



**HAL**  
open science

# Modélisation multi-échelle en dynamique: réduction des réflexions aux interfaces

Jérémy Marchais, Christian Rey, Ludovic Chamoin

► **To cite this version:**

Jérémy Marchais, Christian Rey, Ludovic Chamoin. Modélisation multi-échelle en dynamique: réduction des réflexions aux interfaces. 11e Colloque National en Calcul des Structures, May 2013, Giens, France. hal-01584836

**HAL Id: hal-01584836**

**<https://hal.science/hal-01584836>**

Submitted on 5 Mar 2019

**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.

---

## Modélisation multi-échelle en dynamique : réduction des réflexions aux interfaces

Jérémy MARCHAIS<sup>1</sup>, Christian REY<sup>1</sup>, Ludovic CHAMOIN<sup>1</sup>

<sup>1</sup> LMT-Cachan  
(ENS Cachan/CNRS/UPMC/PRES UniverSud Paris)  
61, av. du Président Wilson F-94230 Cachan  
{marchais,rey,chamoin}@lmt.ens-cachan.fr

---

**Résumé** — Dans cet article, nous proposons des approximations de type QuasiContinuum permettant de coupler un modèle nonlocal avec un modèle local correspondant. Ces approximations, utilisées en statique, sont consistantes (sans “ghost forces”) au niveau des interfaces locales/nonlocales. Nous proposons ensuite d’étendre leur utilisation à des cas dynamiques. Des simulations numériques illustrent alors l’influence de l’approximation QC sur l’apparition de réflexions parasites au niveau des interfaces.

**Mots clés** — couplage discret / continu, homogénéisation discrète, interface, dynamique, filtrage

---

### Introduction

Les modèles discrets nonlocaux sont couramment utilisés pour décrire des comportements mécaniques à une échelle atomique. Leur emploi peut être également étendu à la représentation de divers matériaux tels que les bétons fibrés ou les composites [1]. La représentation de mécanismes complexes, tels que la décohésion ou la fissuration, est alors intrinsèquement prise en compte par le modèle. Cependant, il n’est pas nécessaire ni raisonnable, en terme de coût de calcul, d’employer de tels modèles sur des structures de grande dimension. Ainsi, en dehors des zones qui subissent des phénomènes localisés (autour d’un défaut ou d’un impact par exemple), un modèle continu classique est suffisant pour décrire le comportement global de la structure.

Dans ce contexte, de nombreuses méthodes multi-échelles ont été développées notamment dans le but de coupler des modèles continus à des modèles discrets [2, 3, 4, 5, 6]. Le modèle fin discret est alors uniquement employé dans les régions où une grande précision est nécessaire, tandis que le modèle continu est utilisé dans le reste du problème, ce qui permet d’effectuer des simulations avec des échelles de temps et d’espace beaucoup plus importantes. La principale difficulté est alors de définir un couplage qui permette au modèle fin discret de se comporter comme s’il était employé sur l’ensemble de la structure.

Nous nous intéresserons plus particulièrement à la méthode QuasiContinuum (QC) [6, 7] qui permet de lier un modèle discret nonlocal au modèle macro local correspondant. Le modèle macro local correspondant est obtenu en restreignant d’une part la cinématique des particules à celle d’un maillage Éléments Finis qui leur est superposé. Le nombre de degré de liberté du système est alors réduit à celui d’un sous-ensemble de particules (dites représentatives) présentes aux noeuds du maillage,. D’autre part, des techniques d’interpolation permettent de diminuer le coût de calcul de l’énergie interne.

Cependant, la formulation initiale de la méthode QC fait apparaître des discontinuités (i.e. “ghost forces”) à proximité des interfaces entre le modèle discret nonlocal et le modèle macro local correspondant [6, 7]. La présence d’interactions nonlocales entre des particules non contigües est à l’origine de ce phénomène. Différentes corrections ont été apportées afin de réduire ou corriger l’influence de ces forces parasites (voir [2]), et plusieurs de celles-ci [8, 9] reposent sur une redéfinition de l’approximation QC qui définit une zone de transition entre le modèle discret nonlocal et le modèle macro local correspondant. Cependant toutes ces solutions ne sont que partielles ou alors coûteuses à mettre en place [11]. Nous proposons donc de revenir sur les approximations de la méthode QC afin d’en obtenir une formulation

générique et consistante.

Jusqu'à présent la méthode QC a été principalement employée et analysée en statique mais très peu en dynamique. La consistance de nos approximations nous assure de leur précision sur des cas statiques. Nous nous intéresserons donc à des cas dynamiques afin d'étudier l'influence de l'approximation utilisée sur l'apparition de réflexions parasites au niveau des interfaces. Et afin de ne prendre en compte que l'aspect incompatibilité due au passage d'un comportement nonlocal à un comportement local correspondant, la discrétisation du modèle macro local sera identique à celle du modèle discret nonlocal.

## 1 Interfaces locales/nonlocales

Dans cette section, nous mettons en place le cadre et les hypothèses utilisées pour définir les approximations de type Quasicontinuum. Nous proposons par la suite deux approximations géométriquement consistantes au sens de [9] mais basées sur des schémas de reconstruction différents.

### 1.1 Modèle discret nonlocal

Nous considérons un état initial équilibré, de telle sorte que la structure du matériau définisse un réseau de Bravais de  $N$  particules. La position  $\mathbf{X}_i$  de chaque particule est repérable par une famille libre de vecteurs  $\{\mathbf{e}_l\}$ , telle que :

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

où  $d$  est la dimension du problème. Les interactions entre les particules qui créent la cohésion du matériau sont modélisées par des potentiels paires. L'énergie  $E_{ij}$  qui définit l'interaction entre la particule  $i$  et  $j$  s'écrit alors :

$$E_{ji} = E_{ij} = E_{ij}(\mathbf{r}_i^a(j)) \quad \text{avec} \quad \mathbf{r}_i^a(j) = \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i, \quad (2)$$

où  $\mathbf{x}_i$  et  $\mathbf{x}_j$  sont les positions courantes des particules  $i$  et  $j$ . Les potentiels harmoniques, de Lennard-Jones ou de Morse, sont quelques exemples de potentiels de paires couramment employés.

Le rayon de coupure  $r_c$  définit la limite d'interaction d'une particule avec ses voisins. Ainsi, lorsque  $r_c$  dépasse les premiers voisins d'une particule ( $V_i$ ), on parlera d'un modèle nonlocal sinon on parlera d'un modèle local (voir Fig. 1).

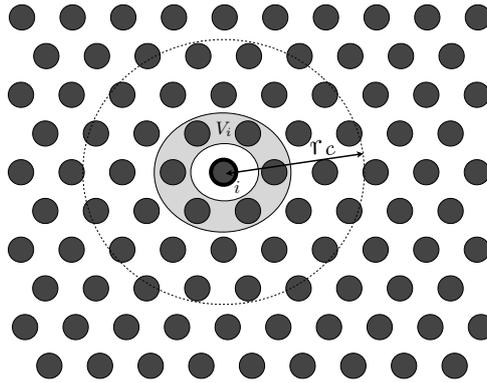


Fig. 1 – Modèle discret nonlocal 2D

Finalement, l'énergie interne du problème est donnée par l'expression :

$$E_{int} = \sum_{i=1}^N E_i^a(\{\mathbf{x}_i\}) \quad \text{avec} \quad E_i^a = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} E_{ij}(\mathbf{r}_i^a(j)), \quad (3)$$

où  $E_i^a$  est l'énergie associée à la particule  $i$ .

## 1.2 Approximation de type QC

L'objectif de l'approximation QC est de définir une énergie locale équivalente à la particule  $i$ , notée  $E_i^{CB}$ . L'expression de  $E_i^{CB}$  est obtenue en remplaçant les interactions nonlocales de  $E_i^a$  par des interactions locales équivalentes. La quantité nonlocale  $r_i^a(j)$  est extrapolée dans le but de définir une quantité locale approchée  $r_i^{CB}(j)$  qui se base sur la position d'un ensemble de premiers voisins, noté  $V_i$  sur Fig. 1. Le schéma de reconstruction local  $r_i^{CB}(j)$  suit la procédure suivante :

$$\mathbf{R}_i(j) = \mathbf{X}_j - \mathbf{X}_i = \sum_{l \in V_i} \alpha_i^l(j) (\mathbf{X}_l - \mathbf{X}_i) \quad (4)$$

$$\implies \mathbf{r}_i^a(j) \approx \mathbf{r}_i^{CB}(j) = \sum_{l \in V_i} \alpha_i^l(j) (\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_i), \quad (5)$$

où les coefficients  $\{\alpha_i^l(j)\}_{l=1,\dots,d}$  ne dépendent que de la géométrie du réseau. De plus, nous sélectionnons que les  $d$  plus *proches* voisins de  $V_i$ , afin que la solution soit unique et que les coefficients soient tous positifs. Nous obtenons donc l'expression de  $E_i^{CB}$  en combinant les equations (2) et (5) :

$$E_i^{CB} = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} E_{ij}(\mathbf{r}_i^{CB}(j)). \quad (6)$$

Sous l'hypothèse d'un champ de déformation uniforme, l'approximation QC est consistante si elle est employée sur toutes les particules du système [9]. Cependant, si nous définissons deux sous-domaines  $\mathcal{J}_l$  et  $\mathcal{J}_a$ , tels que l'énergie interne s'écrive :

$$E_{int} = \sum_{i \in \mathcal{J}_l} E_i^{CB} + \sum_{i \in \mathcal{J}_a} E_i^a, \quad (7)$$

alors des phénomènes parasites apparaissent à proximité des interfaces entre les domaines locaux  $\mathcal{J}_l$  et nonlocaux  $\mathcal{J}_a$  [6, 8, 9].

## 1.3 Approximations de type QC consistantes : NL2L et NL2L-loc

Nous avons développé de nouvelles approximations de type QC géométriquement consistantes appelées NL2L [10, 11] et NL2L-loc [11]. Elles définissent une zone de transition entre les domaines locaux  $\mathcal{J}_l$  où  $E_i = E_i^{CB}$  et nonlocaux  $\mathcal{J}_a$  où  $E_i = E_i^a$ . Ainsi, nous utilisons une rangée de particules quasi-nonlocales qui définissent l'interface notée  $\mathcal{J}_b$  et qui suivent le schéma QNL de [8]. L'énergie de ces particules s'écrit :

$$E_i^Q = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_a} E_{ij}(\mathbf{r}_i^a(j)) + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_l \cup \mathcal{J}_b} E_{ij}(\mathbf{r}_i^{CB}(j)). \quad (8)$$

Nous définissons ensuite un nouveau schéma de reconstruction  $r_i^b(j)$  basé sur les particules de  $\mathcal{J}_b$ , tel que :

$$\mathbf{R}_i(j) = \mathbf{X}_j - \mathbf{X}_i = \sum_{l \in \mathcal{J}_b} \alpha_i^l(j) (\mathbf{X}_l - \mathbf{X}_i) \quad (9)$$

$$\implies \mathbf{r}_i^a(j) \approx \mathbf{r}_i^b(j) = \sum_{l \in \mathcal{J}_b} \alpha_i^l(j) (\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_i). \quad (10)$$

Nous notons  $\mathcal{J}_{b,nl}$  l'ensemble des particules proches de l'interface ayant au moins une interaction avec une particule de  $\mathcal{J}_l$ , voir Fig. 2. L'énergie associée à ces particules peut alors s'écrire sous la forme suivante :

$$E_i^{QC1} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_l} \frac{2}{\sum_{l \in \mathcal{J}_b} \alpha_i^l(j)} E_{ij}(\mathbf{r}_i^b(j)) + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_l \cup \mathcal{J}_a} E_{ij}(\mathbf{r}_i^a(j)). \quad (11)$$

ou

$$E_i^{QC2} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_l} \left( \frac{1}{\sum_{l \in \mathcal{J}_b} \alpha_i^l(j)} E_{ij}(\mathbf{r}_i^b(j)) + \left( 1 - \frac{1}{\sum_{l \in \mathcal{J}_b} \alpha_i^l(j)} \right) E_{ij}(\mathbf{r}_i^b(j)) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathcal{J}_l \cup \mathcal{J}_a} E_{ij}(\mathbf{r}_i^a(j)). \quad (12)$$

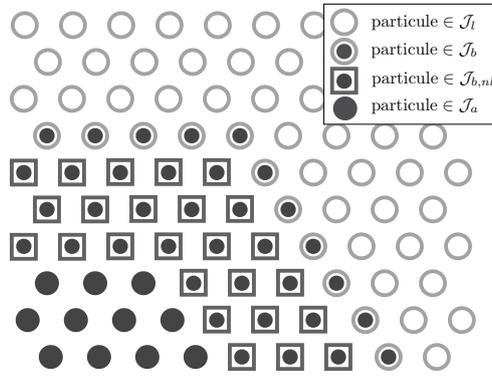


Fig. 2 – Les quatre types de particules

Notons que la taille du domaine  $J_{b,nl}$  correspond à celle du rayon de coupure  $r_c$ . L'énergie interne du modèle (3) devient :

$$E_{int} = \sum_{i \in J_l} E_i^{CB} + \sum_{i \in J_b} E_i^Q + \sum_{i \in J_a} E_i^a + \sum_{i \in J_{b,nl}} E_i^{QCk} \quad \text{avec } k = 1 \text{ ou } 2. \quad (13)$$

Ces approximations de type QC sont géométriquement consistantes au sens de [9] et donc sans “ghost forces” quel que soit le potentiel de paires ou la taille de  $r_c$  [11].

## 2 Applications en dynamique transitoire

Dans cette section, nous étudions le comportement des approximations précédemment définies sur des applications en dynamique.

### 2.1 Transition du modèle nonlocal vers le modèle local

Nous considérons un problème 1D composé de trois sous-domaines. Un sous-domaine central contenant le modèle nonlocal ( $J_a$ ) et deux sous-domaines latéraux utilisant un modèle local équivalent ( $J_l$ ). Les potentiels utilisés sont du type Lennard-Jones avec un rayon de coupure  $r_c = 8.r_0$ ,  $r_0$  étant la distance entre deux particules contigues. Nous initions des ondes en faisant varier leur longueur d'onde  $l = n.r_c$  et étudions la propagation de l'énergie du sous-domaine nonlocal vers les sous-domaines locaux, voir Fig. 3.

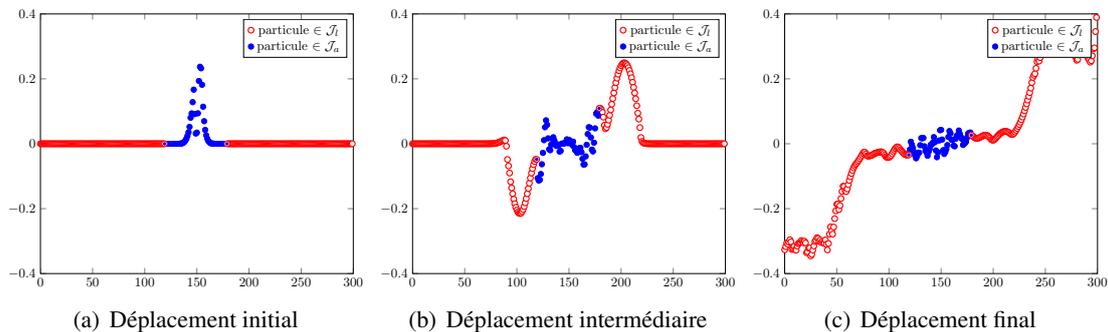


Fig. 3 – Transition du modèle nonlocal vers le modèle local avec l'approximation QC classique ( $n.r_c = 4$ ).

Les différentes approximations de type QC sont comparées : la Fig. 4 résume la part d'énergie réfléchie par les interfaces en fonction de la longueur d'onde du signal initial. L'approximation QC classique entraîne ainsi des réflexions de l'ordre de 13% à 2% de l'énergie initialement présente. A contrario, les approximations NL2L et NL2L-loc présentent aucune ou peu de réflexion et uniquement lorsque la longueur d'onde du signal initial est inférieure à  $r_c$ .

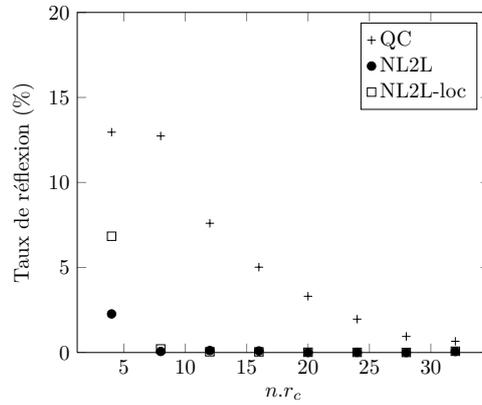


Fig. 4 – Taux de réflexion : nonlocal vers local

## 2.2 Transition du modèle local vers le modèle nonlocal

Nous voulons maintenant étudier la transition d'un signal issu du domaine local vers le domaine nonlocal en utilisant les mêmes propriétés matériaux (potentiel,  $r_c, \dots$ ). Nous établissons un second cas test (Fig. 5) où les positions des sous-domaines locaux et nonlocaux ont été interverties. Nous initions les mêmes types de signaux et étudions la propagation de l'énergie du sous-domaine local vers les sous-domaines nonlocaux.

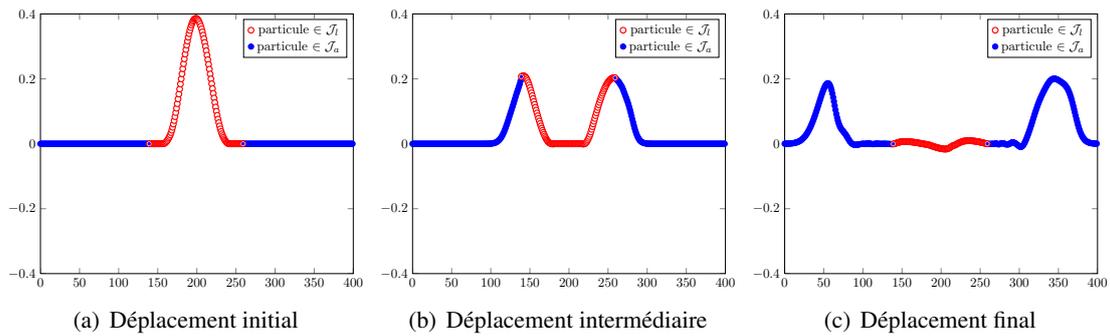


Fig. 5 – Transition du modèle local vers le modèle nonlocal avec l'approximation QC classique ( $n.r_c = 34$ ).

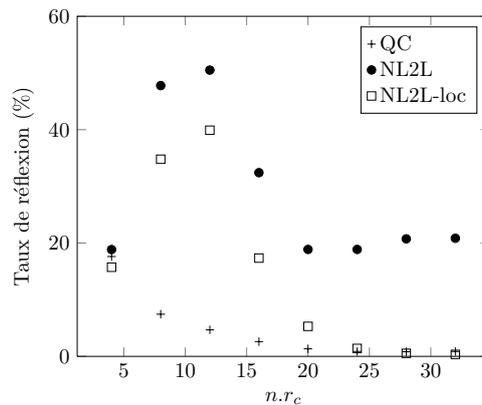


Fig. 6 – Taux de réflexion : local vers nonlocal

Contrairement aux résultats précédents, l'approximation QC classique présente le plus faible taux de réflexion et ce quelle que soit la longueur d'onde du signal initial (voir Fig. 5 et 6). Lorsque la longueur d'onde du signal initial dépasse  $2.r_c$ , le taux de réflexion semble tendre vers 0 pour l'approximation QC

classique et NL2L-loc. Cependant, dans le cas de l'approximation NL2L ce taux demeure constant aux alentours de 20%.

## Conclusion

Nous avons donc établi deux approximations de type QC, basées sur des schémas de reconstruction différents, qui permettent de coupler un modèle discret nonlocal à un modèle discret local. Bien que toutes deux soient consistantes, c'est-à-dire sans phénomènes parasites tels que les "ghost forces" en statique, nous avons montré que leur comportement diffère sensiblement en dynamique. Ainsi, le taux de réflexion généré par l'approximation NL2L la rend inexploitable en dynamique.

Il faut également remarquer que quelle que soit l'approximation utilisée, lorsque que la longueur d'onde du signal initial est trop proche de  $r_c$ , cela entraîne systématiquement un taux de réflexion non négligeable. De plus, à terme, le modèle macro local n'a pas vocation à représenter les phénomènes de cet ordre de grandeur. En effet, la discrétisation associée au modèle macro local sera plus grossière afin de permettre des gains de calculs substantiels.

Il convient donc d'intégrer un processus de filtrage pour les signaux de faible longueur d'onde (i.e. haute fréquence) indépendamment de l'approximation QC utilisée. Les méthodes basées sur la "Perfectly Matched Layer" semblent être de bonnes candidates car elles permettent d'introduire de l'amortissement sans avoir à modifier le schéma temporel [12, 13, 14]. Fig. 7 illustre comment l'utilisation d'une PML "sélective" au niveau de l'interface entre le modèle discret et le modèle macro discrétisé permet de filtrer le contenu haute fréquence d'un signal en laissant passer les basses fréquences.

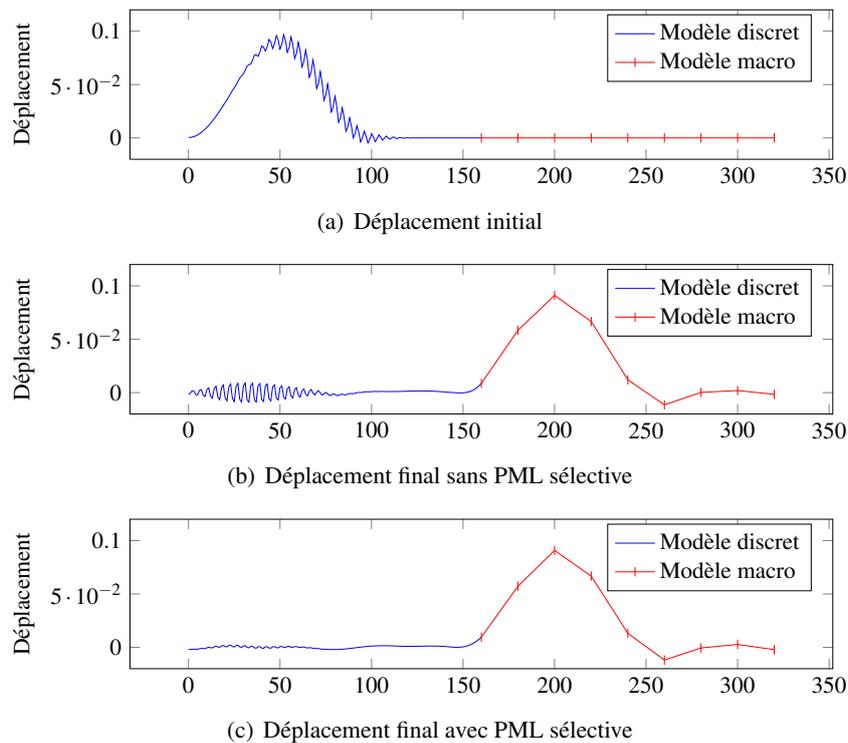


Fig. 7 – Propagation d'un signal du domaine fin vers le domaine macro.

## Références

- [1] F.K. Wittel, F. Kun and H.J. Herrmann. *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, 2006.
- [2] W.A. Curtin and R.E. Miller. *Atomistic/continuum coupling in computational materials science*, *Modelling and simulation in materials science and engineering*, 11 :R33, 2003.

- [3] P. T. Bauman, H. Ben Dhia, N. Elkhodja, J. T. Oden and S. Prudhomme. *On the application of the Arlequin method to the coupling of particle and continuum models*, Computational mechanics, 41(4) :511–530, 2008.
- [4] S.P. Xiao and T. Belytschko. *A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics*, Computer methods in applied mechanics and engineering, 193(17-20) :1645–1669, 2004.
- [5] G.J. Wagner and W.K. Liu. *Coupling of atomistic and continuum simulations using a bridging scale decomposition*, Journal of Computational Physics, 190(1) :249–274, 2003.
- [6] E.B. Tadmor, M. Ortiz and R. Phillips. *Quasicontinuum analysis of defects in solids*, Philosophical Magazine, 73(6) :1529–1564, 1996.
- [7] V.B. Shenoy, R. Miller, E.B. Tadmor, D. Rodney, R. Phillips and M. Ortiz. *An Adaptive Methodology for Atomic Scale Mechanics-The Quasicontinuum Method*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 73 :611–642, 1999.
- [8] T. Shimokawa, J.J. Mortensen, J. Schiøtz and K.W. Jacobsen. *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 :1-10, 2004.
- [9] W. E, J. Lu and J.Z. Yang. *Uniform accuracy of the quasicontinuum method*, Physical Review B, 74(21) :1-12, 2006.
- [10] A. Shapeev. *Consistent energy-based atomistic/continuum coupling for two-body potentials in 1d and 2d*, Multiscale Modeling & Simulation, 9(3) :905–932, 2011.
- [11] J. Marchais, C. Rey and L. Chamoin. *Geometrically consistent approximations of the energy for the transition between nonlocal and local particle models*, submitted.
- [12] J.P. Berenger. *A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves*, Journal of computational physics, 114(2) :185-200, 1994.
- [13] W.C. Chew and Q.H. Liu. *Perfectly matched layers for elastodynamics : a new absorbing boundary condition*, Urbana, 51 :61801, 1996.
- [14] A.C. To and S. Li, *Perfectly matched multiscale simulations*, Physical Review B, 72(3) :035414, 2005.