions (C.7) deviennent :

$$\begin{cases} -1 \leq A \leq 1 \text{ et } 1 \pm 2A + B \geq 0 & \text{if } A^2 - B > 0 \text{ (deux racines réelles distinctes)} \\ -1 < A < 1 & \text{if } A^2 - B = 0 \text{ (double racine réelle)} \\ B \leq 1 & \text{if } A^2 - B < 0 \text{ (deux racines complexes conjuguées)} \end{cases} \quad (\text{C.8})$$

Le domaine de stabilité est alors défini par :

$$B \leq 1 \quad ; \quad 1 - 2A + B \geq 0 \quad ; \quad 1 + 2A + B \geq 0 \quad ; \quad A \neq \pm 1 \quad (\text{C.9})$$

**Cas  $j \leq p$  :**

L'équation caractéristique s'écrit :

$$\det \left( \begin{bmatrix} 1 + \Delta t^2 (\beta - \frac{1}{2}) \omega_j^2 & \Delta t \\ \Delta t (\gamma - 1) \omega_j^2 & 1 \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 + \beta \Delta t^2 \omega_j^2 & 0 \\ \gamma \Delta t \omega_j^2 & 1 \end{bmatrix} \right) = 0 \quad (\text{C.10})$$

tel que :

$$2A = 2 - \left( \frac{1}{2} + \gamma \right) \xi^2 \quad ; \quad B = 1 + \left( \frac{1}{2} - \gamma \right) \xi^2 \quad (\text{C.11})$$

avec  $\xi^2 = \frac{\omega_j^2 \Delta t^2}{1 + \beta \omega_j^2 \Delta t^2}$ . Ainsi, les conditions de stabilité sont :

$$\gamma \geq \frac{1}{2} \quad ; \quad 4 + 2(2\beta - \gamma) \omega_j^2 \Delta t^2 \geq 0 \quad (\text{C.12})$$

Finalement :

- si  $\gamma < \frac{1}{2}$ , le schéma est instable ;
- si  $2\beta - \gamma \geq 0$  et  $\gamma \geq \frac{1}{2}$ , le schéma est inconditionnellement stable ;
- si  $2\beta - \gamma < 0$  et  $\gamma \geq \frac{1}{2}$ , le schéma est conditionnellement stable. La condition de stabilité est :

$$\Delta t \leq \frac{1}{\omega_j} \frac{2}{\sqrt{2\gamma - 4\beta}} \quad (\text{C.13})$$

Dans le cas  $(\beta, \gamma) = (\frac{1}{2}, 0)$ , la condition de stabilité s'écrit  $\Delta t \leq \frac{2}{\omega_j}$ .

**Cas  $j \geq p + 1$  :**

L'équation caractéristique s'écrit :

$$\det \left( \begin{bmatrix} 1 + \Delta t^2 (\beta - \frac{1}{2}) (\omega_j^2 + f^2) & \Delta t + 2\Delta t^2 (\beta - \frac{1}{2}) f \\ \Delta t (\gamma - 1) (\omega_j^2 + f^2) & 1 + 2\Delta t (\gamma - 1) f \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 + \beta \Delta t^2 (\omega_j^2 + f^2) & 2\beta \Delta t^2 f \\ \gamma \Delta t (\omega_j^2 + f^2) & 1 + 2\gamma \Delta t f \end{bmatrix} \right) = 0 \quad (\text{C.14})$$

tel que :

$$2A = 2 - \frac{(\gamma + \frac{1}{2})\Delta t^2 \bar{\omega}_j^2 + 2\Delta t f}{1 + 2\gamma \Delta t f + \beta \Delta t^2 \bar{\omega}_j^2} ; \quad B = 1 + \frac{(\frac{1}{2} - \gamma)\Delta t^2 \bar{\omega}_j^2 - 2\Delta t f}{1 + 2\gamma \Delta t f + \beta \Delta t^2 \bar{\omega}_j^2} \quad (\text{C.15})$$

avec  $\bar{\omega}_j^2 = \omega_j^2 + f^2$ . En notant que :

$$\begin{aligned} B \leq 1 &\implies \frac{(\frac{1}{2} - \gamma)\Delta t^2 \bar{\omega}_j^2 - 2\Delta t f}{1 + 2\gamma \Delta t f + \beta \Delta t^2 \bar{\omega}_j^2} \geq 0 \\ 1 - 2A + B \geq 0 &\implies \frac{\Delta t^2 \bar{\omega}_j^2}{1 + 2\gamma \Delta t f + \beta \Delta t^2 \bar{\omega}_j^2} \geq 0 \\ 1 + 2A + B \geq 0 &\implies \frac{4 + 2(2\beta - \gamma)\Delta t^2 \bar{\omega}_j^2 + 4(2\gamma - 1)\Delta t f}{1 + 2\gamma \Delta t f + \beta \Delta t^2 \bar{\omega}_j^2} \geq 0 \\ A \neq \pm 1 &\implies (\gamma + \frac{1}{2}) \Delta t^2 \bar{\omega}_j^2 + 2\Delta t f > 0 \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

les conditions de stabilité deviennent :

$$\left( \gamma - \frac{1}{2} \right) \Delta t^2 \bar{\omega}_j^2 + 2\Delta t f \geq 0 ; \quad 4 + 2(2\beta - \gamma)\Delta t^2 \bar{\omega}_j^2 + 4(2\gamma - 1)\Delta t f \geq 0 \quad (\text{C.17})$$

Finalemt :

- si  $\gamma < \frac{1}{2}$ , le schéma est instable si  $\Delta t > \frac{2f}{(\frac{1}{2} - \gamma)(\omega_j^2 + f^2)}$  ;
- si  $2\beta - \gamma \geq 0$  et  $\gamma \geq \frac{1}{2}$ , le schéma est inconditionnellement stable ;
- si  $2\beta - \gamma \geq 0$  et  $\gamma < \frac{1}{2}$ , le schéma est conditionnellement stable. La condition de stabilité est (en plus de  $\Delta t \leq \frac{2f}{(\frac{1}{2} - \gamma)(\omega_j^2 + f^2)}$ ) :

$$\Delta t < \min_j \frac{(1 - 2\gamma)f - \sqrt{(2\gamma - 1)^2 f^2 - 2(2\beta - \gamma)(\omega_j^2 + f^2)}}{(2\beta - \gamma)(\omega_j^2 + f^2)} \quad (\text{C.18})$$

- si  $2\beta - \gamma < 0$ , le schéma est conditionnellement stable. La condition de stabilité est (en plus de  $\Delta t \leq \frac{2f}{(\frac{1}{2}-\gamma)(\omega_j^2+f^2)}$  si  $\gamma < \frac{1}{2}$ ) :

$$\Delta t < \min_j \frac{(2\gamma - 1)f + \sqrt{(2\gamma - 1)^2 f^2 + 2(2\beta - \gamma)(\omega_j^2 + f^2)}}{(\gamma - 2\beta)(\omega_j^2 + f^2)} \quad (\text{C.19})$$

Dans le cas  $(\beta, \gamma) = (\frac{1}{2}, 0)$ , la condition de stabilité s'écrit  $\Delta t \leq \frac{2}{\sqrt{\omega_j^2 + f^2}}$ .

# Bibliographie

- [Anagnostou *et al.*, 1990] ANAGNOSTOU, G., PATERA, A. T., MADAY, Y. et MAVRIPLIS, C. (1990). On the mortar element method- generalizations and implementation. *In International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations, 3 rd, Houston, TX*, pages 157–173. *Cité page 11*
- [Aubertin *et al.*, 2010] AUBERTIN, P., RÉTHORÉ, J. et DE BORST, R. (2010). A coupled molecular dynamics and extended finite element method for dynamic crack propagation. *International journal for numerical methods in engineering*, 81(1):72–88. *Cité page 18*
- [Bažant, 1978] BAŽANT, Z. P. (1978). Spurious reflection of elastic waves in nonuniform finite element grids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 16(1): 91–100. *Cité page 26*
- [Bécache *et al.*, 2005] BÉCACHE, E., JOLY, P. et RODRIGUEZ, J. (2005). Space–time mesh refinement for elastodynamics. numerical results. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 194(2):355–366. *Cité page 23*
- [Ben Dhia, 1998] BEN DHIA, H. (1998). Problèmes mécaniques multi-échelles : la méthode arlequin. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences-Series IIB-Mechanics-Physics-Astronomy*, 326(12):899–904. *Cité page 18*
- [Berenger, 1994] BERENGER, J.-P. (1994). A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of computational physics*, 114(2):185–200. *3 citations pages 33, 34 et 80*
- [Bernardi *et al.*, 1993] BERNARDI, C., MADAY, Y. et PATERA, A. T. (1993). Domain decomposition by the mortar element method. *In Asymptotic and numerical methods for partial differential equations with critical parameters*, pages 269–286. Springer. *Cité page 11*
- [Biotteau, 2010] BIOTTEAU, E. (2010). Stratégie multigrille et raffinement automatique à précision contrôlée pour la dynamique transitoire non-linéaire. *Cité page 16*
- [Bonnet et Frangi, 2007] BONNET, M. et FRANGI, A. (2007). *Analyse des solides déformables par la méthode des éléments finis*. Les Éditions de l’École polytechnique. *2 citations pages 27 et 75*
- [Brandt, 1977] BRANDT, A. (1977). Multi-level adaptive solutions to boundary-value problems. *Mathematics of computation*, 31(138):333–390. *Cité page 14*

- [Briggs *et al.*, 2000] BRIGGS, W. L., MCCORMICK, S. F. *et al.* (2000). *A multigrid tutorial*, volume 72. Siam. *Cité page 14*
- [Capdeville *et al.*, 2010] CAPDEVILLE, Y., GUILLOT, L. et MARIGO, J.-J. (2010). 1-d non-periodic homogenization for the seismic wave equation. *Geophysical Journal International*, 181(2):897–910. *Cité page 124*
- [Chalindar, 1987] CHALINDAR, B. (1987). Conditions aux limites artificielles pour les équations de l'élastodynamique. *These, Université Saint etienne*. *Cité page 32*
- [Chamoïn *et al.*, 2010] CHAMOIN, L., PRUDHOMME, S., BEN DHIA, H. et ODEN, T. (2010). Ghost forces and spurious effects in atomic-to-continuum coupling methods by the arlequin approach. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 83(8-9):1081–1113. *Cité page 14*
- [Chew et Liu, 1996] CHEW, W. et LIU, Q. (1996). Perfectly matched layers for elastodynamics : A new absorbing boundary condition. *Journal of Computational Acoustics*, 4(04):341–359. *Cité page 33*
- [Chung et Hulbert, 1993] CHUNG, J. et HULBERT, G. (1993). A time integration algorithm for structural dynamics with improved numerical dissipation : the generalized- $\alpha$  method. *Journal of Applied Mechanics*, 60(2):371–375. *2 citations pages 28 et 29*
- [Collino *et al.*, 2003] COLLINO, F., FOUQUET, T. et JOLY, P. (2003). A conservative space-time mesh refinement method for the 1-d wave equation. part i : Construction. *Numerische mathematik*, 95(2):197–221. *Cité page 23*
- [Collino et Monk, 1998] COLLINO, F. et MONK, P. B. (1998). Optimizing the perfectly matched layer. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 164(1): 157–171. *Cité page 86*
- [Collino et Tsogka, 2001] COLLINO, F. et TSOGKA, C. (2001). Application of the perfectly matched absorbing layer model to the linear elastodynamic problem in anisotropic heterogeneous media. *Geophysics*, 66(1):294–307. *Cité page 34*
- [Combescure et Gravouil, 2002] COMBESCURE, A. et GRAVOUIL, A. (2002). A numerical scheme to couple subdomains with different time-steps for predominantly linear transient analysis. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 191(11):1129–1157. *Cité page 25*
- [Curtin et Miller, 2003] CURTIN, W. A. et MILLER, R. E. (2003). Atomistic/continuum coupling in computational materials science. *Modelling and simulation in materials science and engineering*, 11(3):R33. *Cité page 3*
- [Delaplace, 2008] DELAPLACE, A. (2008). *Modélisation discrète appliquée au comportement des matériaux et des structures*. HDR. *3 citations pages 105, 106 et 112*
- [Diaz et Grote, 2009] DIAZ, J. et GROTE, M. J. (2009). Energy conserving explicit local time stepping for second-order wave equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 31(3):1985–2014. *2 citations pages 23 et 24*
- [Engquist et Majda, 1977] ENGQUIST, B. et MAJDA, A. (1977). Absorbing boundary conditions for numerical simulation of waves. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 74(5):1765–1766. *2 citations pages 31 et 32*

- [Farhat *et al.*, 1995] FARHAT, C., CRIVELLI, L. et GÉRADIN, M. (1995). Implicit time integration of a class of constrained hybrid formulations—part i : Spectral stability theory. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 125(1):71–107. *Cité page 29*
- [Farhat et Roux, 1991] FARHAT, C. et ROUX, F.-X. (1991). A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 32(6):1205–1227. *2 citations pages 11 et 12*
- [Fish *et al.*, 1995] FISH, J., PANDHEERADI, M. et BELSKY, V. (1995). An efficient multilevel solution scheme for large scale non-linear systems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 38(10):1597–1610. *Cité page 15*
- [Ghanem *et al.*, 2012] GHANEM, A., TORKHANI, M., MAHJOUBI, N., BARANGER, T. et COMBESURE, A. (2012). Arlequin framework for multi-model, multi-time scale and heterogeneous time integrators for structural transient dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. *Cité page 20*
- [Gosselet et Rey, 2006] GOSSELET, P. et REY, C. (2006). Non-overlapping domain decomposition methods in structural mechanics. *Archives of computational methods in engineering*, 13(4):515–572. *Cité page 12*
- [Hilber *et al.*, 1977] HILBER, H. M., HUGHES, T. J. et TAYLOR, R. L. (1977). Improved numerical dissipation for time integration algorithms in structural dynamics. *Earthquake Engineering & Structural Dynamics*, 5(3):283–292. *3 citations pages 27, 28 et 30*
- [Hu, 2001] HU, F. Q. (2001). A stable, perfectly matched layer for linearized euler equations in unsplit physical variables. *Journal of Computational Physics*, 173(2):455–480. *Cité page 33*
- [Hughes *et al.*, 1998] HUGHES, T. J., FEIJÓO, G. R., MAZZEI, L. et QUINCY, J.-B. (1998). The variational multiscale method—a paradigm for computational mechanics. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 166(1):3–24. *Cité page 20*
- [Kacou et Parsons, 1993] KACOU, S. et PARSONS, I. (1993). A parallel multigrid method for history-dependent elastoplasticity computations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 108(1):1–21. *Cité page 15*
- [Knap et Ortiz, 2001] KNAP, J. et ORTIZ, M. (2001). An analysis of the quasicontinuum method. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(9):1899–1923. *Cité page 14*
- [Krenk et Høgsberg, 2005] KRENK, S. et HØGSBERG, J. R. (2005). Properties of time integration with first order filter damping. *International journal for numerical methods in engineering*, 64(4):547–566. *6 citations pages 28, 30, 93, 98, 99 et 101*
- [Li *et al.*, 2006] LI, S., LIU, X., AGRAWAL, A. et TO, A. C. (2006). Perfectly matched multiscale simulations for discrete lattice systems : Extension to multiple dimensions. *Physical Review B*, 74(4):045418. *Cité page 21*

- [Lions *et al.*, 2001] LIONS, J.-L., MADAY, Y. et TURINICI, G. (2001). Résolution d'edp par un schéma en temps «pararéel». *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series I-Mathematics*, 332(7):661–668. *Cité page 22*
- [Lions, 1990] LIONS, P.-L. (1990). On the schwarz alternating method. iii : a variant for nonoverlapping subdomains. *In Third international symposium on domain decomposition methods for partial differential equations*, volume 6, pages 202–223. SIAM, Philadelphia, PA. *Cité page 18*
- [Liu *et al.*, 2006] LIU, W. K., PARK, H. S., QIAN, D., KARPOV, E. G., KADOWAKI, H. et WAGNER, G. J. (2006). Bridging scale methods for nanomechanics and materials. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 195(13):1407–1421. *Cité page 21*
- [Lubineau *et al.*, 2012] LUBINEAU, G., AZDOUD, Y., HAN, F., REY, C. et ASKARI, A. (2012). A morphing strategy to couple non-local to local continuum mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 60(6):1088–1102. *Cité page 18*
- [Maday *et al.*, 2002] MADAY, Y., PATERA, A. et TURINICI, G. (2002). Reliable real-time solution of parametrized partial differential equations : Reduced-basis output bound methods. *Cité page 22*
- [Mandel, 1993] MANDEL, J. (1993). Balancing domain decomposition. *Communications in numerical methods in engineering*, 9(3):233–241. *Cité page 11*
- [Marchais *et al.*, 2014] MARCHAIS, J., REY, C. et CHAMOIN, L. (2014). Geometrically consistent approximations of the energy for the transition between non-local and local discrete models. *Computational Materials Science*, 85:280–294. *2 citations pages 7 et 44*
- [Mehraeen et Chen, 2004] MEHRAEEN, S. et CHEN, J.-S. (2004). Wavelet-based multi-scale projection method in homogenization of heterogeneous media. *Finite elements in analysis and design*, 40(12):1665–1679. *Cité page 124*
- [Pebrel *et al.*, 2008] PEBREL, J., REY, C. et GOSSELET, P. (2008). A nonlinear dual domain decomposition method : application to structural problems with damage. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 6(3):251–262. *Cité page 12*
- [Prakash et Hjelmstad, 2004] PRAKASH, A. et HJELMSTAD, K. (2004). A feti-based multi-time-step coupling method for newmark schemes in structural dynamics. *International journal for numerical methods in engineering*, 61(13):2183–2204. *2 citations pages v et 26*
- [Pros *et al.*, 2012] PROS, A., DIEZ, P. et MOLINS, C. (2012). Modeling steel fiber reinforced concrete : numerical immersed boundary approach and a phenomenological mesomodel for concrete-fiber interaction. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 90(1):65–86. *Cité page 104*
- [Prudhomme *et al.*, 2009] PRUDHOMME, S., CHAMOIN, L., BEN DHIA, H. et BAUMAN, P. T. (2009). An adaptive strategy for the control of modeling error in two-dimensional atomic-to-continuum coupling simulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(21):1887–1901. *Cité page 59*

- [Schwarz, 1869] SCHWARZ, H. A. (1869). Ueber einige abbildungsaufgaben. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 70:105–120. 2 citations pages 16 et 18
- [Shapeev, 2011] SHAPEEV, A. V. (2011). Consistent energy-based atomistic/continuum coupling for two-body potentials in one and two dimensions. *Multiscale Modeling & Simulation*, 9(3):905–932. 2 citations pages 14 et 68
- [Shenoy *et al.*, 1999] SHENOY, V., MILLER, R., TADMOR, E., RODNEY, D., PHILLIPS, R. et ORTIZ, M. (1999). An adaptive finite element approach to atomic-scale mechanics—the quasicontinuum method. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47(3):611–642. 4 citations pages v, 13, 14 et 42
- [Shimokawa *et al.*, 2004] SHIMOKAWA, T., MORTENSEN, J. J., SCHIØTZ, J. et JACOBSEN, K. W. (2004). Matching conditions in the quasicontinuum method : Removal of the error introduced at the interface between the coarse-grained and fully atomistic region. *Physical Review B*, 69(21):214104. 2 citations pages 14 et 42
- [Tadmor *et al.*, 1996] TADMOR, E. B., ORTIZ, M. et PHILLIPS, R. (1996). Quasicontinuum analysis of defects in solids. *Philosophical Magazine A*, 73(6):1529–1563. 3 citations pages 13, 14 et 42
- [Tang *et al.*, 2006] TANG, S., HOU, T. Y. et LIU, W. K. (2006). A mathematical framework of the bridging scale method. *International journal for numerical methods in engineering*, 65(10):1688–1713. Cité page 21
- [To et Li, 2005] TO, A. C. et LI, S. (2005). Perfectly matched multiscale simulations. *Physical Review B*, 72(3):035414. 3 citations pages 21, 89 et 90
- [Wagner et Liu, 2003] WAGNER, G. J. et LIU, W. K. (2003). Coupling of atomistic and continuum simulations using a bridging scale decomposition. *Journal of Computational Physics*, 190(1):249–274. 3 citations pages 20, 21 et 90
- [Weinan *et al.*, 2006] WEINAN, E., LU, J. et YANG, J. Z. (2006). Uniform accuracy of the quasicontinuum method. *Physical Review B*, 74(21):214115. 4 citations pages 14, 43, 44 et 45
- [Wittel *et al.*, 2006] WITTEL, F., KUN, F. et HERRMANN, H. (2006). Particle models : Simulation of damage and fracture in composites using a discrete element approach. *G. Busse, B. Kröplin, and FK Wittel : Damage and its Evolution in Fiber-Composite Materials : Simulation and Non-Destructive Evaluation, BoD*. 3 citations pages 104, 107 et 108
- [Wood *et al.*, 1980] WOOD, W., BOSSAK, M. et ZIENKIEWICZ, O. (1980). An alpha modification of newmark’s method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 15(10):1562–1566. 2 citations pages 28 et 30
- [Xiao et Belytschko, 2004] XIAO, S. et BELYTSCHKO, T. (2004). A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 193(17):1645–1669. 2 citations pages 18 et 19
- [Xu et Belytschko, 2008] XU, M. et BELYTSCHKO, T. (2008). Conservation properties of the bridging domain method for coupled molecular/continuum dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 76(3):278–294. Cité page 19



