Sur les interfaces en mécanique non-linéaire des structures

Pierre-Alain Guidault

▶ **To cite this version:**

Pierre-Alain Guidault. Sur les interfaces en mécanique non-linéaire des structures. Mécanique des structures [physics.class-ph]. Université Paris Saclay, 2020. tel-04007063

HAL Id: tel-04007063
https://hal.science/tel-04007063

Submitted on 27 Feb 2023

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.

Habilitation à diriger des recherches

NNT: 2020UPASA000

université PARIS-SACLAY

Sur les interfaces en mécanique non-linéaire des structures

Habilitation à diriger des recherches de l'Université Paris-Saclay

École doctorale n° 579, Sciences mécaniques et énergétiques, matériaux et géosciences (SMEMAG)
Spécialité : Solides, structures et matériaux
Unité de recherche: LMT – Laboratoire de Mécanique et Technologie
Référent : ENS Paris-Saclay

Habilitation à diriger des recherches présentée et soutenue à l'ENS Paris-Saclay, le 18 décembre 2020, par

Pierre-Alain GUIDAULT

Composition du jury:

Alberto Corigliano Professeur, Politecnico di Milano	Rapporteur
Anthony Gravouil Professeur, INSA Lyon	Rapporteur
Nicolas Moës Professeur, Centrale Nantes	Rapporteur
Olivier Allix Professeur, ENS Paris-Saclay	Examinateur
Patrice Cartraud Professeur, Centrale Nantes	Examinateur
Laura De Lorenzis Professeure, ETH Zürich	Examinatrice
Martin Guiton Ingénieur de recherche, IFP Energies nouvelles	Invité

Table des matières

Table des matières **i**

Introduction **1**
1 Les interfaces en mécanique des structures 2
2 Activités détaillées dans ce mémoire 4
3 Activités non présentées 11
4 Composition du document 12

1 Interfaces et couplages de modèles **13**
1 Enjeux de la simulation du couplage de modèles 13
2 Choix de la solution de référence 14
3 Choix du raccord 16
4 Couplage non-intrusif de codes de calcul 31
5 Orientations futures 39

2 Interfaces et méthodes de décomposition de domaine **41**
1 Enjeux des méthodes de décomposition de domaine en non-linéaire 42
2 DDM avec condensation non-linéaire pour l'analyse post-flambage 47
3 Réduction de modèle du problème grossier de la DDM mixte basée sur la LATIN 58
4 Technique d'hyper-réduction pour la réduction de modèle en non-linéaire 63
5 Orientations futures 72

3 Interfaces et assemblages **75**
1 Enjeux de la modélisation des éléments de connexion 76
2 Modèle simplifié de liaison boulonnée 80
3 Modèle simplifié de point de soudure électrique 88
4 Modèle simplifié de contact-frottant pour les câbles d'ancrage 102
5 Orientations futures 114

4 Conclusions et perspectives **116**

Bibliographie **119**

5 Preprints **138**

PREPRINT 1 sur une méthode de couplage de modèles atomistique–continu par couplages L^2 et H^1 139

PREPRINT 2 sur une stratégie de couplage par interface basée sur l'homogénéisation au second ordre pour l'analyse locale-globale de modèles hétérogènes 164

PREPRINT 3 sur une méthode de décomposition de domaine mixte avec condensation non-linéaire pour la simulation post-flambage de grandes structures 192

PREPRINT 4 sur la construction d'un comportement homogénéisé par PGD pour l'analyse de structures non linéaires 213

PREPRINT 5 sur la méthode des points de référence, une technique d'« hyper-réduction », et son application à la réduction de modèle non-linéaire basée sur la PGD 231

PREPRINT 6 sur un connecteur élément fini non-linéaire pour la simulation d'assemblages boulonnés 266

PREPRINT 7 sur un modèle robuste de contact frottant pour la simulation de la fatigue des câbles d'ancrage d'éolienne *Offshore* flottante. 291

Introduction

LA CONCEPTION et le dimensionnement des structures en ingénierie mécanique est un processus itératif qui s'appuie sur des modèles de complexité variée visant à évaluer la satisfaction des exigences du produit. L'ingénieur est conduit à enrichir ces modèles ou à les simplifier tout en cherchant le compromis entre qualité souhaitée des quantités d'intérêt et temps nécessaire pour les obtenir. **Exigence de résultats, impliquant robustesse des méthodes de résolution employées, et coût de développement et de calcul sont ainsi des facteurs décisifs dans un contexte industriel.**

Dans un objectif de réduction des coûts et notamment ceux des essais physiques sur structure, la simulation numérique prend indéniablement une place toujours plus importante dans le processus de développement. Les évolutions remarquables des moyens de calculs combinées aux progrès scientifiques et techniques des dernières décennies ont cependant du mal à répondre à la demande des ingénieurs désireux de traiter des modèles dont la complexité ne cesse d'augmenter afin d'accroître leur confiance dans la prédiction des performances de leur produit. Les besoins sont multiples et conduisent presque systématiquement à une augmentation de la taille des problèmes traités, à la prise en compte de phénomènes non-linéaires (non-linéaire géométrique ou matériau) ou multi-échelles, de sources d'incertitudes et de défauts ou de variations de paramètres (géométriques, matériau, chargement...), de couplages entre physiques.

Sans pour autant être exhaustif et afin de préciser quelques enjeux associés, on peut identifier les classes de problèmes suivantes qui se rencontrent couramment en ingénierie mécanique :

— **L'analyse d'une structure à grand nombre d'inconnues.** Ce type de problème, linéaire ou non, se rencontrent lorsque l'on cherche soit à simuler le comportement d'un assemblage complexe à grands nombres de pièces (véhicule automobile, avion, bateau...) ou à modéliser une structure à une échelle de résolution spatiale et temporelle relativement fine. La résolution « force brute » de ce type de problème de façon monolithique est souvent hors de portée des méthodes de résolution classiques et nécessite des approches alternatives comme les méthodes de décomposition de domaine ou de réduction de modèle par exemple, ou encore, des hypothèses supplémentaires permettant à bon escient de simplifier le modèle.

— **L'analyse de l'influence de phénomènes localisés sur le comportement global d'une structure**. La pratique ingénieur courante qui consiste à préciser le design au fur et à mesure du cycle de conception et à apprécier les effets de modifications locales apportées sur le comportement global d'une structure en est un exemple. L'analyse de la tenue en service

d'une structure afin d'évaluer les effets d'une fissure ou d'un défaut localisé sur la réponse d'une structure saine en est un autre. Elle conduit généralement à évaluer l'impact d'un modèle localisé plus « fin » sur la réponse globale de la structure obtenue avec un modèle plus « grossier ». Dans ce cas, la différence importante des longueurs caractéristiques de variation et de description spatiale des phénomènes locaux et globaux soulèvent de nombreuses questions liées au couplage des modèles et au traitement numérique efficace du problème associé.

Ce mémoire tentent d'apporter des réponses à ces classes de problème en s'appuyant sur les méthodes de couplage de modèles, les méthodes de décomposition de domaine et la modélisation de liaisons localisées au sein des assemblages. Dans ces approches, la notion d'« interface » au sens large est omniprésente.

1 Les interfaces en mécanique des structures

A l'époque de Galilée, la mécanique, en tant que science au sens moderne du terme, n'est alors pas dissociée des techniques de construction des machines. Ce n'est qu'au XVI^{ème} siècle que le mot mécanique désigne *« la partie des mathématiques qui a pour objet la connaissance des lois du mouvement et la théorie de l'action des machines »*[1] et que l'on appelle mécanicien celui qui *» possède la science de la mécanique et celle qui invente, calcule, construit des machines«* . Au XIX^{ème} siècle, le terme mécanicien désigne *« celui ou celle qui monte et entretient des machines »* et la distinction se fait plus nettement entre la mécanique en tant que science et la mécanique en tant que technique.

De nos jours, les interactions entre milieu académique et milieu industriel sont telles que la frontière ou l'*interface* entre science et ingénierie est de moins en moins marquée et le terme mécanique reprend son sens d'origine pour d'ailleurs parler de sciences de l'ingénieur. La conception en ingénierie mécanique s'étend même à plusieurs disciplines. On parle de modélisation multi-physique et de systèmes pluri-techniques. Les référentiels de formation dans le domaine des sciences de l'ingénieur ont d'ailleurs ces dernières années largement intégré l'utilisation de langage de modélisation comme le SysML (*Systems Modeling Language*) pour permettre la spécification, l'analyse, la conception, la vérification et la validation des systèmes complexes. Nombre de logiciels comme Matlab™ ou Modelica™ proposent d'ailleurs la possibilité de faire de la modélisation acausale de systèmes où, à l'instar de la programmation orientée objet, les objets représentent les constituants et les liens ou *interfaces* qui les unissent décrivent les flux de matière, d'énergie ou d'information.

Mon parcours de formation s'inscrit dans le domaine de spécialité des sciences de l'ingénieur en mécanique. Cependant, les évolutions actuelles du monde académique et industriel font qu'on ne peut ignorer les autres disciplines. Aussi, c'est tout naturellement que je suis très attaché aux aspects théoriques comme aux aspects pratiques de la discipline et que mes activités de formation et de recherche sont tournées fortement vers les applications en sciences de l'ingénieur et les échanges à l'interface avec le milieu industriel.

Au sein des mécanismes, des assemblages ou des systèmes complexes, les interfaces, les éléments de jonction, de liaison sont tout aussi importants que les constituants ou sous-systèmes qu'ils connectent. En informatique, une interface est une *« jonction entre deux matériels ou logiciels leur permettant d'échanger des informations par l'adoption de règles communes »*[2]. Ce document s'attache

1. d'après Alain Rey, Dictionnaire historique de la langue française, 1992, pp. 1210-1211
2. d'après le dictionnaire Larousse

d'une part à décrire la nature des *échanges* entre sous-domaines, modèles ou éléments d'un assemblage et selon quelles *règles*. D'autre part, il propose des outils de simulation et de modélisation associés permettant de réaliser cet interfaçage de façon fiable et robuste tout en s'intégrant autant que possible dans les processus de conception des ingénieurs.

La notion d'interface en méthodes de décomposition de domaine appliquée à une structure ou à un assemblage est évidente. Dans ce cas, une interface est généralement un milieu surfacique, frontière commune de deux sous-domaines voisins [Gosselet et Rey, 2006, Toselli et Widlund, 2005, Farhat et Roux, 1991, Mandel, 1993, Glowinski et Le Tallec, 1990, Ladevèze *et al.*, 2007]. Le nombre de sous-domaines peut être très important afin de traiter des problèmes à grands nombres d'inconnues. Les méthodes de décomposition de domaine avec recouvrement [Ben Dhia, 1998, Brezzi *et al.*, 2001], et donc les interfaces volumiques, existent mais sont beaucoup moins courantes. L'interface doit alors modéliser le comportement (liaison parfaite, contact frottant, interface cohésive...) caractérisant la nature des échanges entre les deux entités connectées. En mécanique des structures, déplacement et distribution d'effort d'interface sont les quantités physiques sur lesquelles s'appuient ces échanges. La façon dont ce comportement est pris en compte au sein d'un algorithme itératif afin de « lier » les éléments entre eux est cruciale. Ces approches nécessitant généralement une structuration des données particulière (quantités d'interface et quantités sur les sous-domaines), leur intégration dans un code de calcul commercial ou dans un outil métier n'est pas évidente car hautement intrusive. Par ailleurs, le niveau de généricité et la robustesse des méthodes de décomposition de domaine restent à améliorer afin de traiter efficacement une large classe de comportements d'interface et de sous-domaines ou de types d'élément fini. L'application aux problèmes présentant des non-linéarités matériau ou géométrique soulèvent encore de nombreux enjeux scientifiques. Cela explique en partie les difficultés de ces approches à s'intégrer dans le milieu industriel. Dans des cas spécifiques, elles permettent cependant de traiter des problèmes de grande taille hors de portée des algorithmes de résolution classiques disponibles dans les codes commerciaux. Leur haut niveau de parallélisme apporte une réponse compétitive pour pallier le net ralentissement actuel de l'augmentation de la puissance de calcul des processeurs et exploiter pleinement les architectures parallèles des clusters de calcul de plus en plus fréquents en milieu académique comme en milieu industriel.

Les méthodes de couplage de modèles peuvent tout-à-fait être classées dans la catégorie précédentes des méthodes de décomposition de domaine. Certains aspects techniques liés au raccord à l'interface entre sous-domaines ainsi que les algorithmes de résolution associés peuvent d'ailleurs facilement être exploités dans le cas de la jonction de deux modèles. Cependant, le fait que les modèles connectés, s'appuyant éventuellement sur des physiques différentes, soient généralement fortement incompatibles (non-conformité géométrique/topologique, non-conformité cinématique...) et que le nombre de modèles à coupler soit souvent très limité, soulèvent des questions bien spécifiques à ce type d'application. La forte incompatibilité impose souvent d'utiliser des interfaces de raccord volumique ce qui pose des difficultés théoriques et techniques significatives. Les longueurs caractéristiques des phénomènes décrits par chaque physique pouvant être très différentes, il convient généralement de définir des interfaces qui raccordent en « moyenne » les modèles, en un sens à définir, de telle sorte que la bonne « information » soit globalement bien échangée. La question du choix du raccord d'interface est un point clé dans ces approches. Par ailleurs, la question du couplage/interfaçage de codes de calcul gérant chacun un des modèles physiques se posent naturellement.

La modélisation des interfaces au sens large dans les assemblages est souvent un point sensible en ingénierie mécanique. Les interfaces entre pièces peuvent être surfaciques (interface parfaite, interface de contact-frottant...) mais également décrire des éléments de jonction très localisés (point

ou cordon de soudure, liaison boulonnée, rivet...) ou des liaisons cinématiques. Nombre d'applications en ingénierie peuvent se contenter de modèles de comportement très simples dans les pièces (élastique linéaire, comportement de solide rigide). En revanche, la complexité réside souvent dans les interfaces sièges de phénomènes généralement non-linéaires (frottement, amortissement, plasticité...), plus ou moins localisés mais ayant souvent une forte influence sur le comportement globale et la tenue des structures. Elles sont également source importante d'incertitudes liées au procédé d'assemblage ou d'obtention. Les liaisons constituent par exemple une des sources principales d'amortissement dans les structures aérospatiales [Caignot *et al.*, 2010]. Les déformations localisées dans les liaisons d'un bras robotisé influent fortement sur sa raideur globale et donc sur la précision du positionnement des objets manipulés. La rupture d'une liaison boulonnée sur un avion peut avoir des conséquences désastreuses et coûteuses pour les constructeurs mais également pour les compagnies aériennes. Leur comportement complexe et incertain conduit souvent les ingénieurs, à utiliser des modèles de liaisons très, voire trop, simples et s'appuyant essentiellement sur les éléments de connexion disponibles classiquement dans les codes commerciaux. Fournir des outils et des méthodologies d'aide à la modélisation des liaisons ou interactions localisées dans les assemblages reste un thème de recherche très porteur dans le milieu industriel.

2 Activités détaillées dans ce mémoire

Ce mémoire décrit les activités de recherche que j'ai pu mener ces dix dernières années autour de la modélisation et le calcul par interfaces en **mécanique non-linéaire**. La majorité de ces travaux ont été réalisés souvent dans **un contexte industriel et un environnement logiciel très cadrés**.

Le document s'articule autour de trois axes : les méthodes de couplage de modèles, les méthodes de décomposition de domaine et la modélisation de liaisons localisées au sein des assemblages. Les applications visées ont pour caractéristique commune de porter sur **l'analyse de structures, éventuellement à grand nombre d'inconnues, et dans lesquelles les effets de phénomènes localisés sur le comportement global sont étudiés**. Ce mémoire ne prétend pas apporter une présentation exhaustive des travaux effectués dans ce type d'application mais tente de mettre en avant les enjeux scientifiques que j'ai pu adresser et les solutions que j'ai pu proposer pour y répondre.

➜ Interfaces et couplage de modèles

Le **Chapitre 1** s'intéresse au couplage de modèles par interface. Il ne présente pas le couplage général de modèles s'appuyant sur n'importe quelle physique ou sur n'importe quelle cinématique (couplage d'un modèle volumique et d'un modèle plaque par exemple [Guguin, 2014] ou d'un modèle volumique et d'un modèle poutre en dynamique [Tannous *et al.*, 2014, Tannous *et al.*, 2015]). Il se concentre principalement sur le couplage de modèles mécaniques pour lequel les déformations/déplacements ou contraintes/efforts jouent un rôle essentiel. Plus précisément, la situation du **couplage d'un modèle mécanique continu « grossier » avec un modèle continu ou discret plus « fin »** y est étudiée. L'analyse de l'influence de phénomènes localisés décrits par un modèle fin sur le comportement global d'une structure décrit par un modèle plus grossier par des techniques d'analyse locale-globale, de ré-analyse locale ou de zoom structural rentre dans cette catégorie. Le traitement de ce type de problème soulève plusieurs questions.

La première question concerne le **choix de la solution de référence**. Le choix du raccord des modèles influant sur la solution obtenue, il convient en effet de préciser quel résultat est attendu dans la

zone d'intérêt décrite par le modèle fin. Le choix du modèle grossier influe bien entendu également sur cette solution. Dans les travaux présentés, la solution de référence considérée est celle qui serait obtenue par le modèle fin étendu à l'ensemble du domaine d'étude. Dans ce cas, le modèle grossier doit décrire le comportement global du modèle fin. La question sous-jacente de la **calibration ou homogénéisation du modèle grossier** se pose alors. L'homogénéisation de modèles continus hétérogènes est un sujet très largement étudié dans la littérature (voir p. ex. [Sanchez-Palencia, 1980]). En revanche, la calibration des milieux discrets est une question beaucoup plus ouverte. Le fait que les lois régissant les interactions entre les « particules » soient souvent non-locales expliquent en partie les difficultés rencontrées pour homogénéiser un modèle discret [Marenić *et al.*, 2013].

La seconde question concerne le **choix du raccord des modèles**. Dans ces travaux, la solution obtenue dans la zone d'intérêt décrite par le modèle fin doit être en accord avec la solution de référence. Le rapport des échelles caractéristiques associées à chaque modèle étant potentiellement très important, la question de l'**incompatibilité de modèles** est souvent incontournable. Plusieurs types d'incompatibilités peuvent se présenter : l'**incompatibilité topologique de la zone d'intérêt** dont la géométrie de la frontière peut être difficilement décrite par le modèle grossier, l'**incompatibilité des espaces d'approximation des solutions sur chaque modèle** continu ou discret se traduisant par des incompatibilités de maillages ou de fonctions d'interpolations. Dans le cas de la mécanique, les grandeurs cinématiques, en particulier de déplacement, jouent un rôle privilégié dans ce couplage de modèles continus ou discret. Les méthodes de type collocation ou consistant à décrire explicitement les relations cinématiques entre les inconnues nodales des champs discrétisés de déplacement des deux modèles conduisent souvent à un « verrouillage » de la cinématique du modèle fin sur celle du modèle grossier ayant pour conséquence des surcontraintes locales ou *Ghost forces* indésirables dans la zone de couplage. Un raccord « global » sur l'interface volumique ou surfacique entre les modèles est généralement préférable. Dans les travaux décrits dans ce mémoire, une **méthode de type mortar (multiplicateurs de Lagrange) s'appuyant sur une formulation variationnelle continue en déplacement du problème couplé** est utilisée. Se posent alors la question du choix du terme de couplage (ou du produit scalaire) défini sur un domaine surfacique ou volumique ainsi que celle du choix des espaces continus et d'approximation des champs de déplacements et de multiplicateurs de Lagrange. **Qualité de la solution dans la zone d'intérêt et comportement numérique des champs discrétisés dans la zone de couplage** sont les aspects qui sont principalement considérés.

Enfin, la troisième question porte sur la **résolution efficace du problème couplé**. Le problème précédent conduisant à un problème classique de point selle avec multiplicateur de Lagrange peut être résolu après discrétisation de façon monolithique. Cependant, dans le cadre du couplage de modèles, le **couplage/interfaçage de codes de calcul**, chacun en charge d'un des modèles, est souvent de mise. Une résolution itérative du problème couplé est alors plus adaptée. De la même façon, en analyse locale-globale, il est souhaitable de pouvoir substituer de façon itérative le comportement du modèle fin dans celui du modèle grossier de la structure. L'enjeu consiste alors à développer une **méthode de couplage non-intrusive** permettant d'obtenir à convergence une approximation de la solution du problème couplé en un minimum d'itérations. Le qualificatif *non-intrusif* signifie que le couplage doit être réalisé en utilisant uniquement des fonctionnalités et des données facilement disponibles et accessibles dans les codes couplés. Dans un souci d'efficacité, on comprend aisément que les échanges de données entre codes et donc le nombre d'itérations de l'algorithme de couplage doivent être limités.

Le raccord par interface volumique d'un modèle continu et d'un modèle atomistique d'un feuillet de graphène est détaillé dans le **PREPRINT 1** de l'article [Guidault et Belytschko, 2009] et permet

d'**illustrer les différentes questions précédemment soulevées ainsi que plusieurs aspects techniques du couplage de modèles**. Il fait suite à l'article [Guidault et Belytschko, 2007] qui s'intéressait au couplage de modèles continus. Ces travaux ont été réalisés dans le cadre d'un post-doctorat réalisé sous la direction de T. Belytschko. Les deux articles portent sur une **étude comparative des raccords volumiques de modèles au sens des produits scalaires L^2 et H^1**. Contrairement au raccord H^1 à la base de la méthode Arlequin [Ben Dhia, 1998], le produit scalaire L^2 ne nécessite par la définition de gradients de déplacements. En revanche, il est montré que ce dernier nécessite l'utilisation de fonctions de pondération des énergies continues entre les modèles à la traversée de la zone de couplage volumique et dont la définition peut s'avérer être en pratique plus compliquée que pour des fonctions constantes utilisables avec le couplage H^1. En revanche, la solution dans la zone d'intérêt est en meilleur accord avec la référence pour le couplage L^2 que celle obtenue par couplage H^1 nécessitant une zone de couplage la plus mince possible. Dans le cas du couplage avec un modèle discret, un interpolant continu du déplacement est nécessaire. Un interpolant MLS (*Moving Least-Square*) est proposé pour le domaine atomistique dans [Guidault et Belytschko, 2009].

Le raccord par interface surfacique de deux modèles continus est étudié dans le **PREPRINT 2** de l'article [Wangermez *et al.*, 2020] élaboré au cours de la thèse de M. Wangermez sous la direction de O. Allix, en partenariat avec Safran Tech. Il s'intéresse à l'analyse de l'influence d'anomalies plus ou moins localisées dues au procédé de tissage sur le comportement global d'une structure en composite tissé. A partir de l'analyse tomographique d'une pièce, l'anomalie détectée est modélisée et introduite dans un modèle de la structure « saine » par une approche locale-globale. Deux difficultés sont en particulier adressées. La première est celle de la définition d'une solution de référence du problème couplé dans la mesure ou un comportement homogénéisé de la structure saine est discutable pour une structure dans laquelle la définition d'un volume élémentaire représentatif (séparation des échelles) n'est pas évidente. La deuxième question porte sur le fait que la zone d'intérêt pouvant être de taille non négligeable par rapport à celle de la structure, elle peut être soumise à des gradients de déformation relativement importants rendant délicat l'application des techniques d'homogénéisation classiques. Une **méthodologie de couplage originale basée sur l'homogénéisation au second ordre** a ainsi été proposée sans nécessiter la construction explicite du comportement homogénéisé. S'appuyant sur les travaux de O. Allix et P. Gosselet dont une synthèse est proposée dans [Gosselet *et al.*, 2018], une **implémentation non-intrusive de la méthode de couplage a été réalisée dans le code Z-set™ (ZéBuLoN)** utilisé par Safran Tech.

➜ Interfaces et méthodes de décomposition de domaine

Le **Chapitre 2** porte sur le calcul non-linéaires des structures à grand nombre de degrés de liberté par méthodes de décomposition de domaine (DDM). S'appuyant sur la parallélisation intensive des calculs et des données, ces approches peuvent traiter un nombre important de sous-domaines et d'interfaces. **Robustesse et efficacité** sont les qualités attendues de ces méthodes HPC afin de pouvoir s'établir dans le milieu industriel.

Concernant la robustesse, des progrès importants en DDM dans le domaine de la mécanique ont été réalisés ces dernières années afin de traiter efficacement les structures présentant de fortes hétérogénéités matériau par des approches duales, primales ou mixtes [Rixen et Farhat, 1999, Ladevèze *et al.*, 2001, Gosselet *et al.*, 2003, Bovet *et al.*, 2017], les structures plaques par les « méthodes à deux niveaux » [Farhat et Mandel, 1998, Farhat *et al.*, 2000, Le Tallec *et al.*, 1998] ou FETI-DP et son homologue BDD-C [Farhat *et al.*, 2001, Cros, 2003], la vérification [Rey *et al.*, 2016]... **La robus-**

tesse pour les problèmes non-linéaires matériau ou géométrique reste cependant encore un enjeu scientifique d'importance. Deux familles de DDM en non-linéaires se distinguent de par leur traitement algorithmique des non-linéarités : les DDM basées sur les méthodes de Schur avec relocalisation ou condensation non-linéaire et la DDM basée sur la méthode LATIN. Dans ce mémoire, ces deux approches sont présentées en insistant sur leur version mixte particulièrement robuste et efficace.

Les DDM avec condensation non-linéaire consistent à décomposer le problème en sous-domaines puis à résoudre par une méthode de Newton le problème non-linéaire condensé aux interfaces obtenu par méthode de Schur. Le problème tangent d'interface peut alors être résolu par une méthode de Krylov. A chaque incrément et itération de ce problème, le calcul du résidu d'interface nécessite la résolution en parallèle de problèmes non-linéaires locaux sur chaque sous-domaine. On obtient alors une méthode avec deux solveurs non-linéaires imbriqués : un au niveau global pour le problème non-linéaire d'interface et un sur chaque sous-domaine. Ce traitement des non-linéarités en « parallèle » est particulièrement adapté pour les structures présentant des phénomènes non-linéaires localisés et pour lesquelles une grande partie du domaine reste dans son domaine de comportement linéaire. Cette approche a été appliquée avec succès dans le cas de structures plaques en grands déplacements présentant du flambage localisé [Cresta *et al.*, 2007] ou de structures avec comportement d'endommagement [Pebrel *et al.*, 2008]. On trouvera une présentation remarquable de cette famille de méthodes dans [Negrello *et al.*, 2016]. Dans le cadre de la thèse de J. Hinojosa, dirigée par O. Allix en collaboration avec EADS IW, les travaux initiés par Ph. Cresta [Cresta *et al.*, 2007] ont été étendus à **l'analyse post-flambage de grandes structures raidies** proches de structures aéronautiques industrielles [Hinojosa *et al.*, 2014] susceptibles d'exhiber un comportement de type *snap-through* ou *snap-back* [Hinojosa *et al.*, 2017]. Le **PREPRINT 3** de l'article [Hinojosa *et al.*, 2014] montre que la version DDM mixte est particulièrement robuste et permet l'utilisation d'incréments de chargement très importants, limitant ainsi le nombre de résolutions de problèmes d'interface et donc le nombre d'échanges entre sous-domaines/processeurs.

En rupture avec les solveurs non-linéaires incrémentaux classiques, comme la méthode de Newton, la méthode LATIN [Ladevèze, 1985, Ladevèze, 1999] propose à chaque itération une approximation de la solution définie sur tout le domaine spatial et temporel de l'étude. Séparant le traitement des équations locales non-linéaires (comportement, lois d'évolution) des équations linéaires d'équilibre et d'état, le schéma itératif alterne la résolution de problèmes non-linéaires locaux, aux points matériels, et de problèmes linéaires globaux sur tout le domaine spatial et temporel à l'aide de directions de recherche. L'algorithme obtenu présente des similarités avec les méthodes ADMM (*Alternating Direction Methods of Multipliers*) [Glowinski et Le Tallec, 1989, Glowinski et Le Tallec, 1990, Glowinski, 2015]. Le chemin de convergence est assez différent des solveurs incrémentaux classiques et la méthode s'est montrée intéressante pour traiter des problèmes présentant des instabilités [Boucard, 1996, Vandoren *et al.*, 2013]. Appliqué à la décomposition de domaine, cet algorithme à deux directions de recherche alternées aboutit à une méthode de décomposition mixte particulièrement robuste pour traiter les problèmes d'assemblages avec interfaces de contact frottant [Champaney *et al.*, 1999, Ladevèze *et al.*, 2002] et flexible pour prendre en compte une grande variété de comportements d'interface. On trouvera également une application intéressante de la méthode LATIN dans le cadre de la modélisation d'une fissure avec contact frottant par la X-FEM dans les travaux de [Dolbow *et al.*, 2001, Ribeaucourt *et al.*, 2007, Giacoma *et al.*, 2015].

Concernant l'efficacité, **les propriétés d'extensibilité et d'optimalité ainsi que de coût de calcul des opérateurs sont fondamentales en DDM**. Il est en effet souhaitable que le taux de conver-

gence et l'efficacité ne dépendent pas trop du nombre de sous-domaines et du partitionnement ainsi que de la discrétisation. Pour faire simple, une DDM converge bien si chaque sous-domaine a une représentation correcte de son environnement et donc des flux d'interface échangés avec ses sous-domaines voisins. Les paramètres d'interface (condition de Robin ou directions de recherche) pour les méthodes mixtes aident en ce sens. Cela passe par le choix d'un bon préconditionneur du problème d'interface obtenu par méthode de Schur ou par l'introduction d'un problème grossier/réduit d'interface ou de contraintes additionnelles qui s'appuient sur une vérification partielle des conditions d'interface : dans les coins (BDD-C [Cros, 2003, Dohrmann, 2003], FETI-DP [Farhat *et al.*, 2001, Amini *et al.*, 2009a] et des variantes [Amini *et al.*, 2009b]) ou en moyenne par interface [Ladevèze *et al.*, 2001, Ladevèze *et al.*, 2002]. Dans les méthodes de Schur, la prise en compte de contraintes additionnelles est réalisée par des projecteurs sur des sous-espaces s'appuyant sur la méthode de Krylov augmentée et/ou contrainte. Dans le cas de la méthode mixte basée sur la LATIN, le problème réduit d'interface s'appuie sur des opérateurs de petite dimension par sous-domaine obtenus par homogénéisation numérique et bâtis sur une cinématique de déplacements « moyens » (déplacement, rotation et extension) par interface. Dans le **PREPRINT 3**, le problème d'interface linéarisé formulé par une approche mixte est résolu par une méthode BDD-C [Dohrmann, 2003]. Le choix et la mise à jour des conditions de Robin et leur influence sur l'efficacité et la robustesse y sont discutés.

En non-linéaire, le coût de calcul, de stockage et de mise à jour du préconditionneur ou du problème grossier/réduit d'interface est un point sensible. Dans le cadre de la DDM mixte basée sur la LATIN, l'utilisation de la réduction de modèle par PGD (*Proper Generalized Decomposition*) en variables de temps, d'espace et de paramètres de chargement macroscopique pour la construction de l'opérateur homogénéisé utilisé dans le problème réduit d'interface a permis de diminuer de façon significative les coûts de calcul et de stockage associés. Ces travaux sont décrits dans le **PREPRINT 4** de l'article [Cremonesi *et al.*, 2013] rédigé au cours du post-doctorat de M. Cremonesi, dirigé par P. Ladevèze, co-encadré par D. Néron et financé par le projet ANR SIM-DREAM (Nouveau paradigme en SIMulation numérique - Décomposition en variables séparées pour la Réduction A priori de Modèle, entre l'EC Nantes (GEM), l'ENS Cachan (LMT) et l'INSA Lyon (LAMCOS), ANR-2010-COSI-006).

Dans le cadre des DDM avec condensation non-linéaire et de la DDM basée sur la LATIN, les problèmes non-linéaires résolus au niveau des sous-domaines peuvent être coûteux. Dans le cas de la méthode LATIN pour laquelle une approximation de la solution définie sur tout le domaine spatial et temporel est recherchée à chaque itération ce point peut être critique dans le cas ou les sous-domaines ont un comportement non-linéaire. Les techniques de réduction de modèle par PGD et de base réduite peuvent alors être avantageusement utilisées pour résoudre les problèmes par sous-domaine dans le régime linéaire (voir p. ex. pour des problèmes élasto-plastiques en dynamique [Radermacher et Reese, 2014, Corigliano *et al.*, 2015, Corigliano *et al.*, 2016]) ou non-linéaire. Se pose alors la question de la **réduction des coûts de calcul liés à la construction du modèle réduit (projection sur la base réduite) dans le cadre de la réduction de modèle non-linéaire**, en particulier dans le cas où cette base évolue au cours du calcul. Les techniques d'hyperréduction, notamment comme l'EIM (*Empirical Interpolation Method*) [Barrault *et al.*, 2004] ou sa version discrète DEIM [Chaturantabut et Sorensen, 2010], répondent à cette problématique. Dans le cadre de la thèse de M. Capaldo dirigée par P. Ladevèze, co-encadrée par D. Néron et financée par le projet ANR SIM-DREAM, la technique des points de référence (RPM) a été étudiée. Le **PREPRINT 5** de l'article [Capaldo *et al.*, 2017] montre comment une réduction significative de la complexité a pu être obtenue.

➜ Interfaces et assemblages

La dernière partie de ce mémoire, qui fait l'objet du **Chapitre 3**, s'intéresse à la modélisation des interfaces de liaison dans les assemblages. Celles-ci peuvent en effet avoir un effet important sur le comportement global d'un structure. Au cours du projet européen CELPACT (CELular structures for imPACT performance, AST5-CT- 2006-031038), coordonné par le DLR, l'introduction de défauts de rectitude des arêtes de pliage d'une âme de composite sandwich en papier Nomex a par exemple été cruciale pour représenter son comportement en compression hors-plan [Baranger *et al.*, 2011b]. La modélisation des interfaces dans les assemblages et mécanismes est un vaste sujet que ce chapitre ne prétend pas décrire de façon exhaustive. Le mémoire présente seulement quelques contributions réalisées ces dernières années dans le domaine de la **modélisation d'interfaces localisées dans les assemblages**. Il a pour objectif de **fournir à l'ingénieur des outils et des démarches d'aide à la modélisation** s'intégrant au mieux dans ses processus de dimensionnement et dans les codes éléments finis commerciaux couramment employés en calcul des structures.

Le **PREPRINT 6** de l'article [Verwaerde *et al.*, 2020] s'intéresse à l'**élaboration d'un modèle simplifié d'assemblage boulonné et à sa méthodologie d'identification**. Ces travaux initiés au cours de la thèse de M.-F. Soulé De Lafont [Soulé De Lafont *et al.*, 2014, Guidault *et al.*, 2015] dirigée par P.-A. Boucard et financée par le projet FUI CARAB (Conception Avancée Robuste pour les Assemblages Boulonnés, coordonné par la SNECMA), sont revisités et poursuivis à travers celle de R. Verwaerde. Le modèle simplifié se substitue à un boulon et a été implémenté sous forme d'un élément utilisateur (UELEM, *User ELEMent*) dans le code Samcef™ puis dans Abaqus™ et permet de connecter des modèles volumiques ou plaques d'un assemblage. Il prend en compte automatiquement la précharge du boulon et encapsule les frottements entre plaques assemblées et localisés au voisinage du boulon, permettant ainsi d'utiliser des interfaces de contact sans frottement dans le reste du modèle. Cela conduit à une réduction importante du nombre d'itérations de contact et donc de temps de calcul, ce qui s'avère appréciable dans le cas de l'optimisation d'un assemblage boulonné. Par sa simplicité, il permet également un gain de temps significatif dans la mise en données du problème. Cet élément utilisateur a fait l'objet d'une opération d'industrialisation avec Siemens et est **disponible sous la forme d'un connecteur, nommé BARC (Bolt Assembly Robust Connector), dans la version 19 de Samcef™** et dont les performances sont présentées dans [Paleczny *et al.*, 2019]. Un soin particulier a été apporté dans la documentation de ce connecteur pour discuter de son domaine d'application ainsi que pour préciser la méthode d'identification de ses paramètres tout aussi importante que le modèle lui-même et indispensable pour l'ingénieur.

Dans le prolongement de ces travaux, la thèse de F. Mainnemare, actuellement en cours, s'intéresse à la **modélisation des points de soudure électrique (PSE)** que l'on rencontre en automobile (4000 à 6000 PSE par véhicule). Sous la direction de P.-A. Boucard, ce projet est mené en collaboration avec PSA Groupe et a pour objectif de proposer un modèle simplifié permettant de déterminer la tenue à la fatigue de PSE. Les modèles simplifiés actuels ne permettent pas de prédire de façon satisfaisante la durée de vie de certains PSE situés trop près de détails géométriques ou structuraux (bord de tôle, autre PSE, trou, cordon de soudure...). **Les outils de la réduction de modèle sont ici utilisés pour construire une bibliothèque de modes spatiaux permettant de décrire les champs locaux de déplacement plaque vus par les tôles liées par un PSE dans toutes les situations rencontrées en pratique.** De façon similaire à l'homogénéisation cinématique, cette base réduite de modes cinématiques est ensuite utilisée pour élaborer un modèle simplifié de connecteur utilisable à l'échelle d'une structure soudée automobile. Il est ensuite possible de déterminer à moindre coût la tenue en fatigue de chaque PSE par une procédure de relocalisation 3D de la solution au voisinage du PSE

tout en contrôlant la qualité de la base réduite utilisée par le modèle simplifié de PSE et à l'enrichir le cas échéant. **Le modèle simplifié est développé sous la forme d'un élément utilisateur dans les codes Abaqus™ et MSC Nastran™.** La méthodologie de modélisation et d'enrichissement de modèle [Mainnemare *et al.*, 2019] qui n'a pas encore fait l'objet d'un article détaillé, sera brièvement décrite dans ce chapitre sous la forme de deux déclinaisons possibles. Elle illustre par ailleurs une démarche intéressante pour aider l'ingénieur à modéliser d'autres types d'éléments de jonction localisée entre structures plaques comme les rivets par exemple.

Injecter de la connaissance *a priori* acquise sur un problème donné est à la base du travail de modélisation de l'ingénieur et permet généralement de construire des modèles simplifiés robustes dès lors que l'on en maîtrise le domaine d'application. Dans le cadre de la thèse de F. Bussolati dirigée par O. Allix et en collaboration avec l'IFP Energies nouvelles, un **modèle simplifié de tronçon de câble est proposé pour déterminer la tenue en fatigue de lignes d'ancrage de structures éoliennes *offshore***. Ces câbles comportant plus d'une centaine de fils disposés en spirale sur plusieurs couches, un calcul de fatigue à l'échelle du fil décrivant l'ensemble des interfaces de contact frottant est hors de portée. Dans le cadre de l'élasticité linéaire, des méthodes d'homogénéisation pour déterminer les propriétés élastiques effectives de câbles d'acier composés de plusieurs torons ont été proposées (voir p. ex. la modélisation analytique du comportement axial en élasticité dans [Cartraud et Messager, 2006, Ghoreishi *et al.*, 2007a, Ghoreishi *et al.*, 2007b, Messager et Cartraud, 2008] et les améliorations proposées dans [Frikha *et al.*, 2013, Treyssède *et al.*, 2013]). L'extension à la prise en compte de frottements internes ne semble cependant pas évidente. A partir d'un calcul global sous le logiciel DeeplinesWind™ s'appuyant sur une modélisation poutre des câbles, les historiques de courbure et de tension sont utilisés comme conditions limites pour un calcul local sous Abaqus™ d'un tronçon de câble. Cette approche descendante a été validée et permet alors de vérifier la tenue en fatigue des tronçons de câble les plus sollicités. Une simulation du câble modélisant chaque fil par des éléments finis de poutre et où chaque interaction de contact est déterminée par un algorithme de contact poutre-poutre est beaucoup trop coûteuse. Le **PREPRINT 7** de l'article [Bussolati *et al.*, 2020] présente un modèle simplifié permettant de réduire le temps d'un calcul local sur un tronçon métrique de câble. Il s'appuie sur le fait que bien que le tronçon de câble puisse subir de grands déplacements et grandes rotations, les niveaux de courbure rencontrés en pratique permettent de faire l'hypothèse de petits glissements entre les fils. **Une formulation de contact frottant poutre-poutre en petits glissements mais grandes rotations** a ainsi été proposée pour décrire le comportement des contacts localisés entre fils non parallèles qui sont les plus critiques (près de 6000 contacts localisés pour une longueur de câble de 580 mm). Dans les formulations classiques de contact en grands glissements, la normale de contact dépend explicitement de l'interpolation éléments finis de la géométrie de la poutre et présente des changements discontinus lorsque l'appariement des éléments en contact change. Des techniques de « lissage » particulières (voir p. ex. [Wriggers, 2006, De Lorenzis *et al.*, 2012, Sauer et De Lorenzis, 2015, Weeger *et al.*, 2017, Kruse *et al.*, 2018] existent. Dans la formulation en petits glissements proposée ici, la normale de contact varie de façon continue avec les vecteurs directeurs des poutres en contact, par définition, ce qui assure un suivi robuste de la normale tout au long du calcul.**Implémenté sous la forme d'un élément utilisateur dans Abaqus™**, cet élément de contact localisé supprime les étapes coûteuses de recherche de contact permettant ainsi une réduction importante du coût de calcul.

3 Activités non présentées

Ce document ne développe pas certains aspects de mes activités de recherche autour de **la simulation de la propagation de fissure, l'optimisation de détails géométriques ou la modélisation des composites sandwich**.

Les **activités sur la simulation de la propagation de fissure ont été initiées au cours de ma thèse** dirigée par O. Allix, co-encadrée par L. Champaney et en collaboration avec Dassault Aviation. Elle portait sur la mise en place d'une stratégie de calcul multiéchelle par méthode de décomposition de domaine mixte afin de simuler efficacement la propagation d'une fissure dans une structure [Guidault, 2005]. Les contributions significatives ont porté sur la **définition d'un problème macroscopique qui prennent en compte la discontinuité de la fissure et à une description de la fissure par X-FEM [Belytschko et Black, 1999, Moës *et al.*, 1999, Moës *et al.*, 2002, Gravouil *et al.*, 2002] à l'échelle microscopique** afin de simplifier les opérations de maillage et remaillage au cours de la propagation [Guidault *et al.*, 2007, Guidault *et al.*, 2008]. Les connaissances techniques acquises en X-FEM et le code développé sous Matlab™ au cours de ma thèse m'ont permis de travailler sur le développement et l'intégration d'un **critère de propagation de fissure par fatigue sous chargement variable et multiaxial** au cours du post-doctorat de S. Dartois sous la direction de S. Pommier [Dartois *et al.*, 2009].

Plus récemment, dans le cadre de l'IRTG 1627, programme de travail collaboratif et d'échange d'étudiants entre la Graduate School MUSIC de la Leibniz Universität Hannover en Allemagne et le LMT-Cachan en France, la simulation de la **propagation de fissure en dynamique par une approche continue-discontinue basée sur la mécanique de l'endommagement et la X-FEM** a pu être étudiée à travers la thèse de M. Pezeshki dirigée par S. Loehnert et P. Wriggers [Pezeshki *et al.*, 2018]. La **méthode des éléments virtuels pour la propagation de fissure** a également été abordée au cours de la thèse de A. Hussein dirigée par F. Aldakheel, B. Hudobivnik et P. Wriggers [Hussein *et al.*, 2019]. La **propagation de fissure avec plasticité généralisée** a été étudiée à travers le projet ANR SEMAFOR (Simulation et caractérisation ExpériMentAle de la FissuratiOn en plasticité généRalisée, ANR-14-CE07-0037, coordonné par l'ONERA).

Dans le domaine de l'optimisation, la stratégie de calcul multiéchelle basée sur la DDM mixte et les outils logiciels utilisés au cours de ma thèse ont permis de m'intéresser à l'optimisation paramétrique de détails géométriques au sein de structures en contacts multiples. Ce travail a été effectué au cours du post-doctorat de S. Buytet dirigé par P.-A. Boucard et financé par le projet ANR OMD (Optimisation Multidisciplinaire, ANR-05-RNTL-09, coordonné par l'Ecole des Mines de Saint-Etienne). La **DDM mixte basée sur la méthode LATIN se prêtant bien à la multirésolution, facilitant ainsi le calcul de sensibilités/gradients, et au traitement robuste du contact frottant, a permis une réduction de coût de calcul significatif dans le cas de l'optimisation** [Boucard *et al.*, 2007, Boucard *et al.*, 2009].

Le projet européen CELPACT, coordonné par le DLR, s'intéressait au comportement à l'impact de différentes technologies d'âmes de composites sandwich. Les travaux réalisés en collaboration avec E. Baranger et C. Cluzel, ont porté sur la **modélisation et l'identification expérimentales du comportement macroscopique en compaction et cisaillement hors-plan d'une âme en papier Nomex plié**. Les premiers travaux ont concerné la caractérisation du papier Nomex lui-même [Baranger *et al.*, 2009, Baranger *et al.*, 2010a, Baranger *et al.*, 2011a]. Un modèle à trois couches dans l'épaisseur du papier à comportement endommageable a été proposé pour modéliser son comporte-

ment en flexion. Dans un second temps, la prédiction du comportement en compression hors-plan de l'âme sandwich a été étudiée. Une procédure de génération de défauts représentatifs du procédé de pliage a permis de montrer que ce type de défaut joue un rôle crucial dans la prédiction du comportement jusqu'au pic avant compaction [Baranger *et al.*, 2010b, Baranger *et al.*, 2011b].

4 Composition du document

Ce mémoire a été rédigé de façon à mettre en avant les enjeux scientifiques et points de blocages des différents domaines de recherche abordés ainsi que les points clés des méthodes et techniques utilisées pour les traiter et les résultats majeurs obtenus. Les perspectives de recherche et axes de recherche envisagés sont également présentés. Dans un souci de clarté, les détails techniques ne sont pas développés plus que nécessaire pour en comprendre les fondements. A l'issue des trois chapitres décrits précédemment, le lecteur intéressé trouvera un recueil de *preprints* publiés sous forme d'articles qui lui permettront d'approfondir sa compréhension des approches et stratégies discutées dans ce document.

1

Interfaces et couplage de modèles

« Ce n'est pas avec des mots que l'on communique. »

Georges Simenon

DANS CE PREMIER CHAPITRE, on s'intéresse au couplage de modèles par interface volumique ou surfacique. Il ne présente pas le couplage général de modèles s'appuyant sur n'importe quelle physique ou sur n'importe quelle cinématique (couplage d'un modèle volumique et d'un modèle plaque par exemple [Guguin, 2014] ou d'un modèle volumique et d'un modèle poutre en dynamique [Tannous *et al.*, 2014, Tannous *et al.*, 2015]). Il se concentre principalement sur le couplage de modèles mécaniques pour lequel les déformations/déplacements ou contrainte/efforts jouent un rôle essentiel. Plus précisément, la situation du **couplage d'un modèle mécanique continu « grossier » avec un modèle continu ou discret plus « fin »** y est étudié.

1 Enjeux de la simulation du couplage de modèles

L'analyse de l'influence de phénomènes localisés décrits par un modèle fin sur le comportement global d'une structure décrit par un modèle plus grossier à l'aide de techniques d'analyse locale-globale ou de ré-analyse locale soulève plusieurs questions.

➜ Points de blocage inhérents au couplage de modèles

*Le premier point concerne le **choix de la solution de référence**. Le comportement du modèle grossier influant sur la solution du modèle fin, la question sous-jacente de sa calibration ou homogénéisation se pose alors.*

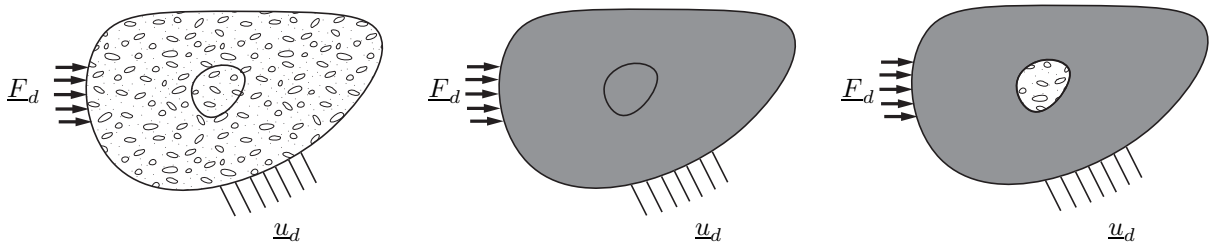
*Le deuxième aspect concerne le **choix du raccord** des modèles. Il est alors crucial de proposer une technique de couplage qui puisse gérer les incompatibilités de modèles (incompatibilité topologique de la zone d'intérêt, incompatibilité des espaces d'approximation des solutions sur chaque modèle) afin de transmettre la « bonne information » entre les modèles.*

*Enfin, le dernier point concerne la proposition d'une **méthode de résolution efficace du problème couplé** qui s'intègre au mieux dans les outils de simulation et les méthodologies de développement*

utilisés en ingénierie mécanique. La question du couplage/interfaçage « non-intrusif » de codes de calcul est alors soulevée.

2 Choix de la solution de référence

La première question concerne le **choix de la solution de référence**. Le choix du raccord des modèles influant sur la solution obtenue, il convient de préciser quel résultat est attendu dans la zone d'intérêt décrite par le modèle fin (**Figure 1.1(c)**). Le choix du modèle grossier/macroscopique influe bien entendu sur cette solution (**Figure 1.1(b)**). Dans les travaux présentés dans ce chapitre, la solution de référence considérée est celle qui serait obtenue idéalement par le modèle fin étendu à l'ensemble du domaine d'étude (**Figure 1.1(a)**). Evidemment, ce modèle fin n'est en pratique pas à disposition.



(a) Description microscopique (modèle fin de référence)

(b) Description macroscopique (modèle « homogénéisé »)

(c) Zoom local inclus dans un modèle macroscopique

Figure 1.1 – Différents niveaux de description d'un matériau hétérogène : modèle fin, modèle macroscopique/homogénéisé et modèle hybride [Wangermez *et al.*, 2020]

Dans ce cas, le modèle grossier doit décrire le comportement global du modèle fin. La question sous-jacente de **la calibration ou homogénéisation du modèle grossier** se pose alors.

L'homogénéisation de modèle continu est un sujet très largement étudié dans la littérature (voir p. ex. [Sanchez-Palencia, 1980]). En revanche, la calibration des milieux discrets est une question beaucoup plus ouverte. Le fait que les lois régissant les interactions entre les « particules » soient souvent non-locales explique en partie les difficultés rencontrées pour homogénéiser un modèle discret. **Les travaux présentés dans [Marenić *et al.*, 2013] tentent d'expliquer par exemple la grande disparité de résultats disponibles dans la littérature concernant les propriétés élastiques d'un feuillet de graphène** et étudie l'influence de plusieurs paramètres : influence du choix des conditions limites imposées pour extraire le comportement homogénéisé, influence de la taille du volume élémentaire représentatif (VER), influence de la configuration (chiralité *zig-zag* ou *armchair*). On pourra également se référer à [Messager et Cartraud, 2008] qui propose une méthode d'homogénéisation pour un nanotube de carbone simple-feuillet.

➜ Revue (non exhaustive) des techniques d'homogénéisation

Les méthodes d'homogénéisation ou techniques permettant d'obtenir les propriétés effectives ou homogénéisées d'un milieu sont très nombreuses dans la littérature. On n'en présente ici qu'une courte revue ainsi que quelques éléments utiles pour le document.

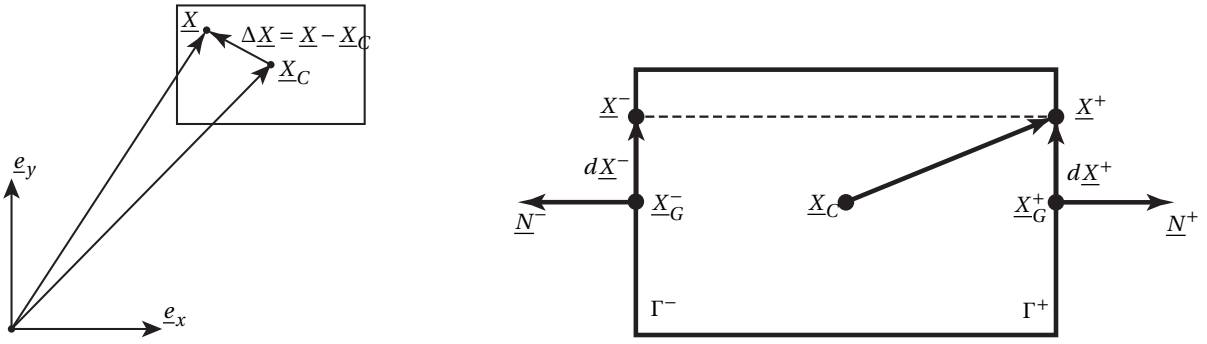
Les méthodes *Unit cell* : Elles ont pour objectif d'extraire des propriétés effectives d'un échantillon de matériau à partir d'« essais numériques » pour des chargements types élémentaires (traction, compression, cisaillement...) [Christman *et al.*, 1989, Tvergaard, 1990, van der Sluis *et al.*, 1999]. Comme pour un essai expérimental de caractérisation matériau, ces approches ne se limitent pas nécessairement à la détermination uniquement des propriétés élastiques mais également à l'investigation de la réponse du milieu lors de l'apparition de phénomènes non-linéaires pouvant conduire à la rupture. S'agissant ici d'essais numériques, il est alors possible, en supposant d'avoir un modèle de description à l'échelle microscopique suffisamment prédictif, d'analyser finement la solution et d'améliorer sa compréhension des différents scenarii de dégradation.
Par exemple, au cours du projet européen CELPACT, coordonné par le DLR, des travaux réalisés en collaboration avec E. Baranger et C. Cluzel, ont porté sur la **modélisation et l'identification expérimentale du comportement macroscopique en compaction et cisaillement hors-plan d'une âme de composite sandwich en papier Nomex plié**. Les travaux ont d'abord concerné la caractérisation du papier Nomex lui-même. Un modèle à trois couches dans l'épaisseur du papier à comportement endommageable a ainsi été proposé pour modéliser son comportement en flexion [Baranger *et al.*, 2009, Baranger *et al.*, 2010b, Baranger *et al.*, 2011a]. Dans un second temps, la prédiction du comportement en compression hors-plan de l'âme sandwich a été étudiée. Une procédure de génération de défauts représentatifs du procédé de pliage a permis de montrer que ce type de défaut joue un rôle important sur la rigidité élastique effective en compaction ainsi que sur la prédiction du comportement jusqu'au pic avant compaction, avant même que ne surviennent les phénomènes d'endommagement du papier Nomex [Baranger *et al.*, 2009, Baranger *et al.*, 2011b]. Il a été montré également que le comportement en cisaillement de cette structure sandwich est moins sensible à ces défauts de rectitude des arêtes de pliage.

Les méthodes d'homogénéisation au sens classique : Dans le cas où la dimension caractéristique des hétérogénéités à l'échelle de la microstructure est d'une taille relativement petite par rapport à celle de structure, l'hypothèse de séparation des échelles permet de bâtir différentes théories.
Des estimations analytiques des bornes encadrants les propriétés effectives de milieux hétérogènes sont proposées par exemple par des méthodes auto-cohérentes dans [Nemat-Nasser et Hori, 1993].
Dans le domaine de l'homogénisation numérique, le comportement homogénéisé est obtenu par sollicitation d'un volume élémentaire représentatif (VER) du matériau par des modes de déformation macroscopiques choisis *a priori* et des conditions limites compatibles (admissibilité) avec la définition proposée des champs de contrainte et de déformation macroscopiques. Dans le cas où les déformations macroscopiques à l'échelle du VER sont relativement uniformes, on pourra utiliser par exemple l'homogénéisation périodique au premier ordre [Sanchez-Palencia, 1974, Bensoussan *et al.*, 1978, Sanchez-Palencia, 1980]. On trouvera des extensions au cas non-linéaire dans la méthode FE^2 par exemple qui ne fournit pas une forme « close » de la loi de comportement macroscopique mais déduisent une relation entre les quantités duales de déformation et de contrainte macroscopiques en chaque point d'intégration de la structure en résolvant à la volée des problèmes à l'échelle microscopique d'un VER avec des conditions d'admissibilité des champs microscopiques similaires à celles de l'homogénéisation au premier ordre [Feyel et Chaboche, 2000].
Dans le cas où les gradients de déformation macroscopique ne sont pas uniformes à l'échelle du VER, voire pour des gradients localisés, on pourra se référer aux méthodes d'homogénéisation au premier ordre enrichi ou au second gradient (voir p. ex. [Kouznetsova *et al.*, 2002, Kaczmarczyk *et al.*, 2008, Otero *et al.*, 2018]) ou s'appuyant sur des milieux continus généralisés de type Cosserat [Cosserat et Cosserat, 1909, Forest et Sab, 1998].
La théorie de l'homogénéisation au second gradient s'appuie sur un développement de Taylor à

l'ordre deux en un point $\underline{X}_C$ d'un vecteur matériel $\Delta\underline{x}$ dans la configuration courante :

$$\Delta\underline{x} = \mathbf{F}^M \cdot \Delta\underline{X} + \frac{1}{2}\mathbf{G}^M : \Delta\underline{X} \otimes \Delta\underline{X} + \underline{w}(\Delta\underline{X}) \tag{1.1}$$

où $\underline{w}$ représente une micro-fluctuation et $\underline{X}_C$ est le centre géométrique du VER (**Figure 1.2**). Les tenseurs macroscopiques de premier et second gradients sont notés respectivement $\mathbf{F}^M$ et $\mathbf{G}^M$.



(a) Vecteur matériel en configuration initiale

(b) Notations pour les conditions de périodicité

Figure 1.2 – Volume élémentaire représentatif (VER) rectangulaire

En notant $\underline{u}_c = \underline{x}_C - \underline{X}_C$, (1.1) peut être réécrite en termes de déplacement :

$$\underline{u} = \underline{x} - \underline{X} = \underline{u}_C + \left(\mathbf{F}^M - \mathbf{I}_d\right) \cdot \Delta\underline{X} + \frac{1}{2}\mathbf{G}^M : \Delta\underline{X} \otimes \Delta\underline{X} + \underline{w}(\Delta\underline{X}) \tag{1.2}$$

La définition des tenseurs macroscopiques $\mathbf{F}^M$ et $\mathbf{G}^M$ en fonction des quantités microscopiques conduit aux conditions d'admissibilité cinématiques suivantes sur la fluctuation $\underline{w}$ [Kouznetsova *et al.*, 2004, Otero *et al.*, 2018] :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \displaystyle\int_{\partial\Omega_{VER}} \underline{w}(\underline{X}_C, \underline{X}) \otimes \underline{N}(\underline{X})\, \mathrm{d}\Gamma & = & 0 \\ \displaystyle\int_{\partial\Omega_{VER}} \underline{w}(\underline{X}_C, \underline{X}) \otimes \Delta\underline{X} \otimes \underline{N}(\underline{X})\, \mathrm{d}\Gamma & = & 0 \end{array} \right. \tag{1.3}$$

Pour un VER de forme parallélépipédique, on montre que ces conditions sont vérifiées pour tout $\underline{w}$ tel que :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \underline{w}(\underline{X}_C, \underline{X}) & \text{périodique} \\ \displaystyle\int_\Gamma \underline{w}(\underline{X}_C, \underline{X})\, \mathrm{d}\Gamma = 0 & \text{pour chaque face } \Gamma \text{ du VER} \end{array} \right. \tag{1.4}$$

Les relations (1.4) [Kouznetsova *et al.*, 2002, Otero *et al.*, 2018] ou (1.3) [Kaczmarczyk *et al.*, 2008] peuvent être utilisées afin de construire un comportement homogénéisé du VER.

3 Choix du raccord

La seconde question concerne le **choix du raccord des modèles**. Dans ces travaux, on considère que la solution obtenue dans la zone d'intérêt décrite par le modèle fin doit être en « accord » avec la solution de référence qui serait obtenue par exemple avec le modèle le plus fin étendu à tout le

domaine d'étude comme discuté précédemment (voir **Figure 1.1(a)**). En supposant que le domaine « grossier » représente correctement le comportement macroscopique, il reste à transmettre l'information pertinente entre les modèles grossier et fin. La question du raccord soulève plusieurs difficultés.

➜ Points de blocage

*Le rapport des échelles caractéristiques associées à chaque modèle étant potentiellement très important, la question de l'**incompatibilité de modèles** est souvent incontournable. Plusieurs types d'incompatibilités peuvent se présenter : l'incompatibilité topologique de la zone d'intérêt dont la géométrie de la frontière peut être difficilement décrite par le modèle grossier, l'incompatibilité des espaces d'approximation des solutions sur chaque modèle continu ou discret se traduisant par des incompatibilités de maillages ou de fonctions d'interpolations. **Le point clé consiste alors à proposer un raccord qui transmette la « bonne information ».** Dans tous les cas, qualité de la solution dans la zone d'intérêt par rapport à la solution de référence et comportement numérique des champs discrétisés (existence, unicité et convergence) dans la zone de couplage sont des aspects importants à considérer.*

Dans le cas de la mécanique, les grandeurs cinématiques, en particulier de déplacement, jouent un rôle privilégié dans ce couplage de modèles continus ou discrets.

➜ Revue (non exhaustive) des techniques de raccord

Les méthodes de type collocation : On range dans cette catégorie les méthodes s'appuyant sur une vérification des conditions de raccord en des points particuliers. Les méthodes consistant à décrire explicitement les relations cinématiques entre les inconnues nodales des champs discrétisés des deux modèles peuvent conduire à un « verrouillage » de la cinématique du modèle fin sur celle du modèle grossier ayant pour conséquence des surcontraintes locales ou *Ghost forces* indésirables dans la zone de couplage dans le cas de maillages incompatibles.
Pour les méthodes de collocation classiques, si le choix des points de collocation peut être fait soigneusement dans certaines situations de couplage surfacique (p. ex. couplage entre éléments finis et éléments spectraux [Quarteroni et Sacchi-Landriani, 1988, Bègue *et al.*, 1989]), il peut s'avérer être moins évident pour le couplage volumique de modèles. La méthode de collocation variationnelle [Gomez et De Lorenzis, 2016] qui met en évidence l'existence de points de collocation permettant d'établir une connexion entre méthode de Galerkin et méthode de collocation, peut cependant fournir des pistes intéressantes. Dans un souci de généricité et de façon à répondre à une large classe de couplages et d'incompatibilités, un raccord « global », au sens faible partant d'une formulation continue, sur l'interface volumique ou surfacique entre les modèles peut être préférable.

Les méthodes de type Galerkin discontinue : Les formulations variationnelles de type Galerkin discontinue fournissent un cadre naturel pour prendre en compte naturellement des champs discontinus sans supposer de continuité entre les élements/sous-domaines comme dans une formulation Galerkin classique. Elles permettent naturellement d'introduire des espaces d'approximation différents de part et d'autre d'une surface de discontinuité. Elles ont donné lieu à de nombreux algorithmes et applications qu'on ne peut présenter ici de façon exhaustive (voir p. ex. [Cockburn *et al.*, 2000, Cockburn, 2003]). Dans le cadre plus spécifique du couplage de modèles, on pourra par exemple citer les méthodes de type Nitsche. L'idée consiste à introduire un terme de flux normal à l'interface s'exprimant en fonction de l'inconnue primale de déplacement sans introduire

de champs inconnus supplémentaires (multiplicateurs de Lagrange). On trouve des formulations symétriques [Hansbo et Hansbo, 2002, Annavarapu *et al.*, 2012] nécessitant un terme de stabilisation additionnel parfois difficile à estimer et dont le choix est crucial concernant les performances et la robustesse des algorithmes de résolution associés, ou non-symétriques correspondant en fait à la formulation de type Galerkin discontinue [Oden *et al.*, 1998, Bouclier et Passieux, 2018]. Intrinsèquement dédiée au traitement des discontinuités surfaciques, leur application au couplage volumique n'est *a priori* pas très adaptée. Par ailleurs, l'interprétation des termes de couplage à l'interface dans le cas de maillages incompatibles n'est pas évidente. En d'autres termes, ces approches ne répondent pas vraiment à la question de savoir quelle information pertinente est à transmettre à l'interface. De ce point de vue, les formulations de type Mortar offre un cadre de travail plus adapté car plus général.

Les méthodes de type mortar : Dans les travaux décrits dans ce mémoire, une méthode de type mortar (multiplicateurs de Lagrange) [Bernardi *et al.*, 1993, Belgacem, 1999] s'appuyant sur une formulation variationnelle continue primale en déplacement du problème couplé est utilisée. Une formulation par multiplicateur de Lagrange (ou formulation primale hybride) permettant le couplage volumique de deux modèles continus d'un système mécanique conservatif dans un état isotherme et quasi-statique pour simplifier, peut s'écrire sous la forme générique suivante :

Problème 1 (Couplage de modèles) *Trouver* $\left(\underline{u}^C, \underline{u}^F, \underline{\lambda}\right) \in \mathscr{U}^C \times \mathscr{U}^F \times \mathscr{M}$ *tel que :*

$$\left\{\begin{array}{rcll} a^C\left(\underline{u}^C, \delta\underline{u}^C\right) + b\left(\underline{\lambda}, \delta\underline{u}^C\right) & = & l^C\left(\delta\underline{u}^C\right), & \forall\, \delta\underline{u}^C \in \mathscr{U}_0^C \\ a^F\left(\underline{u}^F, \delta\underline{u}^F\right) - b\left(\underline{\lambda}, \delta\underline{u}^F\right) & = & l^F\left(\delta\underline{u}^F\right), & \forall\, \delta\underline{u}^F \in \mathscr{U}_0^F \quad OK \\ b\left(\delta\underline{\lambda}, \underline{u}^C - \underline{u}^F\right) & = & 0 & \forall\, \delta\underline{\lambda} \in \mathscr{M} \end{array}\right.$$

où l'on a posé classiquement (en description matérielle) [Holzapfel, 2000] :

$$a^\alpha\left(\underline{u}^\alpha, \delta\underline{u}^\alpha\right) = \int_{\Omega_0^\alpha} w^\alpha\, \boldsymbol{P}\left(\underline{u}^\alpha\right) : \frac{\partial \delta\underline{u}^\alpha}{\partial \boldsymbol{X}}\, \mathrm{d}V_0$$

avec $\boldsymbol{P}$ *le premier tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff et* w^α *une fonction de pondération permettant la répartition des énergies internes dans la zone de couplage volumique* Ω^B.
En l'absence de forces de volume $\underline{b}$ *pour simplifier, et en présence d'un effort imposé* $\underline{\overline{t}}$ *sur la partie du bord* $\partial_t\Omega^\alpha$ *en configuration courante :*

$$l^\alpha\left(\delta\underline{u}^\alpha\right) = \int_{\partial_t\Omega_0^\alpha} \underline{\overline{t}}_0 \cdot \delta\underline{u}^\alpha\, \mathrm{d}\Gamma_0$$

avec $\underline{\overline{t}}_0\, \mathrm{d}\Gamma_0 = \underline{\overline{t}}\, \mathrm{d}\Gamma$ *par définition.*
Pour simplifier encore les notations, le déplacement $\underline{\overline{u}}$ *ne sera imposé que sur la partie complémentaire* $\partial_u\Omega^C$ *du bord extérieur du domaine* Ω^C *en configuration courante si bien que* $\mathscr{U}^C = \left\{\underline{u}^C \in [H^1(\Omega^C]^d \,|\, \underline{u}^C = \underline{\overline{u}} \text{ sur } \partial_u\Omega^C\right\}$ *et* $\mathscr{U}_0^C = \left\{\underline{u}^C \in \mathscr{U}^C \,|\, \underline{u}^C = 0 \text{ sur } \partial_u\Omega^C\right\}$ *en dimension* d. *On aura alors simplement* $\mathscr{U}^F = \mathscr{U}_0^F = [H^1(\Omega^F]^d$.
L'espace des multiplicateurs $\mathscr{M}$ *et le terme de couplage* $b\left(\underline{\lambda}, \underline{u}\right)$ *seront précisés ultérieurement en fonction des situations.*

Mise à part les fonctions de pondération des énergies, w^α, le couplage surfacique de modèle peut être écrit sous une forme analogue. Il est bien entendu possible de proposer de façon équivalente du point de vue continu des formulations hybrides ou mixtes du problème couplé à plusieurs champs ou multiplicateurs de Lagrange afin de « localiser » les multiplicateurs sur chacun des sous-domaines par exemple ou d'en déduire des formulations duales (voir [Raviart et Thomas, 1977, Brezzi et Marini, 2005, Bernardi *et al.*, 2008] pour le recollement surfacique de sous-domaines). La

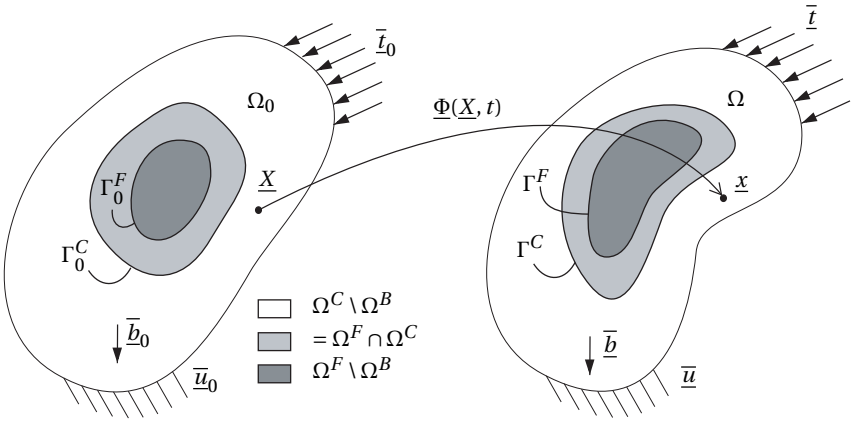


Figure 1.3 – Domaine « grossier », *coarse*, Ω^C et domaine « fin », *fine*, Ω^F dans la zone d'intérêt, se recouvrant et zone de couplage, *bridging domain*, Ω^B en configurations de référence et courante

formulation hybride à deux champs décrite en **Problème 1** est cependant suffisante pour illustrer les problèmes inhérents au couplage de domaines par multiplicateurs de Lagrange.

Le terme de couplage $b\left(\underline{\lambda},\underline{u}\right)$ permet de « recoller » des domaines avec ou sans recouvrement et modélisera de façon générique aussi bien un couplage volumique que surfacique. Ce terme est une forme continue bilinéaire sur $\mathcal{M}\times\mathcal{U}$ si bien que l'on peut alors définir l'opérateur linéaire $B : \mathcal{U} \to \mathcal{M}'$ ou $\mathcal{M}'$ est l'espace dual de $\mathcal{M}$ par le crochet de dualité sur $\mathcal{M}\times\mathcal{M}'$ suivant [Boffi *et al.*, 2013] :

$$\langle \underline{\lambda}, B\underline{u}\rangle_{\mathcal{M}\times\mathcal{M}'} := b\left(\underline{\lambda},\underline{u}\right) \quad \forall\, \underline{\lambda}\in\mathcal{M},\ \forall\, \underline{u}\in\mathcal{U}$$

De façon similaire, on peut définir l'opérateur transposé $B^t : \mathcal{M} \to \mathcal{U}'$ par le crochet de dualité sur $\mathcal{U}'\times\mathcal{U}$:

$$\langle B^t\underline{\lambda}, \underline{u}\rangle_{\mathcal{U}'\times\mathcal{U}} := b\left(\underline{\lambda},\underline{u}\right) \quad \forall\, \underline{\lambda}\in\mathcal{M},\ \forall\, \underline{u}\in\mathcal{U}$$

De façon à ne pas faire apparaître les espaces duaux, on peut alors identifier $\mathcal{M}$ (resp. $\mathcal{U}$) avec son dual $\mathcal{M}'$ (resp. $\mathcal{U}'$) par le théorème de représentation de Riesz :

$$b\left(\underline{\lambda},\underline{u}\right) = \langle \underline{\lambda}, B\underline{u}\rangle_{\mathcal{M}\times\mathcal{M}'} = \left(\underline{\lambda},\underline{\tilde{u}}\right)_{\mathcal{M}} = \langle B^t\underline{\lambda},\underline{u}\rangle_{\mathcal{U}'\times\mathcal{U}} = \left(\underline{\tilde{\lambda}},\underline{u}\right)_{\mathcal{U}} \quad \forall\, \underline{\lambda}\in\mathcal{M},\ \forall\, \underline{u}\in\mathcal{U} \tag{1.5}$$

où $\underline{\tilde{\lambda}}\in\mathcal{U}$ et $\underline{\tilde{u}}\in\mathcal{M}$ sont les uniques représentants de $\underline{\lambda}\in\mathcal{M}$ et $\underline{u}\in\mathcal{U}$ respectivement dans $\mathcal{U}$ et $\mathcal{M}$. On fait alors apparaître les produits scalaires $(.,.)_{\mathcal{M}}$ et $(.,.)_{\mathcal{U}}$ respectivement sur $\mathcal{M}$ et $\mathcal{U}$.

Concernant l'unicité du **Problème 1** dans le cas où a^α est une forme bilinéaire continue et l^α, une forme linéaire continue, on pourra se référer à [Boffi *et al.*, 2013] qui s'appuie, en particulier, sur la coercivité de a^α et la condition inf-sup LBB [Ladyzhenskaya, 1969, Babuška, 1973, Brezzi, 1974]. On trouvera par exemple une étude de la condition LBB pour la prise en compte d'une interface entre deux matériaux ou une condition limite de Dirichlet par la X-FEM dans [Béchet *et al.*, 2009]. On notera bien que dans le cas général du **Problème 1**, en non-linéaire matériau ou géométrique, la forme continue a^α dépend non-linéairement de son premier argument et linéairement de son second et, qu'en présence d'éventuelles charges suiveuses, la forme linéaire l^α dépend implicitement de façon non-linéaire au déplacement à travers le chargement.

Ces éléments classiques d'analyse fonctionnelle étant introduits se posent alors la question du choix du terme de couplage et des espaces associés. On peut distinguer, sans *a priori*, les deux approches suivantes :

— **Une approche qui s'appuie sur la physique**, à « fort contenu mécanique », dans laquelle on injecte de la connaissance *a priori* sur la solution souhaitée ou connue dans la zone de raccord en choisissant l'espace des multiplicateurs $\mathscr{M}$, l'espace des *forces de cohésion*, ou l'espace dual $\mathscr{M}'$, l'espace des *modes cinématiques* associés.

— **Une approche guidée par l'analyse fonctionnelle** qui consiste à se ramener, par le théorème de représentation de Riesz à un produit scalaire connu, « naturel », soit sur $\mathscr{M}$ soit sur $\mathscr{U}$ si il existe, la deuxième option étant en pratique la plus couramment employée afin de se prêter à une formulation qui privilégie les déplacements.

La première approche introduit *de facto* la nécessité de définir plusieurs espaces, l'espace des multiplicateurs ou son dual et celui des déplacements. Le choix des espaces d'approximation associés est alors plus délicat afin d'assurer existence et unicité de la solution. Cependant, **s'appuyant sur la connaissance experte du mécanicien, elle permet de proposer un raccord de modèles à fort contenu mécanique qui transfère plus facilement l'information désirée** au sens du crochet de dualité sur $\mathscr{M} \times \mathscr{M}'$ par exemple.

Dans le cas d'un raccord surfacique, on dispose de quelques résultats utiles en particulier dans le cas quasi-statique. Le principe de Saint-Venant conduit par exemple à choisir un espace des multiplicateurs $\mathscr{M}$ qui transmet les torseurs d'effort [Guidault *et al.*, 2005] ou de proposer un raccord plaque-3D pour les composites stratifiés permettant de transmettre les bonnes quantités généralisées intégrant les effets dans l'épaisseur [Guguin *et al.*, 2014]. Le point clé de ces approches consiste alors à construire des quantités généralisées, macroscopiques, telles que la forme bilinéaire « travail » (crochet de dualité) ne soit pas dégénérée et vérifie une propriété d'orthogonalité de ces quantités macroscopiques par rapport aux quantités résiduelles, microscopiques (voir plus loin (1.9) et (1.10)). Dans le cas d'un raccord volumique, il est plus difficile de proposer *a priori* des quantités généralisées pertinentes et une méthodologie de construction *ad hoc* doit être mise en place pour les faire émerger.

La deuxième approche présente l'avantage de ne faire intervenir par exemple que l'espace des déplacements dans la zone de couplage. La connaissance d'un produit scalaire naturel sur cet espace permet alors de se placer dans un cadre mathématique « sain » permettant de choisir judicieusement les espaces d'approximation et de garantir l'existence et l'unicité de la solution. **L'approche est cependant tributaire de la connaissance de ce produit scalaire** et conduit à un raccord qui (i) conduit à des déplacements dans la zone de couplage qui ne sont pas nécessairement triviaux à interpréter et (ii) ne transfère pas nécessairement la « bonne information » d'un modèle à l'autre afin d'obtenir la solution voulue dans la zone d'intérêt notamment dans le cas d'incompatibilités de modèles. Pour le couplage volumique de modèles, on pourra citer en particulier la méthode Arlequin [Ben Dhia, 1998, Ben Dhia et Rateau, 2005] qui propose l'utilisation d'un produit scalaire de $H^1(\Omega^B)$ donnant lieu à un raccord cinématique permettant d'assurer la nullité d'une combinaison linéaire du saut de déplacement et du laplacien du saut de déplacement entre les modèles [Guidault et Belytschko, 2007]. Ce type de raccord cinématique est proche de celui utilisé dans la méthode Chimera s'appuyant sur une variante d'un algorithme de Schwartz alterné pour le couplage de modèles fluides en CFD [Brezzi *et al.*, 2001]. Un exemple de cette approche basée sur la méthode Arlequin pour le couplage volumique de modèles est décrit ci-après.

➜ Illustration : couplage volumique d'un modèle continu et d'un modèle atomistique

Le raccord par interface volumique d'un modèle continu et d'un modèle atomistique d'un feuillet de graphène est détaillé dans le **PREPRINT 1** de l'article [Guidault et Belytschko, 2009] et permet d'**illustrer les différentes questions précédemment soulevées ainsi que plusieurs aspects techniques du couplage de modèles**. Il fait suite à l'article [Guidault et Belytschko, 2007] qui s'intéressait au couplage de modèles continus. Ces travaux s'appuyant sur la méthode Arlequin [Ben Dhia, 1998, Ben Dhia et Rateau, 2001, Ben Dhia et Rateau, 2002, Ben Dhia et Rateau, 2005] ont été réalisés dans le cadre d'un post-doctorat réalisé sous la direction de T. Belytschko. Les deux articles portent sur une **étude comparative des raccords volumiques de modèles au sens des produits scalaires L^2 et H^1** :

$$\begin{aligned}
\left(\underline{\lambda}, \delta\underline{u}\right)_{L^2(\Omega_0^B)} &= \int_{\Omega_0^B} \underline{\lambda}\cdot\delta\underline{u}\,\mathrm{d}V = \int_{\Omega_0^B} \lambda_i\,\delta u_i\,\mathrm{d}V_0 \\
\left(\underline{\lambda}, \delta\underline{u}\right)_{H^1(\Omega_0^B)} &= \int_{\Omega_0^B} \underline{\lambda}\cdot\delta\underline{u} + l^2\boldsymbol{\varepsilon}(\underline{\lambda}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta\underline{u})\,\mathrm{d}V_0 = \int_{\Omega_0^B} \lambda_i\,\delta u_i + l^2\lambda_{i,j}\,\delta u_{i,j}\,\mathrm{d}V_0
\end{aligned}$$

où le paramètre l de la méthode correspond à une dimension caractéristique de l'épaisseur de la zone de raccord volumique. On notera qu'ici $\underline{\lambda}$ est le représentant du multiplicateur dans $L^2(\Omega_0^B)$ ou $H^1(\Omega_0^B)$. Le choix du raccord H^1 préconisé dans la méthode Arlequin est motivé par le fait que les déplacements d'un modèle continu dans la zone de couplage volumique appartiennent à $H^1(\Omega_0^B)$.

Un autre ingrédient important du couplage volumique de modèles selon la méthode Arlequin est le choix des fonctions de pondération w^α permettant de partitionner l'énergie interne dans la zone de couplage volumique Ω^B :

$$\left\{\begin{array}{rcll} w^C & = & 1 & \text{dans} \quad \Omega^C \setminus \Omega^B \\ w^F & = & 1 & \text{dans} \quad \Omega^F \setminus \Omega^B \\ w^C + w^F & = & 1 & \text{dans} \quad \Omega^B = \Omega^C \cap \Omega^F \end{array}\right. \tag{1.6}$$

Contrairement au raccord H^1 à la base de la méthode Arlequin, le produit scalaire L^2

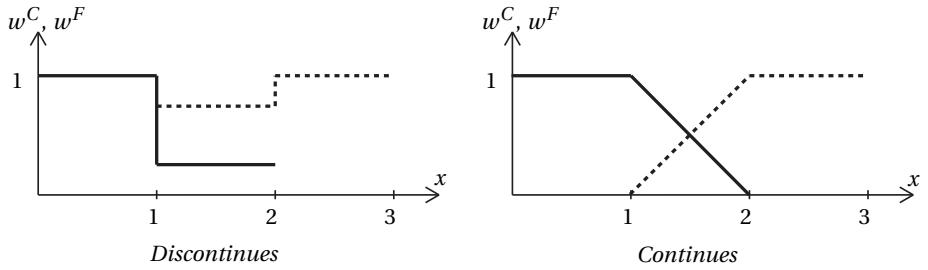


Figure 1.4 – Fonctions de pondération continues et discontinues w^C (traits continus) and w^F (traits pointillés) pour l'exemple de la **Figure 1.5** [Guidault et Belytschko, 2007]

ne nécessite pas la définition de gradients de déplacement. Il est montré cependant dans [Guidault et Belytschko, 2007] que le raccord L^2 nécessite l'utilisation de fonctions de pondération continues à la traversée de la zone de couplage volumique Ω^B entre les modèles (**Figure 1.4**). L'utilisation de fonctions discontinues avec ce couplage introduit une condition de bord libre indésirable sur les bords Γ_0^C et Γ_0^F de la zone de couplage Ω^B conduisant à un champ de multiplicateur singulier sur ces bords, non convergents avec la taille de maille [Ben Dhia et Rateau, 2005, Guidault et Belytschko, 2007]. On notera que la définition de fonctions de pondération continues peut s'avérer être en pratique plus compliquée que pour des fonctions constantes utilisables avec

le couplage H^1 et que l'intégration numérique de la formulation faible peut nécessiter un nombre élevé de points d'intégration dans la zone de couplage (voir **Figure 1.8**).

Comme évoqué précédemment, on montre que le raccord H^1 permet d'assurer la nullité d'une combinaison linéaire du saut de déplacement et du laplacien du saut de déplacement entre les modèles :

$$\left(\underline{u}^C - \underline{u}^F\right) + l^2 \Delta \left(\underline{u}^C - \underline{u}^F\right) = \underline{0} \quad \text{dans} \quad \Omega^B \tag{1.7}$$

Le raccord L^2 assure, quant à lui, naturellement la continuité au sens faible du déplacement :

$$\underline{u}^C - \underline{u}^F = \underline{0} \quad \text{dans} \quad \Omega^B$$

L'exemple académique décrit en **Figure 1.5** permet d'illustrer le comportement de ces différents couplages dans le cas de maillages non conformes, le cas conforme conduisant dans tous les cas de couplages étudiés à un recollement parfait du déplacement des deux maillages dans la zone de raccord. Dans le cas où un maillage « fin » de l'espace discrétisé $\mathcal{M}_h = \mathcal{U}^F_{h\,|\Omega^B}$ du champ de multiplicateur $\underline{\lambda}$

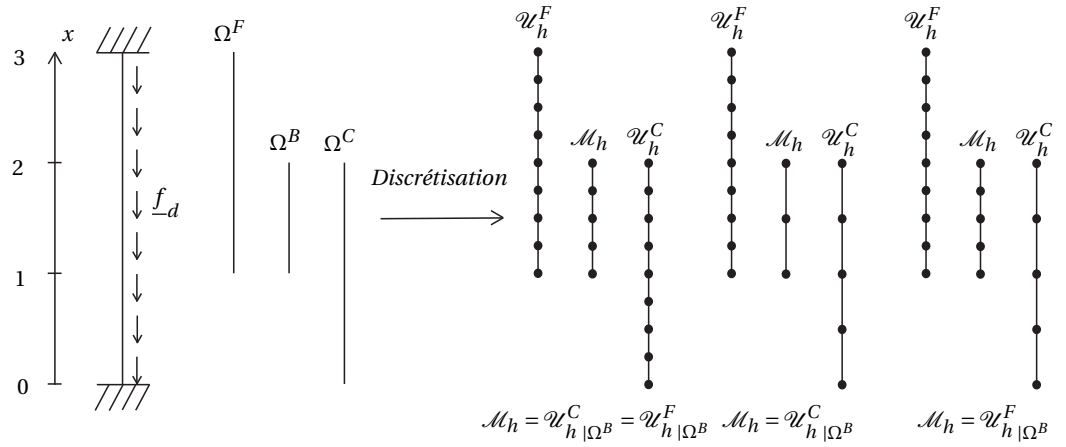


Figure 1.5 – Problème unidimensionnel d'une barre encastrée à ses deux extrémités soumise à une densité d'effort linéique $\underline{f}_d$ et différents maillages de l'espace discrétisé $\mathcal{M}_h$ du champ de multiplicateur $\underline{\lambda}$ dans la zone de couplage Ω^B [Guidault et Belytschko, 2007]

dans la zone de couplage Ω^B est choisi, on observe un phénomène de « verrouillage » du déplacement sur celui du maillage grossier pour tous les couplages H^1 et L^2 (**Figure 1.6**).

Dans le cas où un maillage « grossier » de l'espace discrétisé $\mathcal{M}_h = \mathcal{U}^C_{h\,|\Omega^B}$ du champ de multiplicateur $\underline{\lambda}$ dans la zone de couplage Ω^B est choisi, on constate que le couplage H^1 conduit à un saut de déplacement dans la zone de couplage qui dépend du choix des fonctions de pondération comme suggéré par (1.7) (**Figure 1.7**). En pratique, il est préférable d'utiliser une fonction poids w^F proche de 1 dans ce cas. Dans le cas d'une zone de couplage relativement épaisse, la solution dans la zone d'intérêt est en meilleur accord avec la référence pour le couplage L^2 que celle obtenue par couplage H^1 nécessitant une zone de couplage la plus mince possible.

Dans le cas du couplage avec un modèle discret, atomistique, détaillé dans le **PREPRINT 1** de l'article [Guidault et Belytschko, 2009], un interpolant continu du déplacement, est nécessaire pour la formulation continue du terme de couplage :

$$\left(\delta\underline{\lambda}, \underline{u}^C - \underline{u}^F\right)\right)_{H^1(\Omega_0^B)\ ou\ L^2(\Omega_0^B)} = \left(\delta\underline{\lambda}, \underline{u}^C - \Pi(\{\underline{u}^A_\alpha\}_{\alpha=1,n_a^B})\right)_{H^1(\Omega_0^B)\ ou\ L^2(\Omega_0^B)} = 0, \quad \forall\, \delta\underline{\lambda} \in \mathcal{M}$$

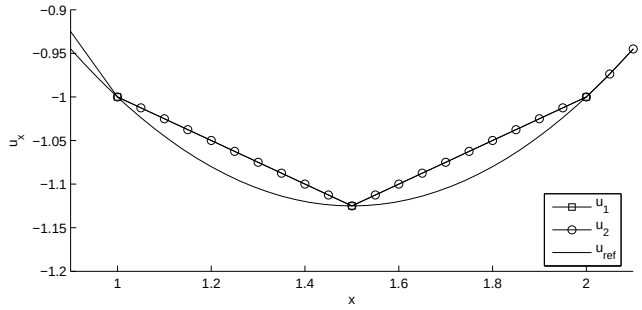


Figure 1.6 – Déplacement u_x pour un maillage « fin » de l'espace discrétisé $\mathscr{M}_h = \mathscr{U}^F_{h\,|\Omega^B}$ du champ de multiplicateur $\underline{\lambda}$ dans la zone de couplage Ω^B – phénomène de « verrouillage » sur le maillage grossier pour les couplages H^1 et L^2 avec des fonctions de pondération w^α continues ou discontinues [Guidault et Belytschko, 2007]

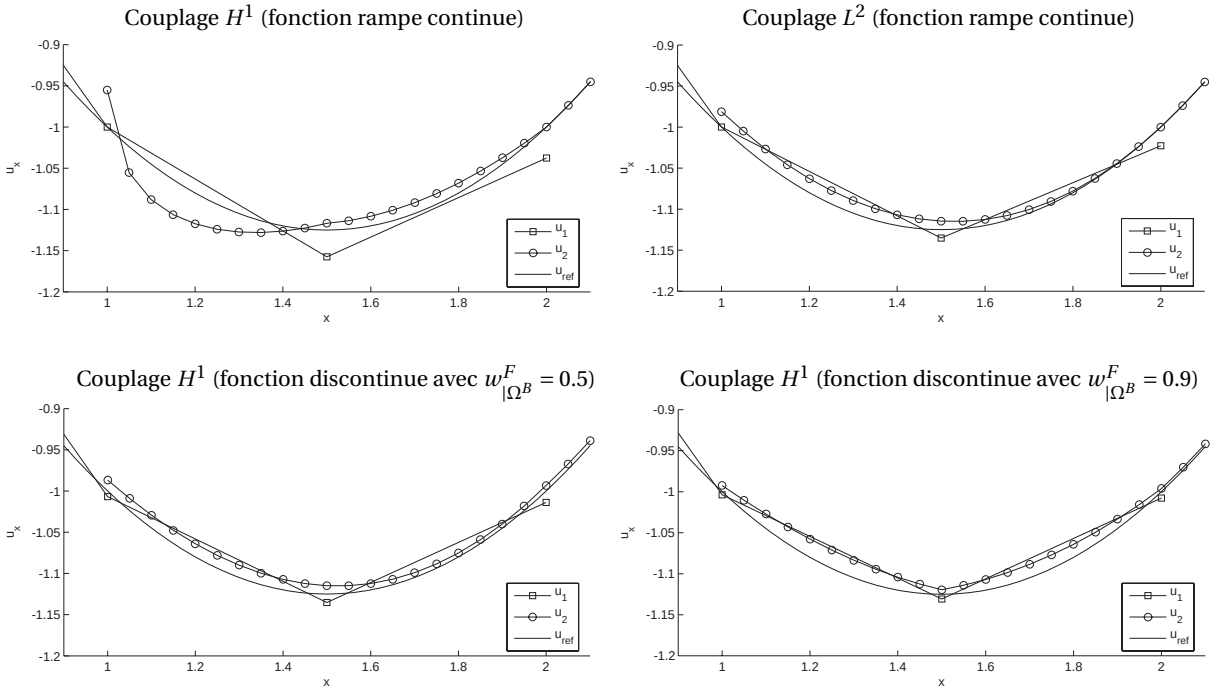


Figure 1.7 – Déplacement u_x pour un maillage « grossier » de l'espace discrétisé $\mathscr{M}_h = \mathscr{U}^C_{h\,|\Omega^B}$ du champ de multiplicateur $\underline{\lambda}$ dans la zone de couplage Ω^B pour le couplage H^1 (paramètre dimensionnel $l = 1$) avec fonctions de pondération continues ou discontinues et le couplage L^2 avec fonctions de pondération continues [Guidault et Belytschko, 2007]

Ce choix de terme de couplage, défini sous forme continue, permet de séparer le choix du produit scalaire du choix de l'interpolant et de ne pas mélanger toutes les difficultés sous-jacentes. Dans [Guidault et Belytschko, 2009], un interpolant MLS (voir p. ex. [Belytschko *et al.*, 1994]) dans la zone de couplage Ω^B est proposé pour le domaine discret à partir de la méthode de transformation décrite dans [Chen *et al.*, 1997] :

$$\underline{u}^F(\underline{X}) = \boldsymbol{N}^{mls}(\underline{X})\boldsymbol{h}^F = \boldsymbol{N}^{mls}(\underline{X})\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{a}^B = \Pi(\{\underline{u}^A_\alpha\}_{\alpha=1,n^B_a} \tag{1.8}$$

où $\boldsymbol{a}^B$ est le vecteur des inconnues nodales associé au déplacement $\underline{u}^A_\alpha$ des n^B_a atomes/particules α

impliqués dans le couplage volumique sur Ω^B. La matrice carrée inversible $\boldsymbol{D}$ est définie par :

$$\boldsymbol{D} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{N}^{mls}(\underline{X}_1) \\ \boldsymbol{N}^{mls}(\underline{X}_2) \\ \vdots \\ \boldsymbol{N}^{mls}(\underline{X}_{n_a^B}) \end{bmatrix}.$$

On notera que le vecteur d'inconnues MLS, $\boldsymbol{h}^F$, ne correspond pas aux déplacements des atomes car les fonctions de forme MLS, collectées dans la matrice $\boldsymbol{N}^{mls}$, ne sont pas interpolantes. En revanche, on construit bien un interpolant des déplacements des particules tel que :

$$\underline{u}^F(\underline{X}_\alpha) = \underline{u}_\alpha^A \quad \text{pour tous les atomes } \alpha \in \Omega_0^B$$

Evidemment, d'autres choix d'interpolants peuvent être faits. On notera que l'intégration du terme de couplage sur un élément du maillage support du champ de multiplicateur de Lagrange nécessite des règles d'intégration particulières (**Figure 1.8**).

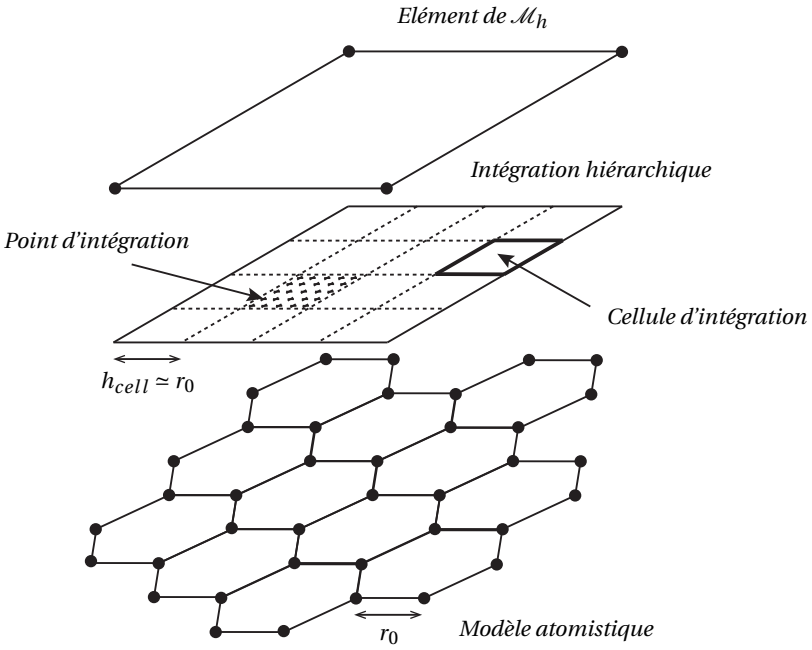


Figure 1.8 – Règle d'intégration pour le terme de couplage sur le support d'un élément du maillage de l'espace d'approximation $\mathcal{M}_h$ des multiplicateurs de Lagrange – intégration hiérarchique à 5×5 points d'intégration par cellule dont la dimension caractéristique est telle que $h_{cell} \simeq r_0$ avec r_0 la distance interatomique [Guidault et Belytschko, 2009]

Le comportement des différents couplages est très proche qualitativement de celui observé pour le couplage de modèles continus. En particulier, sur l'exemple *Patch test* destiné à imposer un état de déformation uniforme à un feuillet de graphène (**Figure 1.9**), on constate en **Figure 1.11** que le couplage L^2 entre milieu continu et milieu atomistique (**Figure 1.10**) conduit à une erreur plus faible sur les composantes de déformation dans la zone centrale d'intérêt et dans la zone de couplage que celle obtenue avec le couplage H^1.

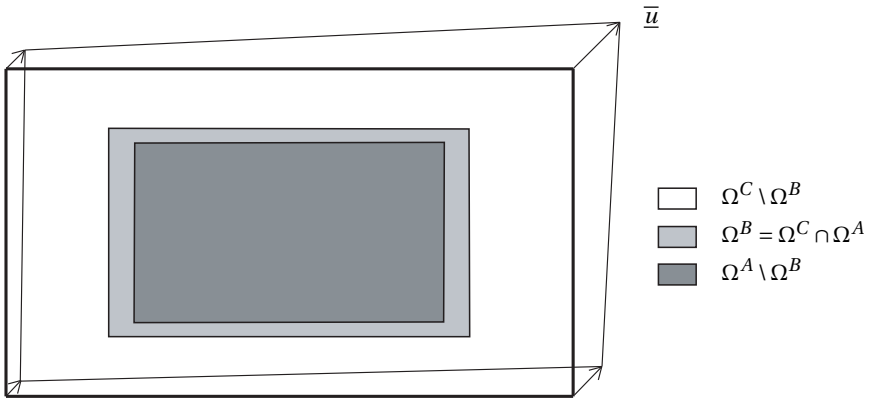


Figure 1.9 – Feuillet de graphène modélisé par le couplage volumique sur Ω^B d'un modèle continu, homogénéisé, défini sur Ω^C et d'un milieu atomistique défini sur Ω^A soumis à un déplacement $\underline{\overline{u}}$ affine sur son bord extérieur [Guidault et Belytschko, 2009]

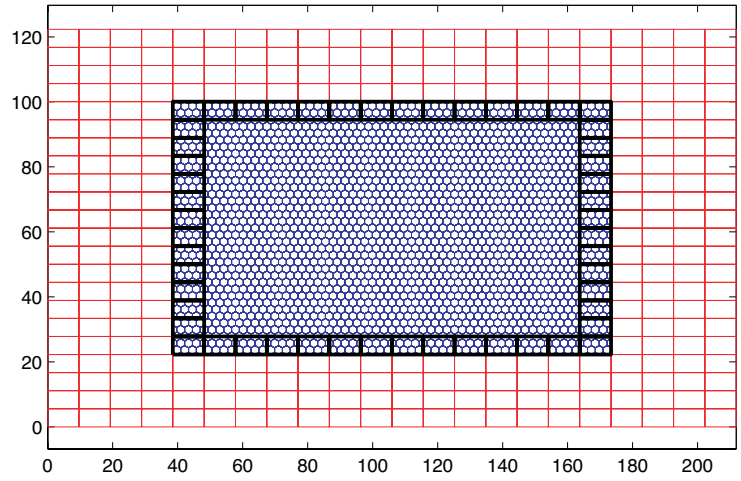


Figure 1.10 – Maillage du modèle continu en rouge, domaine atomistique en bleu et maillage « grossier » en traits forts noirs de l'espace discrétisé $\mathscr{M}_h = \mathscr{U}^C_{h\,|\Omega^B}$ du champ de multiplicateur $\underline{\lambda}$ dans la zone de couplage Ω^B pour l'exemple de la **Figure 1.9** [Guidault et Belytschko, 2009]

Cependant, **les résultats de cette étude ne peuvent pas être généralisés à tous les types de milieux discrets et les conclusions doivent être modérées**. En effet, le modèle de feuillet de graphène étudié ici s'appuie sur un potentiel de Morse modifié qui ne fait intervenir que les premiers atomes voisins (première couche d'atome). Le comportement obtenu est ainsi quasiment local. Dans le cas de potentiels d'interaction comme celui de Lennard-Jones par exemple faisant intervenir les atomes dans un rayon d'action plus ou moins grand, le comportement devient plus ou moins non-local et les interactions à grande distance posent des difficultés pour pondérer les énergies et distribuer de façon cohérentes les forces de couplage donnant lieu à ce qu'on appelle parfois des *ghost forces*. On pourra se référer par exemple à [Marchais *et al.*, 2014] qui propose une méthode quasi-continuum pour le couplage de modèles local et non-local.

Par ailleurs, les atomes et interactions entre atomes étant toutes similaires, le comportement du feuillet de graphène est relativement uniforme. On trouvera une analyse plus approfondie de la méthode Arlequin avec les produits scalaires H^1 et L^2 pour le couplage de modèles continus

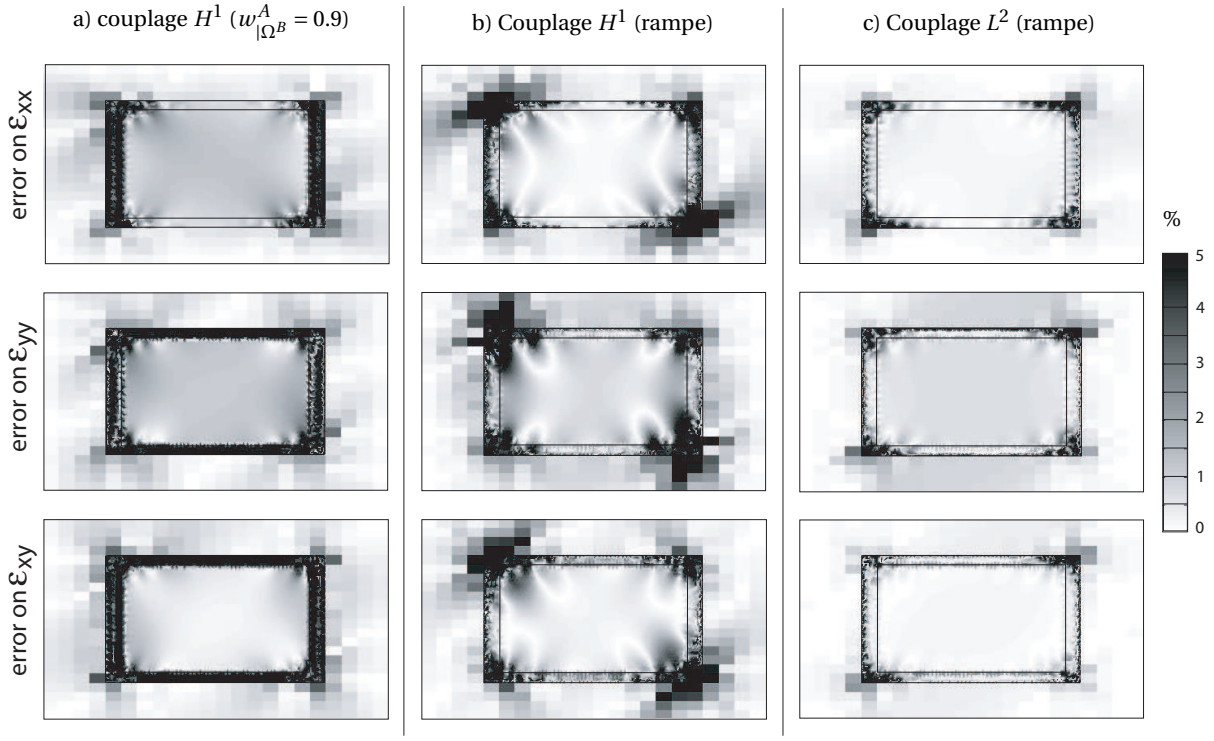


Figure 1.11 – Erreur relative sur les composantes de déformations ε_{ij} ($|\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ref}|/|\varepsilon_{ref}|$) pour le couplage H^1 avec fonctions de pondération a) discontinues ($w^A_{|\Omega^B} = 0.9$) ou b) continue (rampe) et pour c) le couplage L^2 avec fonctions de pondération continue (rampe) [Guidault et Belytschko, 2009]

et discrets dans le cas de comportement non-uniforme (hétérogène) de modèles discrets dans [Bauman *et al.*, 2008].

➜ Illustration : couplage d'un milieu homogène et d'un milieu hétérogène

On s'intéresse ici au cas plus restreint du raccord surfacique sur une interface Γ de modèles mécaniques. Dans le cas du **Problème 1** réécrit pour un raccord surfacique, on montre aisément que $\underline{F} = \underline{\lambda} = -\boldsymbol{\sigma}^C \underline{n}^C = \boldsymbol{\sigma}^F \underline{n}^F$ où $\underline{n}^\alpha$ est la normale extérieure à Ω^α compte tenu de la convention de signe de $\underline{\lambda}$ [Raviart et Thomas, 1977, Boffi *et al.*, 2013]. Pour une interface « suffisamment régulière » (frontière lipschizienne continue), on a $\mathscr{M} = H^{-1/2}(\Gamma)$, l'espace des efforts d'interface et $\mathscr{M}' = H^{1/2}(\Gamma)$ son dual [1]. Ainsi, dans le cas continu, on peut assimiler la forme bilinéaire « travail » suivante au crochet de dualité entre $H^{-1/2}(\Gamma)$ et $H^{1/2}(\Gamma)$:

$$b(\underline{\lambda}, \underline{u}) = \langle \underline{\lambda}, B\underline{u} \rangle_{H^{-1/2}(\Gamma) \times H^{1/2}(\Gamma)} = \int_\Gamma \underline{F} \cdot \underline{W} \, \mathrm{d}\Gamma$$

avec $\underline{F} = \underline{\lambda} = \boldsymbol{\sigma}\underline{n} \in H^{-1/2}(\Gamma)$ et $\underline{W} = B\underline{u} \in H^{1/2}(\Gamma)$.

Comme vu dans l'illustration précédente, on peut en utilisant le théorème de représentation de Riesz (voir (1.5)) se ramener à un produit scalaire sur $H^{1/2}(\Gamma)$ ne faisant intervenir qu'un espace d'ap-

1. Pour un domaine Ω à frontière non régulière, présentant des faces (polyèdre), la définition des espaces trace [Lions et Magenes, 1968] sur une portion Γ, une face, du bord $\partial\Omega$ nécessite plus de précautions [Grisvard, 1992]

proximation, celui des déplacements :

$$b\left(\underline{\lambda},\underline{u}\right)=\langle\underline{\lambda},B\underline{u}\rangle_{H^{-1/2}(\Gamma)\times H^{1/2}(\Gamma)}=\left(\underline{\tilde{\lambda}},\underline{u}\right)_{H^{1/2}(\Gamma)}$$

dans ce cas $\underline{\tilde{\lambda}}$ est le représentant de l'effort $\underline{\lambda}=\boldsymbol{\sigma}\,\underline{n}$ dans $H^{1/2}(\Gamma)$. L'implémentation de ce type de produit scalaire sur $H^{1/2}(\Gamma)$ au sein de méthodes de décomposition de domaine (DDM) duale en 2D et mixte en 3D a été proposée par exemple respectivement dans [Bernardi *et al.*, 2008, Desmeure, 2016]. Cela permet en particulier une amélioration du taux de convergence du résidu (associé à la mesure du saut de déplacement et de déséquilbre d'effort sur l'interface) de l'algorithme itératif de résolution, amélioration due à la régularité imposée aux multiplicateurs (représentant dans $H^{1/2}(\Gamma)$). On notera que le terme de couplage peut s'avérer être complexe à calculer numériquement et couple l'ensemble des degrés de liberté de l'interface donnant lieu à un opérateur plein.

Cette approche ne répond cependant pas à la question de savoir quelle information pertinente est à transmettre à l'interface dans le cas de fortes incompatibilités de modèles. Il est d'ailleurs montrer dans [Desmeure, 2016] que l'introduction d'un problème grossier, macroscopique, dans l'algorithme de résolution de la DDM à un effet plus significatif sur le taux de convergence, au moins dans les premières itérations, que l'amélioration de la « qualité » des multiplicateurs de Lagrange qui agissent plus sur la convergence des quantités microscopiques. La question se pose donc de choisir des quantités d'interface macroscopiques judicieuses.

On s'intéresse donc dans cette illustration à l'approche plus physique évoquée précédemment qui consiste à choisir les espaces $\mathscr{M}$ ou $\mathscr{M}'$ en s'appuyant sur la connaissance *a priori* de la physique du problème. Plus précisément, on cherche à choisir un sous-espace de $\mathscr{M}$ ou $\mathscr{M}'$ permettant de transmettre la bonne information macroscopique. En suivant la démarche décrite proposée dans [Nouy, 2003] et reprise en annexe du **PREPRINT 2**, on construit des quantités macroscopiques et microscopiques qui vérifient le découplage des travaux microscopique et macroscopique :

$$\int_\Gamma \underline{F}\cdot\underline{W}\,\mathrm{d}\Gamma=\int_\Gamma \underline{F}^M\cdot\underline{W}^M\,\mathrm{d}\Gamma+\int_\Gamma \underline{F}^m\cdot\underline{W}^m\,\mathrm{d}\Gamma \tag{1.9}$$

les espaces macroscopiques $\mathscr{F}^M\subset\mathscr{F}(=\mathscr{M})$ et $\mathscr{W}^M\subset\mathscr{W}(=\mathscr{M}')$ étant choisis de façon à ce que la forme bilinéaire « travail macroscopique » soit non dégénérée (les espaces $\mathscr{F}^M$ et $\mathscr{W}^M$ ont donc même dimension). Les quantités macroscopiques $(\underline{F}^M,\underline{W}^M)\in\mathscr{F}^M\times\mathscr{W}^M$ de $(\underline{F},\underline{W})\in\mathscr{F}\times\mathscr{W}$ sont définies par :

$$\begin{cases}\underline{W}^M\in\mathscr{W}^M, & \displaystyle\int_\Gamma(\underline{W}^M-\underline{W})\cdot\underline{F}^{M^*}\,\mathrm{d}\Gamma=0, \quad \forall\,\underline{F}^{M^*}\in\mathscr{F}^M\\ \underline{F}^M\in\mathscr{F}^M, & \displaystyle\int_\Gamma(\underline{F}^M-\underline{F})\cdot\underline{W}^{M^*}\,\mathrm{d}\Gamma=0, \quad \forall\,\underline{W}^{M^*}\in\mathscr{W}^M\end{cases} \tag{1.10}$$

En d'autres termes, $\underline{F}^M$ (resp. $\underline{W}^M$) est la projection de $\underline{F}$ sur $\mathscr{F}^M$ (resp. $\underline{W}$ sur $\mathscr{W}^M$) parallèlement à $\left[\mathscr{W}^M\right]^\perp$ (resp. $\left[\mathscr{F}^M\right]^\perp$) où $[.]^\perp$ désigne l'espace orthogonal au sens de la forme bilinéaire travail de l'interface. Les quantités microscopiques en découlent : $\underline{F}^m=\underline{F}-\underline{F}^M$ et $\underline{W}^m=\underline{W}-\underline{W}^M$. Evidemment, en pratique, (1.9) et (1.10) doivent être satisfaites pour les espaces discrétisés $\mathscr{F}_h$ et $\mathscr{W}_h$ qui doivent être choisis judicieusement [Ladevèze *et al.*, 2002, Nouy, 2003].

Deux démarches peuvent alors être adoptées. A partir du choix de $\mathscr{F}^M$, on construit $\mathscr{W}^M$ (de même dimension) et les quantités macroscopiques de déplacement qui satisfont la première équation de (1.10). L'autre démarche consiste à choisir $\mathscr{W}^M$ puis à construire $\mathscr{F}^M$ et les quantités macroscopiques d'effort qui satisfont la deuxième équation de (1.10).

Le raccord par interface surfacique de deux modèles continus a été étudié au cours de la thèse de M. Wangermez sous la direction de O. Allix, en partenariat avec Safran Tech. Il s'intéresse à l'analyse de l'influence d'anomalies plus ou moins localisées dues au procédé de tissage sur le comportement global d'une structure composite tissée. A partir de l'analyse tomographique d'une pièce, l'anomalie détectée est modélisée et introduite dans un modèle de la structure « saine » par une approche locale-globale. De façon générale, le besoin d'inclure une zone d'intérêt décrite à l'échelle fine dans un milieu décrit à une échelle de description supérieure, macroscopique, est un besoin récurrent en ingénierie mécanique (**Figure 1.1**). Idéalement, en supposant qu'un modèle macroscopique pertinent ait pu être proposé (**Figure 1.1(b)**), on souhaiterait que le modèle hybride de la **Figure 1.1(c)** donne la même réponse dans la zone d'intérêt que le modèle fin de la **Figure 1.1(a)**, indisponible en pratique.

Deux difficultés se posent alors. La première est celle de la définition d'une solution de référence du problème couplé dans la mesure ou un comportement homogénéisé de la structure saine est discutable pour une structure dans laquelle la définition d'un volume élémentaire représentatif (séparation des échelles) n'est pas évidente. La deuxième question, pas totalement indépendante de la première, porte sur le fait que la zone d'intérêt pouvant être de taille non négligeable par rapport à celle de la structure, elle peut être soumise à des gradients de déformation relativement importants rendant délicate l'application des techniques d'homogénéisation classiques.

Afin de s'affranchir de la question de la pertinence du choix du modèle homogénéisé et de se concentrer sur le problème du couplage, le **PREPRINT 2** de l'article [Wangermez *et al.*, 2020] s'intéresse à l'analyse de structures périodiques académiques pour lesquelles les théories de l'homogénéisation sont applicables. Une **méthodologie de couplage originale basée sur l'homogénéisation au second ordre** a ainsi été proposée **sans nécessiter la construction explicite du comportement homogénéisé**.

A l'aide des notations de la **Figure 1.2(b)**, la trace du déplacement de l'équation (1.2) sur une interface Γ du VER s'écrit :

$$\underline{W}_\Gamma = \underline{u}_{|\Gamma} = \underline{u}_G^* + \left(\mathbf{F}^M - \mathbf{I}_d\right)\cdot d\underline{X} + \mathbf{G}^M : \Delta\underline{X}_G \otimes d\underline{X} + \frac{1}{2}\mathbf{G}^M : d\underline{X}\otimes d\underline{X} + \underline{w} \tag{1.11}$$

avec $d\underline{X} = \underline{X} - \underline{X}_G$, $\Delta\underline{X}_G = \underline{X}_G - \underline{X}_C$ et :

$$\underline{u}_G^*\left(\mathbf{F}^M, \mathbf{G}^M, \underline{u}_C, \Delta\underline{X}_G\right) = \underline{u}_C + \left(\mathbf{F}^M - \mathbf{I}_d\right)\cdot\Delta\underline{X}_G + \frac{1}{2}\mathbf{G}^M : \Delta\underline{X}_G\otimes\Delta\underline{X}_G$$

En décomposant $\mathbf{F}^M$ en sa partie symétrique ε^M et sa partie anti-symétrique $\mathbf{\Omega}^M = \underline{\omega}^M\wedge$, il est intéressant de noter que :

$$\underline{W}_\Gamma = \underbrace{\underline{u}_G^* + \underline{\omega}^M\wedge d\underline{X}}_{\text{Mouv. de corps rigide}} + \underbrace{\varepsilon^M\cdot d\underline{X} + \mathbf{G}^M : \Delta\underline{X}_G\otimes d\underline{X}}_{\text{Déformation linéaire en } d\underline{X}} + \underbrace{\frac{1}{2}\mathbf{G}^M : d\underline{X}\otimes d\underline{X}}_{\text{Déformation quadratique en } d\underline{X}} + \underline{w} \tag{1.12}$$

A partir des relations (1.11) ou (1.12), il est possible de proposer un espace macroscopique des déplacements d'interface $\mathscr{W}^M \subset \mathscr{W}$ qui extrait la partie constante (T, translation, « moyenne ») et les parties linéaire (L) et quadratique (Q) en $d\underline{X}$:

$$\begin{cases} \underline{W}_\Gamma^M &= \mathbf{\Pi}_\Gamma^M\left(\underline{W}_\Gamma\right) = \mathbf{\Pi}_\Gamma^T\left(\underline{W}_\Gamma\right) + \mathbf{\Pi}_\Gamma^L\left(\underline{W}_\Gamma\right) + \mathbf{\Pi}_\Gamma^Q\left(\underline{W}_\Gamma\right) = \underline{W}_\Gamma^T + \underline{W}_\Gamma^L + \underline{W}_\Gamma^Q \\ \underline{W}_\Gamma^m &= \underline{W}_\Gamma - \underline{W}_\Gamma^M = \left(\mathbf{I}_d - \mathbf{\Pi}_\Gamma^M\right)\left(\underline{W}_\Gamma\right) \end{cases}$$

On notera au passage que, bien que la fluctuation $\underline{w}$ soit périodique, sa partie linéaire sur l'interface Γ, $\mathbf{\Pi}^L_\Gamma\left(\underline{w}_\Gamma\right)$, n'est pas nécessairement nulle.

Différents choix de fonctions de base de l'espace $\mathscr{W}^M$ et projecteurs peuvent être proposés. Cependant, **on s'assure ici que (i) la propriété de découplage des travaux micro et macro** (1.9) **est vérifiée et (ii) que les parties linéaire et quadratique sont à « moyenne » nulle**, autrement dit que les projecteurs linéaires (L) et quadratique (Q) sont orthogonaux au projecteur (T). Plus précisément, à la lueur de (1.12), on utilise la base macroscopique quadratique et le projecteur associé $\mathbf{\Pi}^M_\Gamma$ comme utilisés dans [Loiseau, 2001, Guidault *et al.*, 2005, Violeau, 2007] et qui vérifient ces propriétés. En particulier, cela permet par construction de satisfaire la deuxième condition d'admissibilité du système (1.4). Un point intéressant également est que la définition du projecteur $\mathbf{\Pi}^M_\Gamma$ ainsi retenue est faite avant toutes discrétisations et peut être obtenue à partir de simples opérations géométriques intrinsèques à l'interface (centre de gravité, base principale d'inertie, opérateur d'inertie).

L'équation (1.11) (ou (1.12)) met en évidence que les parties macroscopiques $\underline{W}^M_\Gamma$ sur chaque face du VER sont liées à l'état de déformation macroscopique défini par $\mathbf{F}^M$ et $\mathbf{G}^M$ ainsi qu'au déplacement de mouvement de corps rigide du VER. Plus précisément, en 2D dans le cas d'un VER rectangulaire comme décrit en **Figure 1.2**, les 24 composantes macroscopiques (6 par interface) sont liées au 10 composantes associées à $\mathbf{F}^M$ (4) et $\mathbf{G}^M$ (6 en tenant compte des symétries) et au déplacement du centre C du VER (2). **Si l'on souhaite transmettre le bon état de déformation à la zone d'intérêt par le couplage, il est donc crucial d'imposer les bonnes conditions cinématiques de couplage sur les quantités macroscopiques et d'admissibilité sur les quantités microscopiques.**

Dans le **PREPRINT 2** de l'article [Wangermez *et al.*, 2020] pour le cas d'un VER rectangulaire (**Figure 1.2**), les conditions suivantes sont ainsi proposées pour le couplage du modèle grossier (C) et du modèle fin (F) :

— Continuité des « moyennes » (T) des déplacements sur chaque interface du VER :

$$\underline{W}^{T,C}_\Gamma = \underline{W}^{T,F}_\Gamma \tag{1.13}$$

— Egalité des sauts des parties linéaires (L) des déplacements (à « moyenne » nulle) entre chaque paire d'interface $\Gamma^+ - \Gamma^-$:

$$\underline{W}^{L,C}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{L,C}_{\Gamma^-} = \underline{W}^{L,F}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{L,F}_{\Gamma^-} \tag{1.14}$$

— Continuité du déplacement dans un coin A du VER :

$$\underline{u}^C(A) = \underline{u}^F(A) \tag{1.15}$$

La dernière condition, motivée par le fait que la fluctuation $\underline{w}$ est nulle dans les coins du VER car périodique pour une cinématique macroscopique du second gradient, permet implicitement de lever une indétermination sur un mode de déplacement macroscopique quadratique. Cette indétermination pourrait être levée en imposant une continuité sur une des faces du VER d'une composante de déplacement quadratique. Ce choix n'a pas été retenu car il est tributaire de la qualité du maillage du modèle grossier et de sa capacité à représenter un champ de déplacement quadratique sur l'interface. **L'avantage du choix fait des conditions de couplage** (1.13) **à** (1.15) **est qu'il est indépendant des espaces d'approximation du déplacement sur l'interface $\mathscr{W}^F_h$ et $\mathscr{W}^C_h$ des modèles à coupler.** D'autres choix pourraient être proposés comme par exemple celui de la minimisation du saut de déplacement à l'interface entre les modèles par correction d'un mode de corps rigide de la zone d'intérêt.

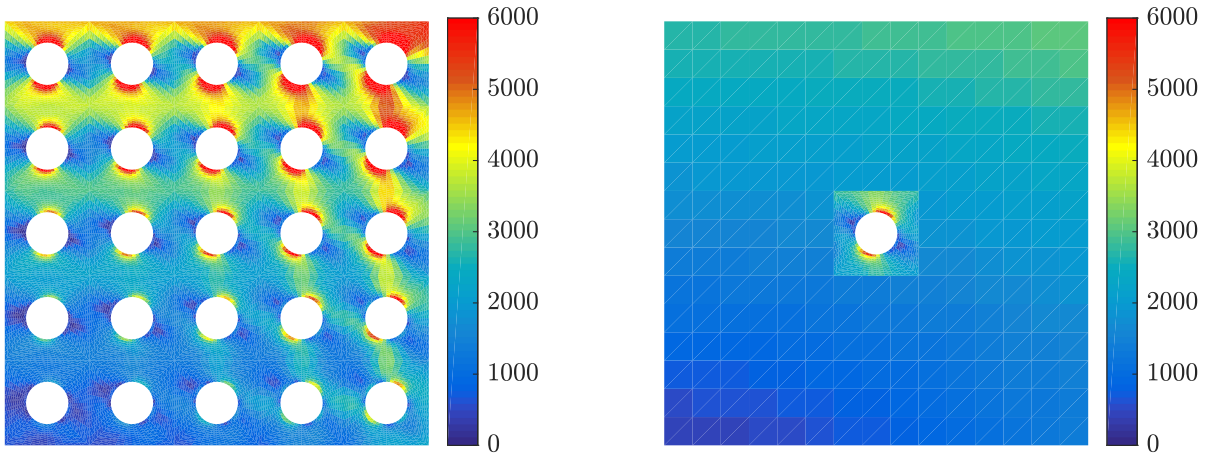
Enfin aux conditions de couplage (1.13) à (1.15) et afin d'obtenir une cinématique de second gradient et de vérifier la condition de périodicité du système (1.4), on impose les conditions de pério-

dicité suivantes aux parties quadratiques (Q) et aux parties microscopiques (m) entre chaque paire d'interface $\Gamma^+ - \Gamma^-$ de chaque modèle α :

$$\begin{cases} \underline{W}^{Q,\alpha}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{Q,\alpha}_{\Gamma^-} &= \underline{0} \\ \underline{W}^{m,\alpha}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{m,\alpha}_{\Gamma^-} &= \underline{0} \end{cases} \tag{1.16}$$

On notera qu'il est tout-à-fait envisageable de relâcher ces conditions suivant les cas traités. On pourrait également envisager d'imposer d'autres propriétés que la périodicité des parties microscopiques afin de prendre en compte des effets de bords ou des conditions limites particulières. L'extension de la méthode de couplage au 3D à un VER de forme parallélépipédique est brièvement décrite dans le **PREPRINT 2** et mise en œuvre dans [Wangermez, 2020] (voir aussi l'exemple de la **Figure 1.16**).

La **Figure 1.12** illustre la situation d'une structure hétérogène périodique soumise à des conditions limites de déplacement sur son bord extérieur visant à imposer un état de déformation macroscopique linéaire. Le comportement macroscopique du modèle grossier a été obtenu par homogénéisation périodique au premier ordre. La méthode de couplage proposée permet d'obtenir une solution dans la zone/VER d'intérêt au centre (**Figure 1.12(b)**) en très bon accord avec les résultats du modèle de référence (**Figure 1.12(a)**) et **de meilleure qualité qu'une méthode Mortar « classique »** qui n'opère pas de séparation des échelles. Le couplage à deux échelles proposé permet d'obtenir des résultats qui sont **indépendants de la qualité du maillage du domaine grossier** dès lors que celui-ci peut représenter correctement un champ de déformation linéaire.



(a) Modèle de référence (b) Modèle couplé

Figure 1.12 – Contrainte équivalente de von-Mises pour des conditions de déplacement sur le bord extérieur visant à imposer un état de déformation macroscopique linéaire sur la structure [Wangermez *et al.*, 2020]

➜ Bilan et perspectives

Deux illustrations de couplage de modèles dans le cas d'une interface volumique et surfacique ont été proposées. Au delà d'arguments mathématiques sur le choix des espaces d'approximation, un raccord à fort contenu mécanique permet généralement de transmettre la « bonne information » entre les modèles. Si ce travail est plus facile pour le couplage surfacique, il peut s'avérer être plus

compliqué pour un raccord volumique. Dans tous les cas, le choix de l'information pertinente dépend de la situation de couplage envisagée et demande une bonne connaissance de la physique des modèles à coupler.
Dans le cas du couplage surfacique de modèles, une **méthodologie de couplage originale basée sur l'homogénéisation au second ordre** a été proposée **sans nécessiter la construction explicite du comportement homogénéisé**. Ce raccord permet de transmettre le bon état de déformation macroscopique sur une zone d'intérêt, compatible avec le comportement macroscopique d'un modèle grossier. Le point clé a consisté à opérer la bonne séparation des échelles non pas au niveau des interfaces mais, globalement, au niveau de la cellule d'intérêt et d'en déduire les conditions de couplage adéquates.

Le choix d'une cellule d'intérêt de forme parallélépipédique peut paraitre restrictive mais répond bien au cas d'application visé par Safran Tech pour lequel la zone d'intérêt est modélisée à partir d'une « boîte de sélection » d'une zone de pixels issue d'une tomographie 3D d'une pièce composite. On peut cependant envisager d'**étendre la méthode au cas de zone d'intérêt présentant une certaine incompatibilité topologique avec le maillage du modèle grossier**. Dans le cas de faible incompatibilité comme pour une zone quasi-parallélépipédique, la définition des quantités macroscopiques proposées qui ne dépend pas de la discrétisation a encore du sens et mériterait d'être étudiée. Dans des situations d'incompatibilité topologique plus importante, un couplage volumique pourrait être proposé. Les conditions de couplage devraient alors être revisitées.
Un autre aspect intéressant est l'étude plus approfondie des conditions de couplage et d'admissibilité dans le cas d'une zone d'intérêt située sur le bord du domaine d'étude ou plus généralement dans le cas où une cinématique du second gradient n'est plus pertinente. **La prise en compte d'effets de bords pourraient alors être étudiée.**
Enfin, à plus long terme, **l'application à des comportements matériaux plus complexes** (plasticité, endommagement, fissuration...) mérite d'être considérée. Il en découle naturellement le souhait de vouloir suivre l'évolution du dommage éventuel occasionné par ces non-linéarités et de pouvoir **adapter et contrôler la taille de la zone d'intérêt de façon adéquate**. Dans le cas d'application visé par Safran Tech dans le cadre de la thèse de M. Wangermez, la question de la tolérance à une éventuelle anomalie due au procédé de tissage détectée par tomographie dans une aube composite est en effet une question d'importance pour réduire le nombre de pièces rebutées.

4 Couplage non-intrusif de codes de calcul

La troisième question porte sur la **résolution efficace du problème couplé**. Le **Problème 1** précédent peut être résolu, après discrétisation, de façon monolithique. Cependant, dans le cadre du couplage de modèles, le **couplage/interfaçage de codes de calcul**, chacun en charge d'un des modèles, est souvent de mise. Une résolution itérative du problème couplé est alors plus adaptée. De la même façon, en analyse locale-globale, il est souhaitable de pouvoir substituer de façon itérative le comportement du modèle fin dans celui du modèle grossier de la structure. L'enjeu consiste alors à développer une **méthode de couplage non-intrusive** permettant d'obtenir à convergence une approximation de la solution du problème couplé en un minimum d'itérations.

Le qualificatif *non-intrusif* signifie que le couplage doit être réalisé en utilisant uniquement des fonctionnalités et des données facilement disponibles et accessibles dans les codes couplés. Dans un souci d'efficacité, on comprend aisément que les échanges de données entre codes et donc le nombre d'itérations de l'algorithme de couplage doit être limité.

➜ Revue (non exhaustive) des méthodes d'analyse locale-globale

La littérature sur les stratégies et techniques de calcul permettant de mener des analyses locales-globales est considérable et il est difficile d'en dresser une liste exhaustive. On peut cependant les classifier selon leur précision (qualité du résultat obtenu dans la zone locale d'intérêt), leur efficacité et leur facilité d'implémentation dans un code de calcul (degré d'intrusivité du développement).

Les méthodes de condensation statique et de réanalyse structurale : Elles ont vu le jour notamment pour pallier les problèmes de manque de mémoire des ordinateurs. Elle permettent d'apprécier l'influence d'un raffinement local d'un maillage grossier sur la réponse globale de la structure.
Les méthodes de condensation statique (ou « super-élément ») s'appuient sur le calcul du complément de Schur sur le bord de la zone d'intérêt (ou de la zone complémentaire supposée restée dans son domaine élastique) connue a priori [Clough et Wilson, 1979, Tao-Yang et Abel, 1985]. Cependant, ce calcul et le post-traitement pour une zone à grand nombre de degrés de liberté peuvent être coûteux. Aussi, la condensation est généralement limitée au cas de structure linéaire.
Les techniques de réanalyse structurale ont pour objectif d'évaluer l'effet d'une modification plus ou moins localisée d'une structure sans calculer l'intégralité du problème et en exploitant une solution obtenue au préalable sur la structure non-modifiée (voir p. ex. [Kirsch, 2008]). Les méthodes directes consistent généralement à modifier l'inverse de la matrice de raideur en s'appuyant par exemple sur les formules de Sherman-Morrison ou de Woodbury. La méthode est intéressante quand les modifications dans la matrice de raideur sont de rang faible, en particulier quand les modifications sur la structure sont localisées. Les méthodes itératives sont plus adaptées dans le cas de zones modifiées plus étendues [Das, 1978, Kirsch, 1981, Ding et Gallagher, 1985].
Les techniques de zoom exact [Hirai *et al.*, 1984, Hirai *et al.*, 1985] permettent de faire plusieurs niveaux imbriqués de réanalyse et combinent techniques de réanalyse structurale et techniques de condensation statique.
Bien qu'« exacte » dans le sens où l'on obtient bien la solution désirée du problème modifié, cette famille de méthode est souvent limitée par essence au cas de maillages compatibles et souvent au cas linéaire.

Les approches descendantes : Elles consistent à réaliser une analyse globale dont la solution sert de donnée d'entrée pour l'analyse locale. L'analyse locale peut être pilotée à partir des déplacements extraits de la solution du problème global. Cette technique est généralement disponible dans la plupart des codes éléments finis du commerce sous le nom de *submodeling*. Le modèle local peut également être piloté en effort [Kitamura et Gu, 2001] ou bien par des efforts corrigés qui prennent en compte la rigidité des éléments d'interface [Jara-Almonte et Knight, 1988]. Cette dernière méthode est cependant plus difficile à implémenter car nécessitant l'accès à la rigidité des éléments d'interface.
Ces méthodes ont l'avantage d'être peu coûteuses, non-intrusives et facilement implémentables. Cependant, leur défaut principal réside dans le fait que l'influence du problème local n'est pas prise en compte dans la solution du problème global et des erreurs très importantes peuvent être commises dans la zone d'intérêt par rapport à une méthode de calcul exact. Pour répondre à cette difficulté, des approches itératives ont été proposées par exemple par [Mao et Sun, 1991, Whitcomb, 1991] qui proposent une démarche en trois temps (analyse globale, analyse locale, analyse globale raffinée) et étendues à des problèmes de non-linéarités géométriques dans [Whitcomb et Woo, 1993a, Whitcomb et Woo, 1993b].

Les approches par superposition : La s-méthode permet de superposer un patch local à un modèle global, toujours dans l'idée d'insérer un détail de structure sans avoir à modifier le modèle existant

qui a pu demander de longues périodes de mise en données [Fish, 1992]. La méthode variationnelle multi-échelle [Hughes, 1995] reprend ces idées mais pour enrichir l'espace d'approximation par des fonctions analytiques ou numériques sur le support d'un ou plusieurs éléments finis du maillage global. On pourra également citer la *splitting method* pour prendre en compte des micro-fissures dans un modèle d'une structure saine [Babuska et Andersson, 2005] ou la HDPM (*Homogenized Dirichlet Projection Method*) [Zohdi *et al.*, 1996, Oden et Zohdi, 1997, Moës *et al.*, 1998, Oden *et al.*, 1999].
Ces approches font cependant une hypothèse cinématique selon laquelle la partie microscopique du déplacement est nulle sur le bord de la zone enrichie ou du patch local ce qui peut être une hypothèse un peu restrictive. Aussi, elles sont souvent adaptées dans le cas où la microstructure du modèle fin n'influe pas trop sur la solution dans la zone de raccord, ce qui impose une zone d'intérêt (modèle fin) souvent plus large que nécessaire. Elles nécessitent également des développements conséquents pour une utilisation dans un code éléments finis classique et de ce point de vue, demandent un niveau important d'intrusivité.

Les approches « non-intrusives » par sous-structuration : Elles consistent à partitionner le domaine d'étude en un domaine décrit par un modèle global/grossier et un domaine décrit par un modèle local/fin et d'essayer de les raccorder comme présenté en **Section 3** (**Figure 1.13**). Elles empruntent

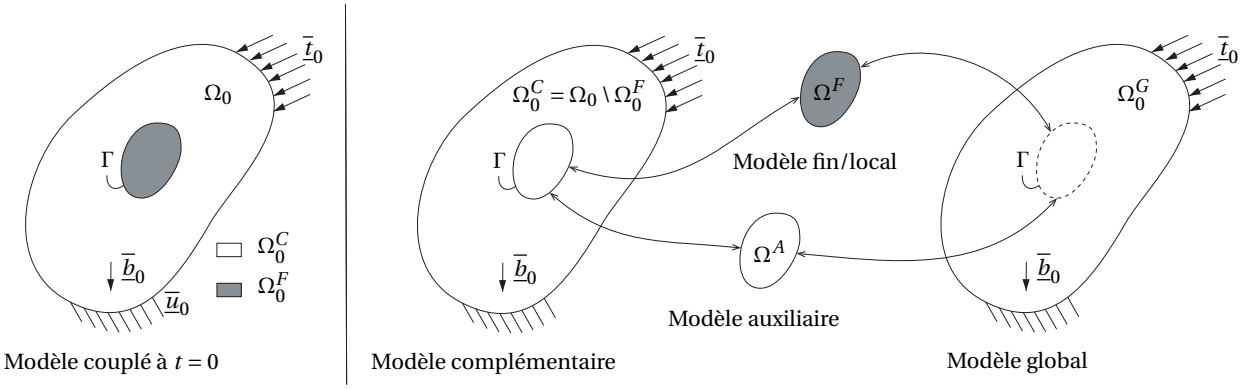


Figure 1.13 – Modèles pour l'analyse locale-globale d'une structure par couplage surfacique sur l'interface Γ : modèle global Ω^G, modèle local/fin Ω^F, modèle auxiliaire Ω^A et modèle complémentaire $\Omega^C = \Omega \setminus \Omega^F$

souvent les algorithmes de résolution développées en DDM. Quelques-unes de ces méthodes dans le cadre non-linéaire seront discutées au **Chapitre 2**. Il convient cependant de les adapter afin de les rendre facilement implémentable dans un code de calcul, quitte à en dégrader un peu les performances mais sans compromis sur la qualité de la solution, et de ne pas changer la mise en données du modèle global initial.
Une première méthode de résolution, simple, consiste à résoudre le **Problème 1** par un algorithme de point fixe (**Algorithme 1**). Cependant, afin de ne pas modifier le modèle global initial, l'**Algorithme 1** peut être modifié de façon à faire intervenir le domaine global Ω^G au lieu du domaine complémentaire Ω^C présentant un vide en lieu et place du modèle fin Ω^F. En effet, en introduisant le modèle auxiliaire tel que $\Omega^G = \Omega^C \cup \Omega^A$ (voir **Figure 1.13**), on peut écrire :

$$a^A\left(\underline{u}^A, \delta\underline{u}^A\right) = l^A\left(\delta\underline{u}^A\right) + b\left(\underline{\lambda}^A, \delta\underline{u}^A\right)$$

où $\underline{\lambda}^A$ correspond à l'action exercée sur l'interface Γ par le domaine complémentaire Ω^C sur le do-

Algorithme 1 : Algorithme de point fixe pour résoudre le **Problème 1**

Data : *initialization* $\underline{\lambda}_0 \leftarrow \underline{0}$, $n \leftarrow 0$
while *not at convergence* **do**
Coarse model problem : Find $\underline{u}^C_{n+1} \in \mathscr{U}^C$ such that :

$$a^C\left(\underline{u}^C_{n+1}, \delta\underline{u}^C\right) = l^C\left(\delta\underline{u}^C\right) - b\left(\underline{\lambda}_n, \delta\underline{u}^C\right), \quad \forall \delta\underline{u}^C \in \mathscr{U}^C_0 \tag{1.17}$$

Fine model problem : Find $\left(\underline{u}^F_{n+1}, \underline{\lambda}_{n+1}\right) \in \mathscr{U}^F \times \mathscr{M}$ such that :

$$\begin{cases} a^F\left(\underline{u}^F_{n+1}, \delta\underline{u}^F\right) - b\left(\underline{\lambda}_{n+1}, \delta\underline{u}^F\right) &= l^F\left(\delta\underline{u}^F\right), & \forall \delta\underline{u}^F \in \mathscr{U}^F_0 \\ b\left(\delta\underline{\lambda}, \underline{u}^C_{n+1} - \underline{u}^F_{n+1}\right) &= 0 & \forall \delta\underline{\lambda} \in \mathscr{M} \end{cases}$$

Convergence test
end

maine auxiliaire Ω^A. En sommant cette équation avec (1.17), on obtient alors :

$$\underbrace{a^C\left(\underline{u}^C, \delta\underline{u}^C\right) + a^A\left(\underline{u}^A, \delta\underline{u}^A\right)}_{a^G} = \underbrace{l^C\left(\delta\underline{u}^C\right) + l^A\left(\delta\underline{u}^A\right)}_{l^G} + b\left(\underline{\lambda}^A, \delta\underline{u}^A\right) - b\left(\underline{\lambda}, \delta\underline{u}^C\right)$$

avec $\underline{u}^A = \underline{u}^C$ sur Γ. Ainsi, on peut alors définir le problème sur le domaine global Ω^G suivant : trouver $\underline{u}^G \in \mathscr{U}^G = \left\{\underline{u}^G \in [H^1(\Omega^G]^d \,|\, \underline{u}^G = \overline{\underline{u}} \text{ sur } \partial_u\Omega^G\right\}$ tel que :

$$a^G\left(\underline{u}^G, \delta\underline{u}^G\right) = l^G\left(\delta\underline{u}^G\right) + b\left(\underline{\lambda}^A, \delta\underline{u}^G\right) - b\left(\underline{\lambda}, \delta\underline{u}^G\right), \quad \forall \delta\underline{u}^G \in \mathscr{U}^G_0$$

On peut ainsi proposer l'algorithme local-global classique décrit par l'**Algorithme 2**.
A partir de (1.18), on peut définir le multiplicateur $\underline{\lambda}^G$ par :

$$b\left(\underline{\lambda}^G_n, \delta\underline{u}^G\right) := a^G\left(\underline{u}^G_{n+1}, \delta\underline{u}^G\right) - l^G\left(\delta\underline{u}^G\right) = b\left(\underline{\lambda}^A_n, \delta\underline{u}^G\right) - b\left(\underline{\lambda}_n, \delta\underline{u}^G\right), \quad \forall \delta\underline{u}^G \in \mathscr{U}^G_0 \tag{1.20}$$

On montre alors facilement [Gosselet *et al.*, 2018] sous forme continue (ainsi $\mathscr{U}^A_0 = \mathscr{U}^F_0 = \mathscr{U}^G_{|\Omega^A}$) que :

$$b\left(\underline{\lambda}^G_{n+1}, \delta\underline{u}\right) = b\left(\underline{\lambda}^G_n, \delta\underline{u}\right) - \underbrace{\left[b\left(\underline{\lambda}^C_{n+1}, \delta\underline{u}\right) + b\left(\underline{\lambda}_{n+1}, \delta\underline{u}\right)\right]}_{\text{residu d'équilibre du problème couplé}}, \quad \forall \delta\underline{u} \in \mathscr{U}^G_0 \tag{1.21}$$

L'algorithme converge lorsque le résidu d'équilibre entre le modèle complémentaire Ω^C et le modèle fin Ω^F (voir (1.19)) s'annule et que la quantité $\underline{\lambda}^G_n$ converge. Cela correspond donc bien à vouloir résoudre le problème couplé de la **Figure 1.13**. On notera que, au moins en continu, le modèle auxiliaire n'intervient pas. Aussi, il peut être choisi arbitrairement et n'a pas besoin, par exemple, de représenter de façon précise la microstructure comme cela se doit dans le modèle fin. Sous forme discrétisée, ce choix doit cependant être fait afin d'assurer la convergence de l'algorithme de point fixe associé [Gosselet *et al.*, 2018].
Un point intéressant de l'**Algorithme 2** est sa modularité et le fait que des codes de calcul différents peuvent être utilisés pour résoudre le problème local (1.19) et le problème global (1.18), ce qui le rend très attractif pour une utilisation dans un contexte industriel. Un autre intérêt est son écriture générale qui reste valable en non-linéaire.
Cet algorithme est à la base de la méthode de couplage non-intrusive proposée dans [Allix *et al.*, 2011, Gendre, 2009, Gendre *et al.*, 2009]. Sa version initiale partage de fortes similitudes avec les travaux

Algorithme 2 : Algorithme local-global classique pour résoudre le **Problème 1**

Data : *initialization* $\underline{\lambda}_0 \leftarrow 0$, $n \leftarrow 0$
while *not at convergence* **do**
Global model problem : Find $\underline{u}^G_{n+1} \in \mathscr{U}^G$ such that :

$$a^G\left(\underline{u}^G_{n+1}, \delta\underline{u}^G\right) = l^G\left(\delta\underline{u}^G\right) + b\left(\underline{\lambda}^A_n, \delta\underline{u}^G\right) - b\left(\underline{\lambda}_n, \delta\underline{u}^G\right), \quad \forall\, \delta\underline{u}^G \in \mathscr{U}^G_0 \tag{1.18}$$

Local/Fine model problem : Find $\left(\underline{u}^F_{n+1}, \underline{\lambda}_{n+1}\right) \in \mathscr{U}^F \times \mathscr{M}$ such that :

$$\left\{\begin{array}{rcll} a^F\left(\underline{u}^F_{n+1}, \delta\underline{u}^F\right) - b\left(\underline{\lambda}_{n+1}, \delta\underline{u}^F\right) & = & l^F\left(\delta\underline{u}^F\right), & \forall\, \delta\underline{u}^F \in \mathscr{U}^F_0 \\ b\left(\delta\underline{\lambda}, \underline{u}^F_{n+1} - \underline{u}^G_{n+1}\right) & = & 0 & \forall\, \delta\underline{\lambda} \in \mathscr{M} \end{array}\right. \tag{1.19}$$

Auxiliary model problem : Find $\left(\underline{u}^A_{n+1}, \underline{\lambda}^A_{n+1}\right) \in \mathscr{U}^F \times \mathscr{M}$ ($\mathscr{U}^A = \mathscr{U}^G_{|\Omega^A}$) such that :

$$\left\{\begin{array}{rcll} a^A\left(\underline{u}^A_{n+1}, \delta\underline{u}^A\right) - b\left(\underline{\lambda}^A_{n+1}, \delta\underline{u}^A\right) & = & l^A\left(\delta\underline{u}^A\right), & \forall\, \delta\underline{u}^A \in \mathscr{U}^A_0 \\ b\left(\delta\underline{\lambda}^A, \underline{u}^A_{n+1} - \underline{u}^G_{n+1}\right) & = & 0 & \forall\, \delta\underline{\lambda}^A \in \mathscr{M} \end{array}\right.$$

Convergence test
end

de [Whitcomb, 1991]. Une synthèse de cette famille de méthodes et variantes est présentée dans [Gosselet *et al.*, 2018] et les techniques classiques d'accélération et propriétés de convergence y sont discutées. On trouvera également une application très pédagogique de ce type d'algorithmes sur un exemple simple dans [Allix et Gosselet, 2020].
On trouvera dans la littérature des applications de ce type d'algorithmes pour capturer des zones de plasticité localisées [Gendre *et al.*, 2009, Blanchard *et al.*, 2019], le couplage de modèles déterministe et stochastique [Chevreuil *et al.*, 2013], l'introduction d'un modèle volumique de liaison boulonnée dans un modèle plaque [Guguin *et al.*, 2016] ou pour le raccord d'un modèle volumique et d'un modèle plaque [Guguin *et al.*, 2014], la simulation de la propagation de fissure par l'implémentation non-intrusive d'une méthode de décomposition de domaine non-linéaire dans Code_Aster™ [Duval *et al.*, 2016] ou par une approche multigrille avec la X-FEM dans [Passieux *et al.*, 2013], la rupture fragile par la méthode *phase-field* [Gerasimov *et al.*, 2018], le couplage de modèles NURBS et éléments finis [Bouclier *et al.*, 2016]. Des extensions à la dynamique sont proposées dans [Bettinotti *et al.*, 2014a, Bettinotti *et al.*, 2014b, Bettinotti *et al.*, 2017] ainsi que dans [Chantrait *et al.*, 2014].

Les méthodes de couplage non-intrusives décrites précédemment ne s'intéressent pas toujours à la question du raccord de modèles incompatibles et de l'information à transmettre entre les modèles. Par ailleurs, certaines hypothèses cinématiques sur le raccord de maillages incompatibles sont parfois trop restrictives (raccord à déplacement ou effort microscopiques nuls). L'illustration suivante permet de montrer comment intégrer des conditions de raccord spécifiques de manière non-intrusive dans un code de calcul afin de transmettre un état de déformation macroscopique sur une zone d'intérêt localisée.

➜ Illustration : analyse locale-globale non-intrusive d'un composite tissé stratifié

S'appuyant sur les travaux de O. Allix et P. Gosselet [Allix *et al.*, 2011, Gendre *et al.*, 2009], une **implémentation non-intrusive de la méthode de couplage décrite dans le PREPRINT 2 a été réalisée dans le code Z-set™ (ZéBuLoN)** utilisé par Safran Tech.

La prise en compte de contraintes cinématiques par multiplicateurs de Lagrange ou par pénalisation n'est pas nécessairement disponible en standard dans un code éléments finis commercial. Aussi, les conditions de couplage (1.13) à (1.15) et les conditions d'admissibilité (1.16) sur les modèles couplés (C) et (F) sont réécrites afin d'éviter certaines redondances, associées à la périodicité des parties microscopiques, et de faciliter leur implémentation à partir de *Multi-Point Constraints* (MPC), relations linéaires entre les degrés de liberté, classiquement disponibles dans les codes. Ainsi, les contraintes suivantes, pour toute paire d'interface $\Gamma^+ - \Gamma^-$ et un coin A du VER :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \underline{W}^{T,F}_{\Gamma^+} & = & \underline{W}^{T,C}_{\Gamma^+} \\ \underline{W}^{T,F}_{\Gamma^-} & = & \underline{W}^{T,C}_{\Gamma^-} \\ \underline{W}^{L,F}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{L,F}_{\Gamma^-} & = & \underline{W}^{L,C}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{L,C}_{\Gamma^-} \\ \underline{u}^F(A) & = & \underline{u}^C(A) \end{array}\right. \quad \text{et} \quad \left\{\begin{array}{rcl} \underline{W}^{Q,C}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{Q,C}_{\Gamma^-} & = & \underline{0} \\ \underline{W}^{m,C}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{m,C}_{\Gamma^-} & = & \underline{0} \\ \underline{W}^{Q,F}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{Q,F}_{\Gamma^-} & = & \underline{0} \\ \underline{W}^{m,F}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{m,F}_{\Gamma^-} & = & \underline{0} \end{array}\right.$$

sont réécrites sous la forme équivalente suivante :

$$(\mathscr{B})\left\{\begin{array}{rcl} \underline{W}^{T,F}_{\Gamma^-} & = & \underline{W}^{T,C}_{\Gamma^-} \\ \underline{W}^{F}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{F}_{\Gamma^-} & = & \underline{W}^{T,C}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{T,C}_{\Gamma^-} + \underline{W}^{L,C}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{L,C}_{\Gamma^-} \\ \underline{u}^F(A) & = & \underline{u}^C(A) \end{array}\right. \quad \text{et} \quad (\mathscr{P})\left\{\begin{array}{rcl} \underline{W}^{Q,C}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{Q,C}_{\Gamma^-} & = & \underline{0} \\ \underline{W}^{m,C}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{m,C}_{\Gamma^-} & = & \underline{0} \end{array}\right. \tag{1.22}$$

Les nouvelles conditions de couplage ($\mathscr{B}$) (à gauche dans (1.22)) ne font plus intervenir sur le modèle fin (F) que le saut de déplacement entre paires d'interfaces, $\underline{W}^F_{\Gamma^+} - \underline{W}^F_{\Gamma^-}$, la moyenne du déplacement sur chaque interface, $\underline{W}^{T,F}_{\Gamma^-}$ et le déplacement d'un coin, $\underline{u}^F(A)$. Ces quantités sont indépendantes et les parties microscopiques sur le modèle fin, $\underline{W}^{m,F}_{\Gamma}$, n'interviennent plus. Dans le cas d'un état de déformation macroscopique uniforme, le saut des parties linéraires $\underline{W}^{L,C}_{\Gamma^+} - \underline{W}^{L,C}_{\Gamma^-}$ étant nul, on retrouve la condition imposée sur le saut de déplacement des paires d'interfaces en vis-à-vis sur un VER, $\underline{W}^F_{\Gamma^+} - \underline{W}^F_{\Gamma^-} = \varepsilon^M(\underline{X}^+ - \underline{X}^-)$, couramment employée en homogénéisation au premier ordre pour construire l'opérateur homogénéisé, les conditions sur la moyenne du déplacement d'une face et du déplacement d'un coin permettant de fixer le mouvement de corps rigide du VER.

Les conditions d'admissibilité de périodicité ($\mathscr{P}$) (à droite dans (1.22)) ne portent que sur le modèle grossier (C). On notera que la condition de périodicité des parties microscopiques peut être relâchée dans la mesure où la finesse du maillage du modèle grossier ne permet pas nécessairement de décrire correctement les phénomènes à l'échelle microscopique. En d'autres termes, cela revient par dualité à imposer une condition d'effort microscopique nul, $\underline{F}^{m,C}_{\Gamma} = \underline{0}$ sur les interfaces du modèle grossier. La condition (1.9) de séparation des travaux micro et macro permet de s'assurer que ce choix ne perturbe pas la solution dans la zone d'intérêt (F).

On notera que le système (1.22) n'est valable que dans le cas où une cinématique second gradient est souhaitée. Dans le cas où certaines hypothèses cinématiques sont levées, comme par exemple la périodicité, ce travail de réécriture des conditions de couplage doit être revisité.

L'**Algorithme 2** est réécrit selon l'**Algorithme 3** de façon à se prêter à une résolution qui est la moins « intrusive » possible, c'est-à-dire de façon (i) à ne pas nécessiter de fonctionnalités trop avancées pour prendre en compte les relations ($\mathscr{B}$) et ($\mathscr{P}$), (ii) à ne faire intervenir que des résolutions de problèmes classiques pas sous-domaine, à effort ou déplacement imposé, (iii) à n'échanger entre les sous-domaines couplés que des quantités nodales d'effort ou de déplacement qui sont des entrées et sorties standards dans la plupart des codes éléments finis.

Algorithme 3 : Algorithme local-global non-intrusif pour résoudre le **Problème 1**

Data : *initialization* $\underline{\lambda}_0 \leftarrow 0$, $n \leftarrow 0$

while *not at convergence* **do**

Global model problem : Find $\underline{u}^G_{n+1} \in \mathscr{U}^G$ under the periodicity constraints ($\mathscr{P}$) such that :

$$a^G\left(\underline{u}^G_{n+1}, \delta\underline{u}^G\right) = l^G\left(\delta\underline{u}^G\right) + b\left(\underline{\lambda}^A_n, \delta\underline{u}^G\right) - b\left(\underline{\lambda}_n, \delta\underline{u}^G\right), \quad \forall\, \delta\underline{u}^G \in \mathscr{U}^G_0 \tag{1.23}$$

Local/Fine model problem : Find $\underline{u}^F_{n+1} \in \mathscr{U}^F$ under the coupling constraints ($\mathscr{B}$) such that :

$$a^F\left(\underline{u}^F_{n+1}, \delta\underline{u}^F\right) = l^F\left(\delta\underline{u}^F\right), \quad \forall\, \delta\underline{u}^F \in \mathscr{U}^F_0 \tag{1.24}$$

Then, compute term :

$$b\left(\underline{\lambda}_{n+1}, \delta\underline{u}^F\right) = a^F\left(\underline{u}^F_{n+1}, \delta\underline{u}^F\right) - l^F\left(\delta\underline{u}^F\right), \forall\, \delta\underline{u}^F \in \mathscr{U}^F_0 \tag{1.25}$$

and extract : $\underline{\lambda}_{n+1} \in \mathscr{M}$

Auxiliary model problem : Find $\underline{u}^A_{n+1} \in \mathscr{U}^F$ under the constraint $\underline{u}^A_{n+1} = \underline{u}^G_{n+1}$ on Γ such that :

$$a^A\left(\underline{u}^A_{n+1}, \delta\underline{u}^A\right) = l^A\left(\delta\underline{u}^A\right), \quad \forall\, \delta\underline{u}^A \in \mathscr{U}^A_0 \tag{1.26}$$

Then, compute term :

$$b\left(\underline{\lambda}^A_{n+1}, \delta\underline{u}^A\right) = a^A\left(\underline{u}^A_{n+1}, \delta\underline{u}^A\right) - l^A\left(\delta\underline{u}^A\right), \forall\, \delta\underline{u}^A \in \mathscr{U}^A_0 (= \mathscr{U}^G_{|\Omega^A}) \tag{1.27}$$

Convergence test

end

Les problèmes grossier (1.23), fin (1.24) et auxiliaire (1.26) sont ainsi des problèmes classiques pour lesquels les conditions d'admissibilités ($\mathscr{B}$) et ($\mathscr{P}$) peuvent être prises en compte par exemple par MPC. Le post-traitement (1.27) des efforts intérieurs $b\left(\underline{\lambda}^A_{n+1}, \delta\underline{u}^A\right)$ du problème auxiliaire associés aux conditions de couplage ($\mathscr{B}$) une fois la solution en déplacement $\underline{u}^A_{n+1}$ déterminée est, sous sa forme discrétisée, une opération couramment disponible dans un code. On notera que l'espace d'approximation $\mathscr{U}^G_h$ restreint au domaine du modèle auxiliaire Ω^A étant par construction égal à celui du modèle auxiliaire $\mathscr{U}^A_h$, les efforts intérieurs discrétisés associés à $b\left(\underline{\lambda}^A, \delta\underline{u}^A\right)$ sont directement ceux associés aux termes $b\left(\underline{\lambda}^A, \delta\underline{u}^G\right)$ intervenant dans le second membre du problème grossier (1.23). En revanche les espaces d'approximations des problèmes global et fin, Ω^G_h et Ω^F_h, étant *a priori* non compatibles sur l'interface Γ, il convient de reconstruire le représentant discrétisé du multiplicateur de Lagrange $\underline{\lambda}$ qui ne doit pas être confondu avec les efforts intérieurs nodaux déterminés en (1.25) à l'issue de la résolution du problème fin. La reconstruction de ce représentant dans le cas discrétisé est discutée et présentée par exemple dans [Ainsworth, 2001].

L'**Algorithme 3** est ici appliqué à une structure en composite tissé stratifié présentant un dé-

faut correspondant à une restriction de moitié de la section d'une fibre et soumise à un état de déformation macroscopique linéaire (**Figure 1.14**). Le comportement du modèle global et auxiliaire (**Figure 1.15**) est obtenu par une méthode numérique d'homogénéisation périodique au premier ordre.

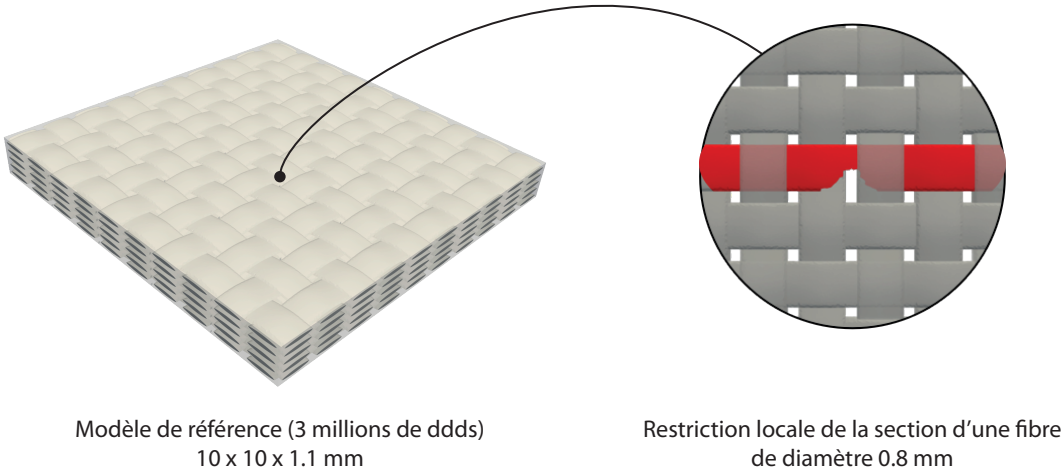


Figure 1.14 – Composite tissé stratifié avec restriction localisée de la section d'une fibre [Wangermez, 2020]

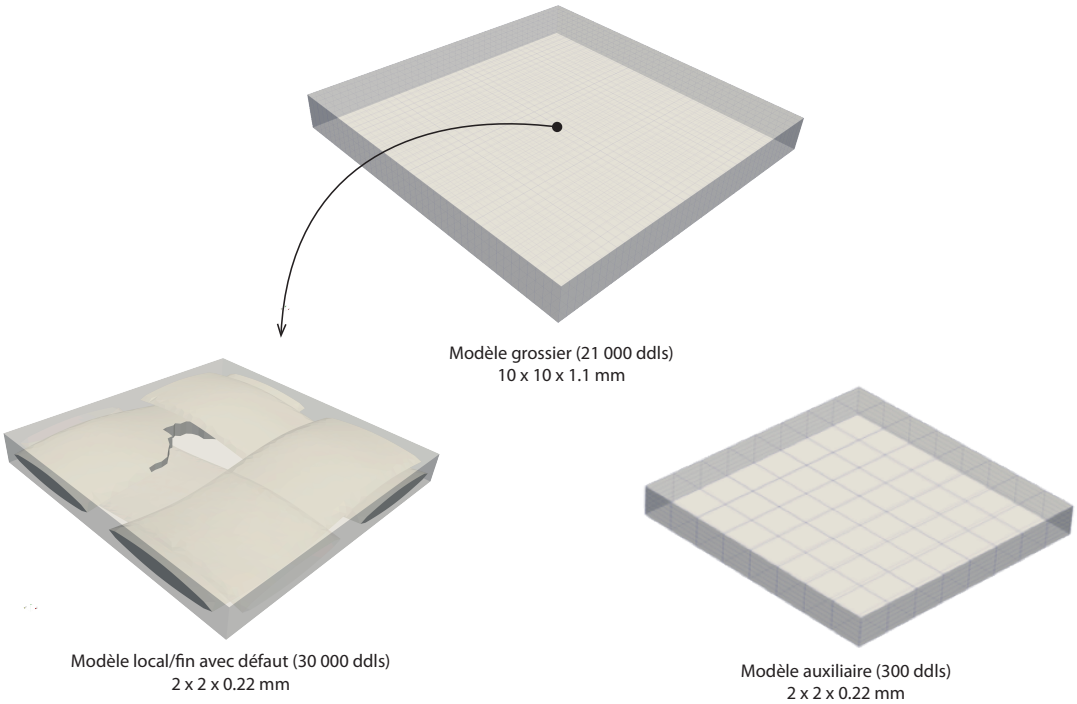


Figure 1.15 – Modèles global, local et auxiliaire pour l'analyse locale-globale de la structure en composite tissé stratifié avec défaut localisé soumise à un déplacerment imposé sur son bord extérieur correspondant à un état de déformation macroscopique linéaire ($F^M_{11} = 1.1$, $F^M_{22} = 0.9$, $G^M_{222} = -0.00138$, $G^M_{112} = 0.024$, $G^M_{211} = -0.036$) [Wangermez, 2020]

L'erreur relative en énergie obtenue avec la méthode de raccord proposée est améliorée de façon significative par rapport à celle obtenue par une approche classique de *submodeling* (**Figure 1.16**).

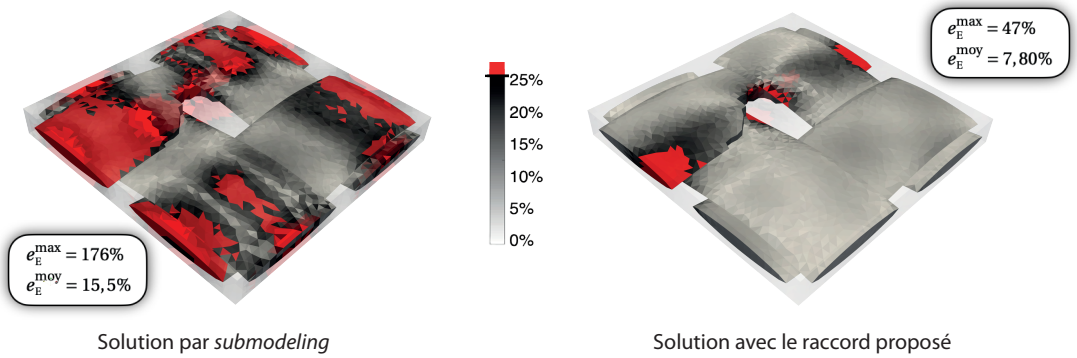


Figure 1.16 – Carte d'erreur relative en énergie obtenue dans le modèle local par *submodeling* et par la méthode de couplage proposée [Wangermez, 2020]

➜ Bilan et perspectives

Une implémentation non-intrusive d'un algorithme de couplage global-local a été mise en œuvre au sein du code Z-set™ (ZéBuLoN) pour l'analyse des structures composites. L'algorithme ne s'appuie que sur des fonctionnalités et des données qui sont facilement accessibles *via* une interface de programmation (API) dans les codes éléments finis couramment employés en ingénierie mécanique.
Des conditions de couplage dédiées à l'analyse d'une structure composite ont été écrites de façon à se prêter à une intégration à l'aide de *Multi-Point Constraints* (MPC). Cette stratégie de calcul a permis d'obtenir des résultats dans la zone d'intérêt de bien meilleure qualité par rapport à la méthode de *submodeling* (méthode « descendante ») classiquement utilisée et disponible dans les codes de calcul et pour un coût de développement relativement modeste.

Des difficultés de convergence ont cependant été rencontrées dans le cas d'application traité pour lequel la zone d'intérêt en composite tissé est fortement hétérogène et présente des directions fortement renforcées par la présence de fibres longues. Plusieurs pistes décrites notamment dans [Gosselet *et al.*, 2018] pourraient être testées dans ce cas d'application : choix adapté du modèle auxiliaire, formulation mixte des conditions de couplage, technique de relaxation (par exemple mise à jour du paramètre de relaxation par méthode de Aitken), autres algorithmes de résolution (gradient conjugué non-linéaire, technique d'accélération quasi-Newton SR1, formule de Sherman-Morrison...).

5 Orientations futures

Le couplage de modèles, la ré-analyse locale de structure ou de zoom structural sont des besoins récurrents dans le monde de l'ingénierie qui demandent des méthodologies de développement robustes et efficaces. Si les méthodes non-intrusives d'analyse locale-globale commencent à atteindre un certain point de maturité du point de vue théorique et de leur mise en œuvre, **l'évolution des pratiques industrielles ne peut passer que par des démonstrateurs convaincants sur des applications qui parlent aux ingénieurs et qui intègrent au mieux les contraintes de développement.**

Un premier axe de développement porte sur l'application de la méthode à un cas concret industriel ambitieux, presque hors de portée des méthodologies de développement actuelles. L'exemple cible de Safran Tech abordé dans la thèse de M. Wangermez fournit un excellent cas d'étude. Prendre en compte une singularité due au procédé de tissage détectée par tomographie sur la réponse linéaire d'une pièce composite « saine » est une chose mais cela ne répond pas tout-à-fait au besoin de l'industriel. Il conviendrait maintenant de simuler la tolérance de la structure à ce défaut afin de fournir à l'ingénieur un véritable outil d'aide à la décision lui permettant de limiter le nombre de pièces rebutées. Cela conduit à adapter et contrôler la taille de la zone d'intérêt au cours de la simulation de la dégradation éventuelle de la structure pour en évaluer la tenue résiduelle.
Cette question n'est pas nouvelle mais doit être abordée en proposant des solutions pragmatiques afin de s'intégrer au mieux, avec un minimum de développements, dans les codes de calcul commerciaux. De nombreuses difficultés émergent : incompatibilité topologique éventuelle de la zone d'intérêt par rapport aux bords des éléments finis du maillage global, critère d'erreur adapté permettant de piloter l'évolution de la zone d'intérêt, remaillage du patch local, conditions de couplage adaptées dans le cas d'une zone d'intérêt importante (présence de forts gradients de déformation macroscopique, voire de la localisation), transfert de champs, choix du modèle auxiliaire pour assurer ou accélérer la convergence...

Un deuxième axe concerne le traitement des problèmes de dynamique. La prédiction du délaminage sous impact d'un composite stratifié par une méthode locale-globale non-intrusive est développée par exemple dans [Bettinotti *et al.*, 2017]. A la question du traitement de l'évolution du patch local discutée précédemment, se pose la question encore très ouverte du raccord des modèles global et local de façon à limiter les réflexions d'ondes hautes fréquences « piégées » dans la zone locale dues aux fortes incompatibilités de maillages des modèles. Des techniques sont proposées dans la littérature comme par exemple les méthodes de conditions limites absorbantes ou de filtre sélectif (p. ex. la technique sélective *perfectly matched layer* dans [Marchais *et al.*, 2017]). Ils convient cependant de les revisiter de façon à les adapter au cadre de travail de l'analyse locale-globale non-intrusive. La question du couplage de schémas d'intégration temporelle différents sur chaque modèle reste également incontournable [Gravouil et Combescure, 2001, Mahjoubi *et al.*, 2009].

2

Interfaces et méthodes de décomposition de domaine

« C'est par la séparation qu'on évalue la force des liens. »

Gérard Gévry

LE BESOIN INGÉNIEUR d'établir des modèles toujours plus complexes est récurrent et conduit inévitablement à des problèmes de taille toujours plus grande (*exascale computing*). Cette course (sans fin) à la *dimension* ne doit pas pour autant faire oublier ce pourquoi les modèles sont créés, et cela tout en respectant les exigences de développement (environnement matériel et humain, délais). De nombreuses questions émergent. Quelles sont les quantités d'intérêt ? Le calcul converge-t-il toujours (robustesse) ? Comment exploiter toutes ces données de calcul, comment les stocker ? A-t-on le temps de faire ce calcul, sera-t-il fini demain matin (efficacité) ?

Aussi, il est primordial, que le développement des méthodes de calcul avancées en HPC intègre l'ensemble de ces questions. Leur adaptation à un contexte de développement ou un environnement matériel de développement (*cluster* de calcul à grand nombre de nœuds, librairies de calcul parallèle...) nécessite un travail souvent technique et des connaissances dans le domaine informatique qui dépassent parfois le champ de compétences du mécanicien. Cependant bien que matures, certaines méthodes pourtant bien établies manquent encore de robustesse afin de traiter une large classe de problèmes, notamment dans le domaine non-linéaire. Avoir du *bon sens mécanique* pour intégrer la physique du problème est un atout certain pour répondre à cette difficulté.

Le **Chapitre 2** porte sur le calcul non-linéaire des structures à grand nombre de degrés de liberté par méthodes de décomposition de domaine (DDM). S'appuyant sur la parallélisation intensive des calculs et des données, ces approches peuvent traiter un nombre important de sous-domaines et d'interfaces. **Robustesse et efficacité** sont les qualités attendues de ces méthodes HPC afin de pouvoir s'établir dans le milieu industriel.

1 Enjeux des méthodes de décomposition de domaine en non-linéaire

Des progrès importants en DDM dans le domaine de la mécanique ont été réalisés ces dernières années afin de traiter efficacement les structures présentant de fortes hétérogénéités matériau [Rixen et Farhat, 1999, Ladevèze *et al.*, 2001, Gosselet *et al.*, 2003, Bovet *et al.*, 2017], les structures plaques par les « méthodes à deux niveaux » [Farhat et Mandel, 1998, Farhat *et al.*, 2000, Le Tallec *et al.*, 1998] ou FETI-DP [Farhat *et al.*, 2001, Amini *et al.*, 2009a, Amini *et al.*, 2009b] et son homologue BDD-C [Cros, 2003], la vérification [Rey *et al.*, 2016]... **La robustesse pour les problèmes non-linéaires matériau ou géométrique reste cependant encore un enjeu scientifique d'importance.**

Les phénomènes non-linéaires (plasticité, endommagement, fissuration...) induisent généralement des longueurs caractéristiques spatiale et temporelle relativement fines par rapport à l'échelle de la structure et de l'intervalle d'étude afin de les décrire. S'initiant en des endroits localisés et se propageant au reste de la structure, ils nécessitent souvent des discrétisations spatiale et temporelle très fines aux endroits et aux instants où ils surviennent.

➜ Points de blocage

*Le **traitement efficace de non-linéarités localisées ou réparties spatialement de façon hétérogène parmi les sous-domaines mettent en défaut les méthodes de décomposition de domaine classiques** en particulier dans la situation où elles ont un effet non négligeable sur la réponse globale de la structure (propagation de fissure, redistribution des contraintes...).*

Deux familles de DDM en non-linéaires se distinguent de par leur traitement algorithmique des non-linéarités : les DDM basées sur les méthodes de Schur avec relocalisation ou condensation non-linéaire et la DDM basée sur la méthode LATIN. Dans ce mémoire, ces deux approches sont présentées en insistant sur leur version mixte particulièrement robuste et efficace.

➜ Revue (non exhaustive) des DDM en non-linéaire

DDM classiques appliquées au problème linéarisé : En reprenant les hypothèses du **Problème 1** et dans le cas d'un seul modèle, on obtient le problème non-linéaire classique suivant :

Problème 2 (Problème non-linéaire) *Trouver* $\underline{u} \in \mathscr{U}$ *tel que :*

$$a\left(\underline{u}, \delta\underline{u}\right) = l\left(\delta\underline{u}\right), \quad \forall\, \delta\underline{u} \in \mathscr{U}_0$$

avec $\mathscr{U} = \left\{\underline{u} \in [H^1(\Omega)^d \,|\, \underline{u} = \overline{\underline{u}} \text{ sur } \partial_u\Omega\right\}$ *et* $\mathscr{U}_0 = \left\{\underline{u} \in \mathscr{U} \,|\, \underline{u} = 0 \text{ sur } \partial_u\Omega\right\}$ *en dimension* d.

La méthode la plus répandue en calcul non-linéaire des structures est la méthode de Newton-Raphson. En introduisant la dérivée directionnelle au sens de Fréchet, on obtient alors l'**Algorithme 4**. Le problème tangent (2.1), linéaire, peut alors être résolu par une méthodes de décomposition de domaine classiquement utilisée en linéaire [Gosselet et Rey, 2006]. Sans être exhaustif, on pourra utiliser par exemple une méthode primale (p. ex. BDD [Mandel, 1993, Mandel et Brezina, 1996], duale (p.ex. FETI [Farhat et Roux, 1991, Farhat *et al.*, 1993]) ou mixte (p. ex.

Algorithme 4 : Algorithme de Newton-Raphson appliqué au **Problème 2**

Data : *Initialisation* $\underline{u} \leftarrow \underline{0}$
while *not at convergence* **do**
Solve tangent problem : Find increment correction $\Delta\underline{u}$ such that :

$$D\left[a\left(\underline{u},\delta\underline{u}\right)\right]\cdot\Delta\underline{u} = l\left(\delta\underline{u}\right) - a\left(\underline{u},\delta\underline{u}\right), \quad \forall\,\delta\underline{u}\in\mathscr{U}_0 \tag{2.1}$$

Iterate update : $\underline{u} \leftarrow \underline{u} + \Delta\underline{u}$
Convergence test
end

DDM monoéchelle [Glowinski et Le Tallec, 1990, Ladevèze, 1999]). L'utilisation d'une DDM s'appuyant sur des compléments de Schur et des algorithmes de résolution de Krylov pour résoudre le problème tangent constitue la famille des méthodes Newton-Schur-Krylov, ou Newton-Krylov-Schur (NKS). On pourra se référer par exemple à [De Roeck *et al.*, 1992] pour l'élasticité non-linéaire ou à [Germain *et al.*, 2007] pour le calcul avec loi d'endommagement non-locale.

DDM basées sur les méthodes de Schur avec relocalisation ou condensation non-linéaire : Le problème non-linéaire est condensé sur les interfaces par une méthode de Schur avant toute linéarisation. Le problème non-linéaire condensé sur les interfaces est alors linéarisé dans le cadre de la méthode de Newton et résolu par un solveur itératif de Krylov.
Dans le cas d'une approche primale, toujours sous les mêmes hypothèses que celles du **Problème 1**, on peut formellement définir un opérateur non-linéaire Dirichlet-vers-Neumann pour chaque sous-domaine qui exprime les efforts qui travaillent avec un déplacement d'interface imposé $\underline{v}$ à partir du **Problème 3** suivant :

Problème 3 (Opérateur non-linéaire Dirichlet-vers-Neumann) *Pour un sous-domaine* (s)*, trouver* $\left(\underline{u}^{(s)},\underline{\lambda}^{(s)}\right)\in\mathscr{U}^{(s)}\times\mathscr{F}^{(s)}$ *tel que :*

$$\left\{\begin{array}{rcll} a\left(\underline{u}^{(s)},\delta\underline{u}^{(s)}\right)+b\left(\underline{\lambda}^{(s)},\delta\underline{u}^{(s)}\right) & = & l\left(\delta\underline{u}^{(s)}\right), & \forall\,\delta\underline{u}^{(s)}\in\mathscr{U}_0^{(s)} \\ b\left(\delta\underline{\lambda}^{(s)},\underline{u}^{(s)}-\underline{v}_{\Gamma^{(s)}}\right) & = & 0 & \forall\,\delta\underline{\lambda}\in\mathscr{F}^{(s)} \end{array}\right. \tag{2.2}$$

En présence de forces de volume $\overline{\underline{b}}^{(s)}$*, d'un effort imposé* $\overline{\underline{t}}^{(s)}$ *sur la partie du bord* $\partial_t\Omega^{(s)}$ *en configuration courante :*

$$l\left(\delta\underline{u}^{(s)}\right) = \int\limits_{\partial_t\Omega_0^{(s)}} \overline{\underline{t}}_0^{(s)}\cdot\delta\underline{u}^{(s)}\,\mathrm{d}\Gamma_0 + \int\limits_{\Omega_0^{(s)}} \overline{\underline{b}}_0^{(s)}\cdot\delta\underline{u}^{(s)}\,\mathrm{d}V_0$$

avec $\overline{\underline{t}}_0^{(s)}\,\mathrm{d}\Gamma_0 = \overline{\underline{t}}^{(s)}\,\mathrm{d}\Gamma$ *par définition. En configuration courante, le déplacement* $\underline{v}_{\Gamma^{(s)}}$ *est imposé sur l'interface* $\Gamma^{(s)}$ *du sous-domaine* (s)*. Un déplacement imposé* $\overline{\underline{u}}^{(s)}$ *est imposé sur la partie* $\partial_u\Omega^{(s)} = \partial\Omega^{(s)}\cap\partial\Omega$ *du bord extérieur du domaine* $\Omega^{(s)}$ *tel que* $\partial\Omega^{(s)} = \Gamma^{(s)}\cup\partial_u\Omega^{(s)}\cup\partial_t\Omega^{(s)}$*. On a ainsi :* $\mathscr{U}^{(s)} = \left\{\underline{u}^{(s)}\in[H^1(\Omega^{(s)})^d \,|\, \underline{u}^{(s)} = \overline{\underline{u}}(s) \text{ sur } \partial_u\Omega^{(s)}\right\}$ *et* $\mathscr{U}_0^{(s)} = \left\{\underline{u}^{(s)}\in\mathscr{U}^{(s)} \,|\, \underline{u}^{(s)} = 0 \text{ sur } \partial_u\Omega^{(s)}\right\}$ *en dimension* d*. La solution de ce problème permet de définir formellement l'opérateur non-linéaire Dirichlet-vers-Neumann* $\mathscr{S}^{(s)}$ *du sous-domaine* (s) *sur l'interface* $\Gamma^{(s)}$ *suivant :*

$$\mathscr{S}^{(s)} : \left\{\begin{array}{rcl} \mathscr{W}^{(s)} & \to & \mathscr{F}^{(s)} \\ \left(\underline{v}_{\Gamma^{(s)}};\overline{\underline{u}}^{(s)},\overline{\underline{t}}^{(s)},\overline{\underline{b}}^{(s)}\right) & \mapsto & \underline{\lambda}^{(s)} \end{array}\right. \tag{2.3}$$

où $\mathscr{W}^{(s)}$ *est l'espace trace du déplacement sur l'interface* $\Gamma^{(s)}$*.*

L'équilibre des efforts au niveau de chaque interface $\Gamma^{(ss')}$entre deux sous-domaines (s) et (s') s'écrit $\underline{\lambda}^{(s)} + \underline{\lambda}^{(s')} = \underline{0}$. En introduisant un opérateur booléen $A^{(s)}$ (contenant des 0 et des 1) par sous-domaine, on peut réécrire l'ensemble de ces conditions par interface comme une somme sur les sous-domaines :

$$\sum_s A^{(s)} \underline{\lambda}^{(s)} = \underline{0}$$

Avec l'opérateur non-linéaire Dirichlet-vers-Neumann $\mathscr{S}^{(s)}$ du sous-domaine (s) défini par (2.3) qui traduit l'équilibre non-linéaire de chaque sous-domaine (voir (2.2)) pour un unique déplacement d'interface $\underline{v}$, le problème décomposé en sous-domaines se traduit au sens faible par : trouver le déplacement d'interface $\underline{v}$, les conditions limites étant prises en compte au niveau des problèmes (2.2) par sous-domaine, tel que :

$$\begin{cases} \sum_s b\left(A^{(s)}\underline{\lambda}^{(s)}, \delta\underline{v}\right) = 0, & \forall\, \delta\underline{v} \in \mathscr{W} \\ \text{avec} \quad \underline{\lambda}^{(s)} = \mathscr{S}^{(s)}\left(\underline{v}_{\Gamma^{(s)}}; \overline{\underline{u}}^{(s)}, \overline{\underline{t}}^{(s)}, \overline{\underline{b}}^{(s)}\right), & \forall\, s \end{cases}$$

où encore :

Problème 4 (Problème primal d'interface non-linéaire) *Trouver le déplacement d'interface $\underline{v}$ tel que :*

$$\sum_s b\left(A^{(s)}\mathscr{S}^{(s)}\left(\underline{v}_{\Gamma^{(s)}}; \bar{\underline{d}}^{(s)}\right), \delta\underline{v}\right) = 0, \quad \forall\, \delta\underline{v} \in \mathscr{W} \tag{2.4}$$

où encore :

$$\sum_s A^{(s)}\mathscr{S}^{(s)}\left(\underline{v}_{\Gamma^{(s)}}; \bar{\underline{d}}^{(s)}\right) = \underline{0} \tag{2.5}$$

où $\bar{\underline{d}}^{(s)}$ correspond aux données $\overline{\underline{u}}^{(s)}$, $\overline{\underline{t}}^{(s)}$ et $\overline{\underline{b}}^{(s)}$ (conditions limites et chargement) sur le sous-domaine (s).

La linéarisation du **Problème 4** non-linéaire d'interface conduit alors à une itération du solveur de Newton (voir **Algorithme 4**) qui s'écrit :

$$\sum_s D\left[b\left(A^{(s)}\mathscr{S}^{(s)}\left(\underline{v}_{\Gamma^{(s)}}; \bar{\underline{d}}^{(s)}\right), \delta\underline{v}\right)\right] \cdot \Delta\underline{v}_{\Gamma^{(s)}} = -\sum_s b\left(A^{(s)}\mathscr{S}^{(s)}\left(\underline{v}_{\Gamma^{(s)}}; \bar{\underline{d}}^{(s)}\right), \delta\underline{v}\right), \quad \forall\, \delta\underline{v} \in \mathscr{W} \tag{2.6}$$

Comme $b\left(\underline{\lambda}^{(s)}, \delta\underline{u}^{(s)}\right)$ est une forme continue bilinéaire sur $\mathscr{F}^{(s)} \times \mathscr{U}^{(s)}$, « non-dégénérée », on en déduit que l'on a plus simplement :

$$\sum_s \left(A^{(s)} D\left[\mathscr{S}^{(s)}\left(\underline{v}_{\Gamma^{(s)}}; \bar{\underline{d}}^{(s)}\right)\right] \cdot \Delta\underline{v}_{\Gamma^{(s)}}\right) = -\sum_s \left(A^{(s)}\mathscr{S}^{(s)}\left(\underline{v}_{\Gamma^{(s)}}; \bar{\underline{d}}^{(s)}\right)\right) = -\sum_{s,s'} \left(\underline{\lambda}^{(s)} + \underline{\lambda}^{(s')}\right) \tag{2.7}$$

Le membre de gauche de (2.7) correspond donc à la linéarisation des opérateurs non-linéaires condensés par sous-domaine, à savoir, la condensation des matrices tangentes par sous-domaine. Il a exactement la structure d'un opérateur tangent en décomposition de domaine (en fait le même qu'une méthode NKS), on peut donc utiliser les mêmes techniques de préconditionnement que celles utilisées en linéaire (p. ex. préconditionneur de type BDD [Mandel, 1993, Mandel et Brezina, 1996]).
Le membre de droite de (2.7), traduisant le déséquilibre entre deux sous-domaines voisins soumis à un même déplacement d'interface, est un terme non-linéaire évalué à l'aide d'un solveur de Newton local appliqué au problème (2.2) non-linéaire par sous-domaine à déplacement $\underline{v}_{\Gamma^{(s)}}$ imposé.
On a donc permuté les étapes de linéarisation et de condensation par rapport à une méthode

Newton-Schur-Krylov (NKS). On peut parler ici de méthode de Schur-Newton-Krylov (SNK). On obtient ainsi un solveur de Newton global sur le problème non-linéaire condensé sur les interfaces dont le second membre nécessite la résolution en parallèle de problèmes non-linéaires locaux par sous-domaine par des solveurs de Newton. On a ainsi deux niveaux de solveurs non-linéaires imbriqués. La valeur des critères d'arrêt des solveurs de Newton local et global peuvent être choisis en s'inspirant des travaux sur les méthodes de Newton inexactes [Dembo *et al.*, 1982, Eisenstat et Walker, 1996]. En pratique, on pourra par exemple prendre :

$$\eta_{local}^{crit.} = \sqrt{\eta_{global}^{crit.}} \tag{2.8}$$

On constate que l'on retrouverait la méthode NKS classique en forçant chaque solveur de Newton local par sous-domaine à ne faire qu'une itération (prédiction élastique pour un déplacement d'interface donné).
L'intérêt de la méthode de décomposition de domaine non-linéaire proposée est que, dans le cas où un sous-domaine verrait des non-linéarités se développer, les solveurs locaux permettent de les « capturer » plus efficacement et d'en propager les effets au niveau global. Un parallèle intéressant peut être fait par rapport à un calcul non-linéaire classique en assimilant chaque sous-domaine à un point d'intégration. La convergence du solveur non-linéaire globale est ainsi accélérée (voire plus robuste) par rapport à une méthode NKS classique et permet généralement d'utiliser des incréments de chargement plus grands. Le nombre d'itérations du solveur global étant réduit, les communications entre sous-domaines sont donc plus limitées ce qui est un point crucial pour l'efficacité d'une DDM. On doit cependant réaliser des itérations locales par sous-domaines mais dont le calcul peut être parallélisé par définition.
Ce traitement des non-linéarités en « parallèle » est particulièrement adapté pour les structures présentant des phénomènes non-linéaires localisés et pour lesquelles une grande partie du domaine reste dans son domaine de comportement linéaire. Cette approche a été appliquée avec succès dans le cas de structures plaques en grands déplacements présentant du flambage localisé [Cresta *et al.*, 2007] ou de structures avec comportement d'endommagement [Pebrel *et al.*, 2008, Pebrel, 2009]. On trouvera une présentation remarquable de cette famille de méthodes dans [Negrello *et al.*, 2016].
Dans le cadre de la thèse de J. Hinojosa, dirigée par O. Allix en collaboration avec EADS IW, les travaux initiés par Ph. Cresta [Cresta *et al.*, 2007] ont été étendus à **l'analyse post-flambage de grandes structures raidies** proches de structures aéronautiques industrielles [Hinojosa *et al.*, 2014] susceptibles d'exhiber un comportement de type *snap-through* ou *snap-back* [Hinojosa *et al.*, 2017].

DDM basée sur la méthode LATIN : En rupture avec les solveurs non-linéaires incrémentaux classiques, comme la méthode de Newton, la méthode LATIN [Ladevèze, 1985, Ladevèze, 1999] propose à chaque itération une approximation de la solution définie sur tout le domaine spatial et temporel de l'étude. Séparant le traitement des équations locales éventuellement non-linéaires (comportement, loi d'évolution) des équations linéaires d'équilibre et d'état, le schéma itératif alterne la résolution de problèmes non-linéaires locaux, aux points matériels, et de problèmes linéaires globaux sur tout le domaine spatial et temporel à l'aide de directions de recherche.
Plus précisément, si on s'intéresse, sous l'hypothèse des petites perturbations, à un problème élasto-plastique en quasi-statique et en isotherme, le groupe $\mathbf{\Gamma}$ des équations locales, éventuellement non-linéaires, se résument formellement à :

$$\mathbf{\Gamma} : \begin{cases} \text{Loi d'évolution :} & \dot{\varepsilon}_p^{(s)} = B\left(\boldsymbol{\sigma}^{(s)}\right), \quad \text{avec } \varepsilon_p^{(s)} = 0 \text{ à } t = 0 & \forall\, \underline{x} \in \Omega^{(s)}, \quad \forall\, s \\ \text{Comportement interface :} & \underline{F}^{(s')} = -\underline{F}^{(s')} = R\left(\underline{W}^{(s)} - \underline{W}^{(s')}\right) & \forall\, \underline{x} \in \Gamma^{(ss')}, \quad \forall\, s, s' \end{cases} \tag{2.9}$$

où $\varepsilon_p = \varepsilon - \varepsilon_e$ est la déformation plastique. L'opérateur B est un opérateur local qui dépend du comportement matériau (se référer à [Ladevèze, 1999] par exemple pour plus de détails). La loi de comportement d'interface définie par l'équilibre de l'interface et une fonction R du saut de déplacement à l'interface traduit formellement des comportements divers (parfait, contact, contact frottant, endommagement, loi cohésive...). Pour simplifier, les conditions limites sont supposées être prises en compte par des comportements d'interface particuliers.
Le groupe d'admissibilité $\mathbf{A_d}^{(s)}$ sur un sous-domaine (s) d'équations linéaires est défini quant à lui par :

$$\mathbf{A_d}^{(s)} : \begin{cases} \text{L'admissibilité cinématique } (\mathscr{E}_{ad}^{(s)}) : & \exists \underline{u}^{(s)}, \quad \varepsilon^{(s)} = \varepsilon(\underline{u}^{(s)}) \quad \text{and} \quad \underline{u}^{(s)}_{|\partial\Omega^{(s)}} = \underline{W}^{(s)} \\ \text{L'admissibilité statique } (\mathscr{S}_{ad,0}^{(s)}) : & \forall \left(\delta\underline{u}^{(s)}, \delta\underline{\dot{W}}^{(s)}\right) \in \mathscr{E}_{ad}^{(s)}, \\ \displaystyle\int_{\Omega^{(s)}\times[0,T]} \boldsymbol{\sigma}^{(s)} : \varepsilon(\delta\underline{u}^{(s)}) \mathrm{d}V\mathrm{d}t & = \displaystyle\int_{\Omega^{(s)}\times[0,T]} \overline{\underline{b}}^{(s)} \cdot \delta\underline{u}^{(s)} \mathrm{d}V\mathrm{d}t + \int_{\partial\Omega^{(s)}\times[0,T]} \underline{F}^{(s)} \cdot \delta\underline{\dot{W}}^{(s)} \mathrm{d}\Gamma\mathrm{d}t \\ \text{La loi d'état :} & \boldsymbol{\sigma}^{(s)} = \mathbf{K}^{(s)} \varepsilon_e^{(s)} \end{cases} \tag{2.10}$$

On introduit alors les directions de recherche locales suivantes pour tout sous-domaine (s) :

$$\mathbf{E}^+ : \begin{cases} \mathbf{H}^+ \left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(s)} - \boldsymbol{\sigma}^{(s)}\right) + \left(\hat{\dot{\varepsilon}}_p^{(s)} - \dot{\varepsilon}_p^{(s)}\right) = \underline{0}, & \forall \underline{x} \in \Omega^{(s)}, \quad \forall s \\ \mathbf{h}^+ \left(\underline{\hat{F}}^{(s)} - \underline{F}^{(s)}\right) - \left(\underline{\hat{\dot{W}}}^{(s)} - \underline{\dot{W}}^{(s)}\right) = \underline{0}, & \forall \underline{x} \in \partial\Omega^{(s)}, \quad \forall s \end{cases} \tag{2.11}$$

$$\mathbf{E}^- : \begin{cases} \mathbf{H}^- \left(\boldsymbol{\sigma}^{(s)} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(s)}\right) - \left(\dot{\varepsilon}_p^{(s)} - \hat{\dot{\varepsilon}}_p^{(s)}\right) = \underline{0}, & \forall \underline{x} \in \Omega^{(s)}, \quad \forall s \\ \mathbf{h}^- \left(\underline{F}^{(s)} - \underline{\hat{F}}^{(s)}\right) + \left(\underline{\dot{W}}^{(s)} - \underline{\hat{\dot{W}}}^{(s)}\right) = \underline{0}, & \forall \underline{x} \in \partial\Omega^{(s)}, \quad \forall s \end{cases} \tag{2.12}$$

où $(\dot{\square})$ désigne la dérivée temporelle d'une quantité. Les opérateurs locaux $\mathbf{H}^+$, $\mathbf{H}^-$, $\mathbf{h}^+$ et $\mathbf{h}-$ sont des opérateurs symétriques, définis positifs. Ce sont des paramètres de la méthode. En pratique, on choisit (dans le cas où B est différentiable pour faire simple) :

$$\begin{cases} \mathbf{H}^+ & = & \mathbf{H}^- = \mathbf{H} = \left.\dfrac{\partial B}{\partial \boldsymbol{\sigma}}\right|_{\hat{\boldsymbol{\sigma}}} \\ \mathbf{h}^+ & = & \mathbf{h}^- = \mathbf{h} = h\mathbf{I}_d \quad \text{avec } h > 0 \end{cases} \tag{2.13}$$

L'agorithme de résolution à deux directions de recherche consiste alors à rechercher alternativement, une solution $\hat{\mathbf{s}} \in \mathbf{A_d}$ vérifiant la direction $\mathbf{E}^+$ connaissant $\mathbf{s} \in \boldsymbol{\Gamma}$ (étape locale) puis, connaissant $\hat{\mathbf{s}}$ à chercher un nouvel itéré $\mathbf{s} \in \boldsymbol{\Gamma}$ vérifiant la direction $\mathbf{E}^-$ (étape linéaire) jusqu'à convergence vers la solution $\mathbf{s}_{ref}$ comme illustré en **Figure 2.1**.

$$\mathbf{s}_0 \in \mathbf{A_d} \longrightarrow \cdots \longrightarrow \mathbf{s}_n \in \mathbf{A_d} \underbrace{\xrightarrow{\text{étape locale}} \hat{\mathbf{s}}_{n+1/2} \in \boldsymbol{\Gamma} \xrightarrow{\text{étape linéaire}} \mathbf{s}_{n+1} \in \mathbf{A_d}}_{\text{itération } n+1} \longrightarrow \hat{\mathbf{s}}_{n+3/2} \in \boldsymbol{\Gamma} \longrightarrow \cdots \longrightarrow \mathbf{s}_{ref} = \boldsymbol{\Gamma} \cap \mathbf{A_d}$$

Figure 2.1 – L'étape locale et l'étape linéaire de la méthode LATIN à l'itération $n+1$

On notera que étape linéaire et étape locale conduisent à résoudre à chaque itération de la méthode un problème sur tout le domaine espace-temps et nécessite le stockage d'un itéré en tout point du domaine spatial et du domaine temporel. L'étape linéaire, qui conduit à un problème global sur chaque

sous-domaine, est la plus coûteuse en termes de coût de calcul. Plus précisément, elle conduit, en injectant la direction de recherche (2.12) dans la formulation faible en vitesse de l'admissibilité cinématique de (2.10), à résoudre sur chaque sous-domaine le problème suivant :

Problème 5 (Etape linéaire sur un sous-domaine (s)**)** *Trouver* $\left(\boldsymbol{\sigma}^{(s)}, \underline{F}^{(s)}\right) \in \mathscr{S}_{ad}^{(s)}$ *tel que :* $\forall \left(\delta\boldsymbol{\sigma}^{(s)}, \delta\underline{F}^{(s)}\right) \in \mathscr{S}_{ad,0}^{(s)}$,

$$\int_{\Omega^{(s)}\times[0,T]} \left(\mathbf{K}^{-1}\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{(s)} + \mathbf{H}\boldsymbol{\sigma}^{(s)}\right) : \delta\boldsymbol{\sigma}^{(s)} \mathrm{d}V\mathrm{d}t + \int_{\partial\Omega^{(s)}\times[0,T]} \mathbf{h}\underline{F}^{(s)} \cdot \delta\underline{F}^{(s)} \mathrm{d}\Gamma\mathrm{d}t =$$
$$\int_{\Omega^{(s)}\times[0,T]} \left(\mathbf{H}\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(s)} - \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_p^{(s)}\right) : \delta\boldsymbol{\sigma}^{(s)} \mathrm{d}V\mathrm{d}t + \int_{\partial\Omega^{(s)}\times[0,T]} \left(\mathbf{h}\underline{\hat{F}}^{(s)} + \underline{\hat{W}}^{(s)}\right) \cdot \delta\underline{F}^{(s)} \mathrm{d}\Gamma\mathrm{d}t \quad (2.14)$$

Afin de réduire les coûts de calcul et de stockage des opérateurs et des itérés, la méthode LATIN [Ladevèze, 1985, Ladevèze, 1999] a introduit dès ses débuts une approximation adaptée des inconnues en s'appuyant sur une représentation sous forme séparée en variable d'espace et du temps, appelée initialement « approximation radiale » et plus connue maintenant sous le nom de *Proper Generalized Decomposition* (PGD) [Nouy, 2010, Chinesta *et al.*, 2011].
L'algorithme à directions de recherche alternées obtenu présente des similarités avec les méthodes ADMM (*Alternating Direction Methods of Multipliers*) [Glowinski et Le Tallec, 1989, Glowinski et Le Tallec, 1990, Glowinski, 2015]. Le chemin de convergence est assez différent des solveurs incrémentaux classiques et la méthode s'est montrée intéressante pour traiter des problèmes présentant des instabilités en non-linéaire géométrique [Boucard, 1996, Michel-Ponnelle, 2001] ou matériau [Vandoren *et al.*, 2013]. De nombreuses applications en mécanique non-linéaire des structures ont été réalisées. On pourra se référer à [Ladevèze, 1999] pour acquérir les fondements de la méthode.
Appliqué à la décomposition de domaine, cet algorithme à deux directions de recherche alternées aboutit à une méthode de décomposition mixte particulièrement robuste pour traiter les problèmes d'assemblages avec interfaces de contact frottant (voir par. ex. [Champaney *et al.*, 1999] pour la version « monoéchelle » ou [Ladevèze *et al.*, 2002, Caignot *et al.*, 2010] pour la version « multiéchelle ») et flexible pour prendre en compte une grande variété de comportements d'interface. La **Section 3** montrera comment introduire un problème grossier dans cette méthode de décomposition de domaine mixte et en proposer une version « multiéchelle ». On trouvera également une application intéressante de la méthode LATIN pour traiter la propagation de fissure avec contact frottant par la méthode X-FEM dans [Dolbow *et al.*, 2001, Ribeaucourt *et al.*, 2007]. La simulation difficile des problèmes de délaminage [Corigliano, 1993, Allix *et al.*, 1995, Allix et Corigliano, 1999] par exemple dans les composites stratifiés, en présence de non-linéarités géométriques ou non, a été traitée dans [Kerfriden *et al.*, 2009, Saavedra *et al.*, 2012].

2 DDM avec condensation non-linéaire pour l'analyse post-flambage

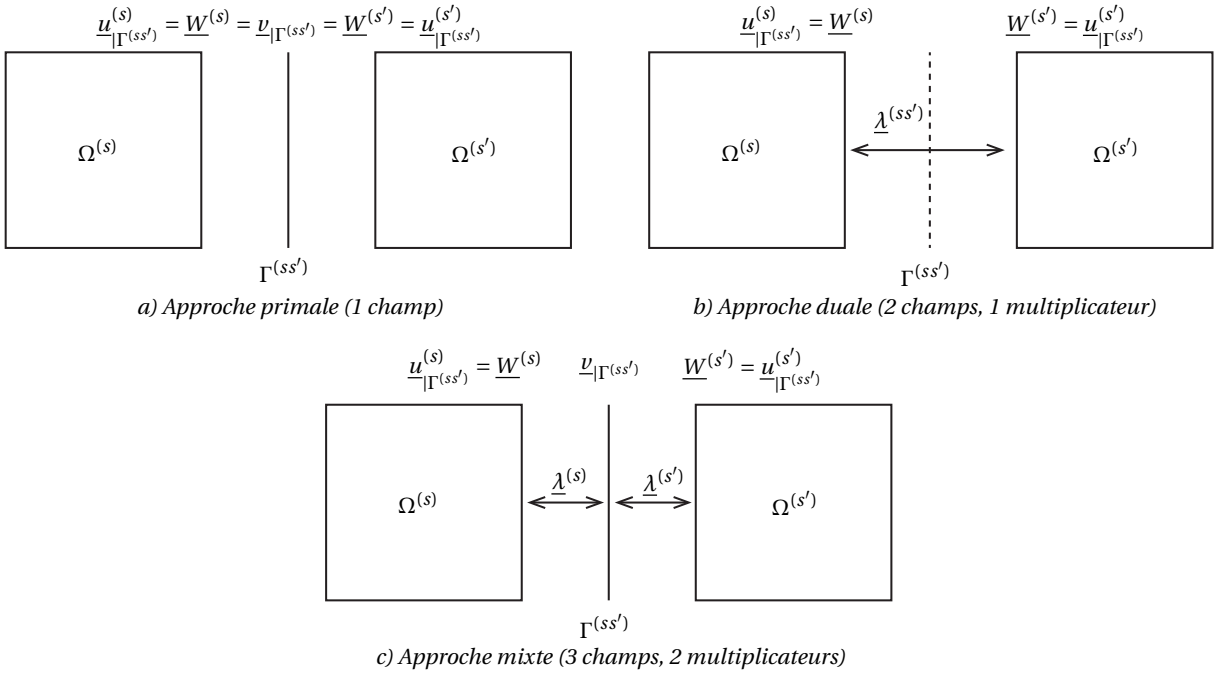
➜ Points de blocage

La robustesse (convergence) et l'efficacité quel que soit le choix du partitionnement en sous-domaines et le comportement non-linéaire de la structure *sont les points clés pour les DDM en non-linéaire. Cela passe en partie par le* ***choix judicieux de préconditionneur ou de problème***

grossier. *Le type d'approche (primale, duale ou mixte) est décisif pour traiter une large classe de problèmes. En termes de généricité,* ***les approches mixtes sont attractives****. Cependant, il convient de* ***choisir le paramètre d'augmentation*** *de façon pertinente afin d'obtenir un maximum d'efficacité.*

Les problèmes locaux (2.2) par sous-domaine à déplacement d'interface imposé $\underline{v}_{\Gamma^{(s)}}$ (voir **Problème 3**) dans une approche primale peuvent conduire à des comportements non-linéaires instables indésirables dans les sous-domaines (p. ex. en non-linéaire géométrique). De même, une approche duale pose des difficultés pour les problème présentant un comportement endommageable ou adoucissant par exemple [Pebrel *et al.*, 2008, Pebrel, 2009]. Ces instabilités locales par sous-domaine n'ont souvent rien à voir avec les éventuelles instabilités du problème de départ non sous-structuré et à ce titre on peut les qualifier d'artificielles ou d'indésirables. Elles sont dues à la résolution des problèmes non-linéaires locaux par sous-domaine pour des corrections de déplacements (ou d'efforts d'interface en approche duale) trop importantes. Aussi, les DDM mixtes sont attractives pour pallier cette difficulté.

Pour faire simple, dans le cas d'interfaces parfaites, une approche primale prend en compte la condition de continuité en déplacement directement, l'approche duale la prend en compte par l'introduction d'un multiplicateur de Lagrange et l'approche mixte introduit deux multiplicateurs localisés par sous-domaine afin d'assurer la continuité entre les déplacements bord des sous-domaines et un déplacement intermédiaire (voir **Figure 2.2**).



a) Approche primale (1 champ) *b) Approche duale (2 champs, 1 multiplicateur)*

c) Approche mixte (3 champs, 2 multiplicateurs)

Figure 2.2 – Approches primale, duale et mixte

La formulation mixte du problème peut alors être obtenue par un Lagrangian augmenté [Le Tallec et Sassi, 1995, Glowinski et Le Tallec, 1989, Glowinski et Le Tallec, 1990] et conduit classi-

quement à la formulation variationnelle suivante :

Problème 6 (Formulation mixte) *Pour un sous-domaine* (s)*, trouver* $\left(\underline{u}^{(s)}, \underline{\lambda}^{(s)}\right) \in \mathscr{U}^{(s)} \times \mathscr{F}^{(s)}$ *tel que :*

$$\left\{ \begin{array}{rcll} a\left(\underline{u}^{(s)}, \delta\underline{u}^{(s)}\right) + \langle\langle \underline{u}^{(s)}, \delta\underline{u}^{(s)} \rangle\rangle_{\Gamma^{(s)}} & = & l\left(\delta\underline{u}^{(s)}\right) - b\left(\underline{\lambda}^{(s)}, \delta\underline{u}^{(s)}\right) + \langle\langle \underline{v}_{\Gamma^{(s)}}, \delta\underline{u}^{(s)} \rangle\rangle_{\Gamma^{(s)}}, & \forall\, \delta\underline{u}^{(s)} \in \mathscr{U}_0^{(s)} \\ b\left(\delta\underline{\lambda}^{(s)}, \underline{u}^{(s)} - \underline{v}_{\Gamma^{(s)}}\right) & = & 0 & \forall\, \delta\underline{\lambda} \in \mathscr{F}^{(s)} \end{array} \right. \tag{2.15}$$

où $\langle\langle \underline{u}, \underline{v} \rangle\rangle_{\Gamma^{(s)}}$ *est un terme d'augmentation défini sur l'interface* $\Gamma^{(s)}$ *tel que :*

$$\langle\langle \underline{u}, \underline{v} \rangle\rangle_{\Gamma^{(s)}} = \langle Q^{(s)} \underline{u}, \underline{v} \rangle_{\mathscr{W}^{(s)\prime} \times \mathscr{W}^{(s)}} \quad \forall\, \left(\underline{u}, \underline{v}\right) \in \mathscr{W}^{(s)} \times \mathscr{W}^{(s)} \tag{2.16}$$

avec $Q^{(s)}$ *un opérateur linéaire, symétrique, défini positif. La solution de ce problème permet de définir formellement l'opérateur non-linéaire mixte* $\mathscr{M}^{(s)}$ *du sous-domaine* (s) *sur l'interface* $\Gamma^{(s)}$ *suivant :*

$$\mathscr{M}^{(s)} : \left\{ \begin{array}{rcl} \mathscr{F}^{(s)} & \rightarrow & \mathscr{W}^{(s)} \\ \left(\underline{\lambda}^{(s)}; \overline{\underline{u}}^{(s)}, \overline{\underline{t}}^{(s)}, \overline{\underline{b}}^{(s)}\right) & \mapsto & \underline{W}^{(s)} \end{array} \right. \tag{2.17}$$

où $\mathscr{W}^{(s)}$ *est l'espace trace du déplacement sur l'interface* $\Gamma^{(s)}$*.*
L'équilibre sur chaque interface $\Gamma^{(ss')}$ *entre deux sous-domaines* (s) *et* (s') *se traduit par :*

$$b\left(\underline{\lambda}^{(s)}, \delta\underline{v}_{|\Gamma^{ss'}}\right) + \langle\langle \underline{W}^{(s)} - \underline{v}_{\Gamma^{(s)}}, \delta\underline{v}_{|\Gamma^{ss'}} \rangle\rangle_{\Gamma^{(ss')}} + b\left(\underline{\lambda}^{(s')}, \delta\underline{v}_{|\Gamma^{ss'}}\right) + \langle\langle \underline{W}^{(s')} - \underline{v}_{\Gamma^{ss'}}, \delta\underline{v}_{|\Gamma^{ss'}} \rangle\rangle_{\Gamma^{(ss')}} = 0, \quad \forall\, \delta\underline{v} \in \mathscr{W} \tag{2.18}$$

L'opérateur $Q^{(s)}$ d'interface s'interprète (2.16) classiquement comme un représentant de la « rigidité » du complémentaire du sous-domaine (s). Après discrétisation du champ de déplacement, dans un cadre algébrique, l'opérateur (matrice) d'interface $\left[Q_h^{(s)}\right]$ optimal correspond, en élasticité linéaire, au complément de Schur primal du complémentaire $\left[S_p^{(\bar{s})}\right]$, en pratique trop coûteux à calculer. Des approximations classiques, peu coûteuses, pour $\left[Q_h^{(s)}\right]$ sont :

$$\left\{ \begin{array}{rcll} \left[Q_h^{(s)}\right] & \approx & \left[K_{bb}^{(\bar{s})}\right] & \text{approximation } \textit{lumped} \\ \left[Q_h^{(s)}\right] & \approx & diag\left[K_{bb}^{(\bar{s})}\right] & \text{approximation } \textit{superlumped} \end{array} \right. \tag{2.19}$$

où $\left[K^{(\bar{s})}\right]$ désigne la matrice de rigidité du complémentaire et l'indice b désigne un degré de liberté bord du sous-domaine (s). On pourra trouver des approximations plus complexes dans [Negrello *et al.*, 2018] ou dans le contexte des méthodes mixtes d'analyse globale-locale dans [Gendre *et al.*, 2011].
Dans le cas où un problème grossier est introduit dans la DDM, ces approximations peuvent être revisitées pour ne prendre en compte que l'énergie de déformation associée aux champs microscopiques, à courte longueur de variation. Une approximation très simple, classiquement utilisée en particulier dans les approches de type lagrangien augmenté ou dans la DDM monoéchelle basée sur la méthode LATIN est de considérer $Q^{(s)}$ comme un paramètre scalaire. Le problème d'interface (2.18) a alors l'avantage d'être local. Dans ce cas, la valeur optimale de ce paramètre correspond à la première valeur propre du complément de Schur primal du complémentaire $\left[S_p^{(\bar{s})}\right]$. Le choix de cet opérateur a une influence importante sur le taux de convergence d'une DDM mixte et doit être fait dans un compromis entre coût de calcul et efficacité. Dans le cas du choix d'un paramètre scalaire, l'utilisation d'un problème grossier est cependant conseillée pour améliorer le taux de convergence.

Le **Problème 6** peut être résolu de différentes façons notamment en fonction du choix du paramètre d'augmentation (opérateur local/scalaire ou opérateur global/discret). Les DDM s'appuyant sur les méthodes de type lagrangien augmenté s'appuie généralement sur une résolution du problème d'interface (local dans ce cas) par un algorithme de type Uzawa (minimisation alternée par rapport à chaque champ inconnu et étapes d'augmentation). Dans le cas d'interfaces parfaites en élasticité linéaire, la DDM monoéchelle basée sur la méthode LATIN [Ladevèze, 1999] est d'ailleurs strictement équivalente à la DDM mixte proposée dans [Glowinski et Le Tallec, 1990] et résolue par un algorithme Uzawa de type ALG3 [Glowinski et Le Tallec, 1989].
Dans le cas d'une approche algébrique (matricielle) dans laquelle on utilise un opérateur $\left[S_p^{(\bar{s})}\right]$ global, le problème d'interface (2.18) devient global. En utilisant l'opérateur mixte $\mathscr{M}^{(s)}$ (voir (2.17)) obtenu par résolution du problème non-linéaire (2.15) par sous-domaine à effort $\underline{\lambda}^{(s)}$ imposé sur $\Gamma^{(s)}$, le problème d'interface peut alors être condensé sur le multiplicateur $\underline{\lambda}$ [Pebrel, 2009]. On préfère cependant adopter une formulation hybride dans laquelle le problème d'interface est résolu en déplacement et pour laquelle des préconditionneurs existent (p. ex. BDD [Mandel, 1993, Mandel et Brezina, 1996] ou BDD-C [Dohrmann, 2003, Mandel et Dohrmann, 2003, Klawonn *et al.*, 2014]). De même, des formulations du problème d'interface en effort existent (p. ex. FETI-2LM [Roux *et al.*, 2003, Roux *et al.*, 2005, Roux, 2009]).

➜ Illustration : robustesse de la formulation mixte

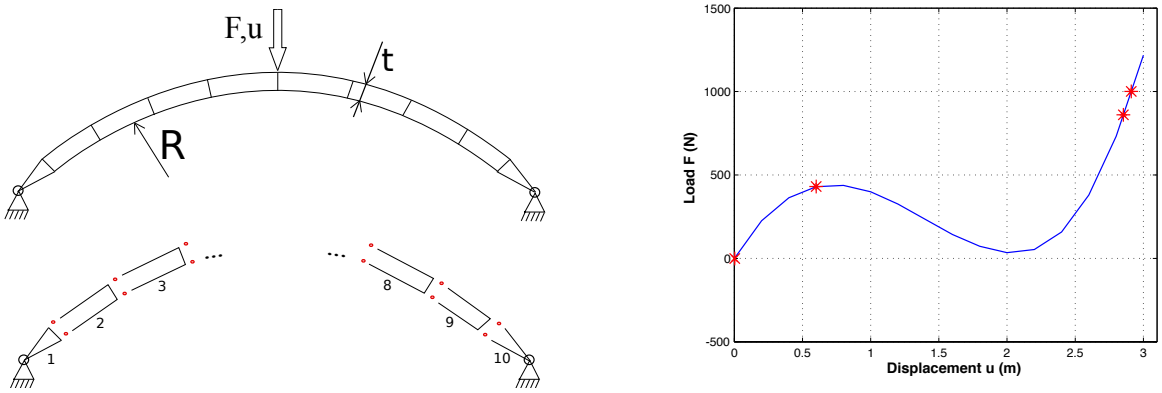
Dans le cadre de la thèse de J. Hinojosa, dirigée par O. Allix en collaboration avec EADS IW, les travaux initiés par Ph. Cresta [Cresta *et al.*, 2007] ont été étendus à **l'analyse post-flambage de grandes structures raidies** proches de structures aéronautiques industrielles [Hinojosa *et al.*, 2014] susceptibles d'exhiber un comportement de type *snap-through* ou *snap-back* [Hinojosa *et al.*, 2017].

Concernant la robustesse, le **PREPRINT 3** de l'article [Hinojosa *et al.*, 2014] montre que **la version DDM mixte est particulièrement robuste et permet l'utilisation d'incréments de chargement très importants, limitant ainsi le nombre de résolutions de problèmes d'interface et donc le nombre d'échanges entre sous-domaines/processeurs.**

Dans ces travaux, la formulation s'appuie sur un algorithme à deux directions de recherches alternées, similaire dans l'approche, à ce qui est fait dans la méthode LATIN ou dans la formulation avec Lagrangian augmenté résolue avec l'algorithme Uzawa ALG3 à deux étapes d'augmentation. Le choix retenu du paramètre d'augmentation $\left[Q_h^{(s)}\right]$ est cependant celui d'un opérateur global (et non d'un scalaire) ce qui conduit à un problème d'interface global. Sans rentrer dans les détails de la formulation du problème mixte décrite dans le **PREPRINT 3**, l'algorithme obtenu s'appuie sur une formulation primale du problème d'interface, similaire à celui décrit dans [Pebrel, 2009] et obtenu par une formulation hybride mixte-primale.

On compare ici les approches Newton-Krylov-Schur (NKS) primale ainsi que les approches Schur-Newton-Krylov (SNK) primale et mixte sur un exemple académique de structure présentant un comportement de type *snap-through* et tiré de [Hinojosa *et al.*, 2014]. La structure en treillis de poutres de la **Figure 2.3** représente une arche de rayon $R = 10\,m$ et d'épaisseur $t = 0.6\,m$ articulée à ses deux extrémités et soumise à un effort vertical en son centre. Chaque poutre de section $0.16\,m^2$ est discrétisée en 10 éléments poutres d'Euler-Bernoulli avec une formulation corotationnelle [Felippa et Haugen, 2005]. Le comportement matériau est élastique linéaire de module de Young $E = 70\,GPa$ et de coefficient de Poisson $\nu = 0.3$. La structure est décomposée en 10 sous-domaines,

chacun composé de 3 (ou 2 poutres pour le sous-domaine 10) si bien que chaque interface entre deux sous-domaines voisins ne comporte que 2 nœuds (soit un total de 6 degrés de liberté d'éléments finis de poutre) (**Figure 2.3(a)**). Afin d'initier le flambage localisé, la poutre supérieure du sous-domaine 5 est affaiblie en divisant sa section par deux.



(a) Structure treillis décomposée en 10 sous-domaines

(b) Comportement de type *snap-through*

Figure 2.3 – Structure en treillis de poutres articulée à ses extrémités, décomposée en 10 sous-domaines et soumise à une force concentrée – chemin d'équilibre effort-déplacement vertical (en bleu) et points convergés (étoiles rouges) pour l'approche SNK mixte(*) du **Tableau 2.1** [Hinojosa *et al.*, 2014]

Pour l'approche mixte, le paramètre d'augmentation a été choisi de façon à représenter la raideur du sous-domaine (s) considéré :

$$\left[Q_h^{(s)}\right] \approx \alpha \left[S_p^{(s')}\right] \quad \text{sur} \quad \Gamma^{(ss')}$$

avec $\alpha = 10^{-1} \approx 1/n$ où n est le nombre de sous-domaines et $\left[S_p^{(s')}\right]$ est le complément de Schur du sous-domaine voisin (s').

Le **Tableau 2.1** comparent les nombres d'itérations des solveurs de Newton locaux et du solveur global pour l'approche classique NKS Primale et les approches SNK primale et mixte. Les approches

NKS primale		SNK primale		SNK mixte(*)		SNK mixte(**)	
Pas de charg.	Nb. itér. glo. (loc.)	Pas de charg.	Nb. itér. glo. (loc.)	Pas de charg.	Nb. itér. glo. (loc.)	Pas de charg.	Nb. itér. glo. (loc.)
430	7 (70)	430	7 (70)	430 430 140	6 (95) 8 (225) 3 (40)	1000	10 (234)
430	7 (70)	430	7 (70)	1000	17 (350)	1000	10 (234)

Tableau 2.1 – Nombres d'itérations des solveurs non-linéaires global et local pour la méthode NKS primale et les méthodes SNK primale et mixte [Hinojosa Rehbein, 2012, Hinojosa *et al.*, 2017]

primales NKS et SNK ne parviennent pas à dépasser le point limite obtenu pour $F = 430\,N$. Seule l'approche SNK mixte parvient à le passer et parvient même à le faire en un seul pas de chargement de $1000\,N$ (cas SNK mixte(**) dans le **Tableau 2.1**). On constate également que le nombre d'itérations

globales pour le premier pas de chargement de 430 N est légèrement plus faible pour la méthode SNK mixte(*) (6 itérations globales) que celui de la méthode SNK primale (7 itérations). Si ce gain en nombre d'itérations globales reste modeste sur ce cas où les méthodes primales sont mises en échec, on constate en pratique que la méthode SNK mixte permet généralement d'utiliser des pas de chargement plus grands et conduit à un nombre d'itérations du solveur non-linéaire global plus faible [Hinojosa Rehbein, 2012]. Elle est également plus robuste dans le sens où elle peut passer de façon plus aisée des points limites.

La **Figure 2.4** montre les configurations déterminées au cours des premières itérations obtenues par l'approche mixte SNK mixte(**) du **Tableau 2.1** (un seul pas de chargement de 1000 N). On constate à l'itération 2, l'effet bénéfique de la condition mixte des problèmes locaux qui relâche la contrainte de continuité des déplacements aux interfaces. Cette itération est d'ailleurs celle qui de-

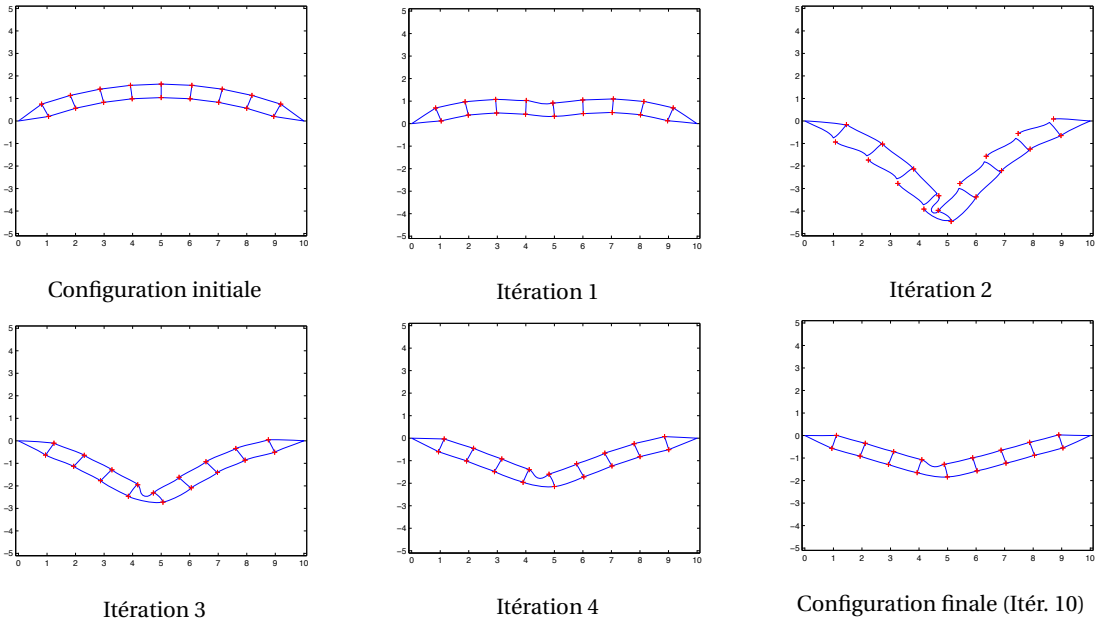


Figure 2.4 – Configurations déterminées au cours des premières itérations du solveur global et configuration finale obtenues par l'approche mixte SNK mixte(**) du **Tableau 2.1** (un seul pas de chargement de 1000 N) [Hinojosa Rehbein, 2012, Hinojosa *et al.*, 2017]

mande le plus d'itérations des solveurs locaux par sous-domaine comme le montre la **Figure 2.5**. La **Figure 2.6** montre comment évolue le critère $\eta_{local}^{crit.}$ de convergence des solveurs non-linéaires locaux pour chaque sous-domaine au cours des itérations du solveur non-linéaire global. On constate que la convergence des solveurs locaux implique bien la convergence du solveur global. On notera qu'un choix de la valeur du critère $\eta_{local}^{crit.}$ tel que définit en (2.8) ($\eta_{local}^{crit.} = \sqrt{\eta_{global}^{crit.}}$) est suffisant pour assurer la convergence et on montre en pratique que ce choix est optimal concernant le nombre total d'itérations du solveur global.

Des cas de structures au comportement plus complexes exhibant un comportement de type *snap-back* ont été étudiés dans [Hinojosa *et al.*, 2017]. Dans cet article une méthode de continuation, de type « longueur d'arc » [Crisfield, 1981], a été implémentée au niveau du problème global d'interface. Un exemple d'analyse de branche d'équilibre est montré en **Figure 2.7**. La taille des incréments de

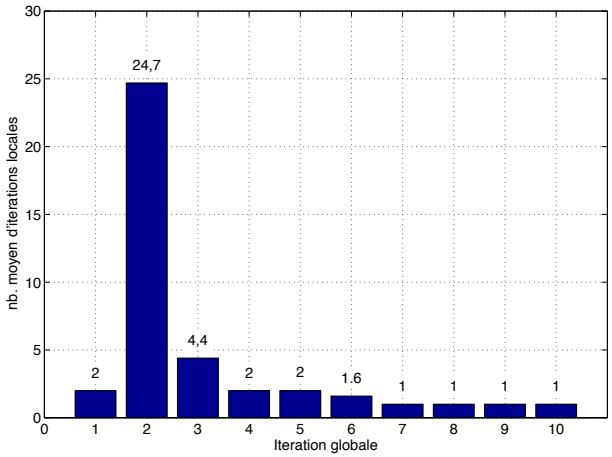


Figure 2.5 – Nombre moyen d'itérations des solveurs locaux par sous-domaine à chaque itération du solveur global

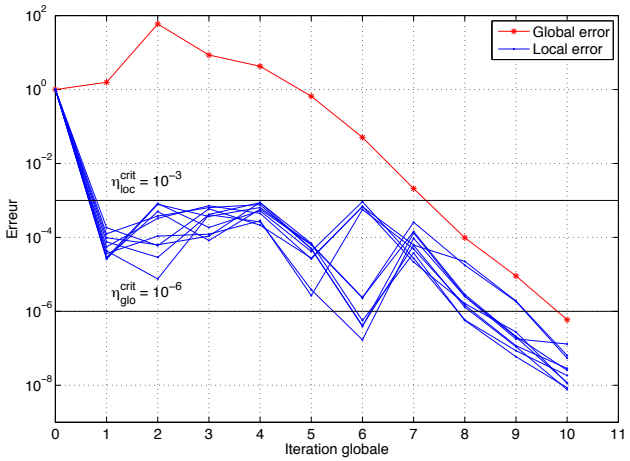
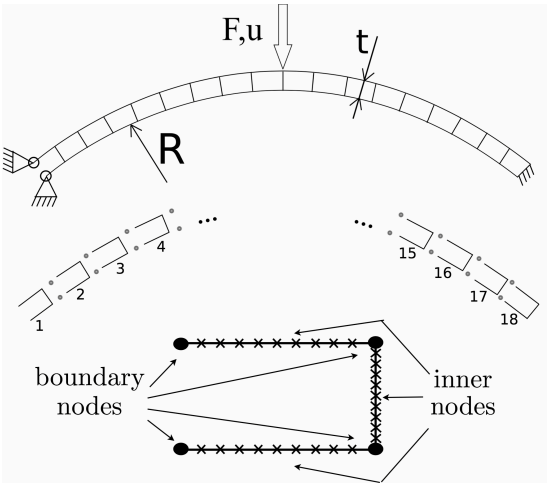


Figure 2.6 – Convergence du critère d'erreur global et du critère d'erreur local par sous-domaine à chaque itération globale [Hinojosa Rehbein, 2012, Hinojosa *et al.*, 2017]

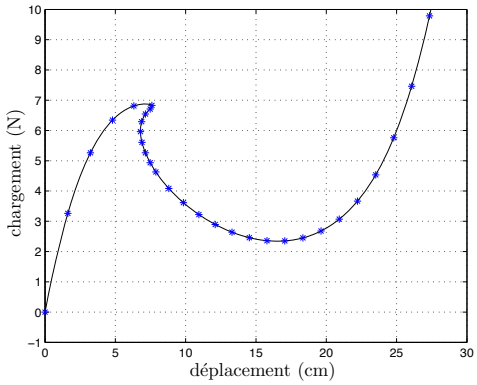
chargement étant pilotée par la méthode de longueur d'arc au voisinage du point d'instabilité, cela conduit a des petites corrections de déplacement au niveau des solveurs locaux faisant perdre de ce fait l'intérêt de la technique SNK de « relocalisation non-linéaire ». Cependant, ce point critique passé, les gains de la méthode SNK mixte sont à nouveau au rendez-vous et l'utilisation de pas de chargement plus grands redevient possible. Un autre intérêt, dû à la condensation du problème sur les interfaces, provient du fait que la méthode de longueur d'arc porte sur le pilotage d'un nombre réduit de degrés de liberté d'interface, réduisant ainsi sensiblement les coûts de calcul.

➜ Illustration : influence du partitionnement de la formulation mixte

Les propriétés d'extensibilité et d'optimalité ainsi que de coût de calcul des opérateurs sont fondamentales en DDM. Il est en effet souhaitable que le taux de convergence et l'efficacité ne dépendent pas trop du nombre de sous-domaines et du partitionnement ainsi que de la discrétisation.



(a) Structure treillis décomposée en 18 sous-domaines



(b) Comportement de type *snap-back*

Figure 2.7 – Structure en treillis de poutres exhibant un comportement de type *snap-back*, décomposée en 18 sous-domaines et soumise à une force concentrée – chemin d'équilibre effort-déplacement vertical (en bleu) et points convergés (étoiles bleues) pour l'approche SNK mixte [Hinojosa *et al.*, 2017]

Dans le cas linéaire pour les méthodes de Schur et les solveurs de Krylov, le choix du préconditionneur est crucial. Les méthodes SNK primale et mixte telles que formulées dans les travaux de thèse de J. Hinojosa [Hinojosa Rehbein, 2012] conduisent à un problème tangent d'interface formulé en déplacement. Cela rend ainsi possible l'utilisation de préconditionneurs classiquement utilisés dans le cas linéaire pour les approches primales (p. ex. BDD [Mandel, 1993, Mandel et Brezina, 1996] ou BDD-C [Dohrmann, 2003]).

Dans le **PREPRINT 3**, le problème tangent d'interface formulé en déplacement est résolu en parallèle par une méthode BDD-C. Par ailleurs, la formulation corotationnelle [Felippa et Haugen, 2005] retenue pour l'implémentation des éléments finis de poutre et de plaque conduisant à un système non-symétrique, un algorithme de Krylov de type GMRES [Saad et Schultz, 1986] a été utilisé.

La méthode BDD-C introduit des contraintes additionnelles portant sur la continuité du déplacement aux nœuds situés dans les coins des sous-domaines durant l'étape de préconditionnement de l'algorithme GMRES. Cette méthode a été proposée en réponse au problème de perte d'extensibilité due aux singularités constatées dans la littérature au niveau des coins pour les problèmes de plaque. Dans le cas des modèles de plaque étudiés dans le **PREPRINT 3**, les interfaces sont composées d'assemblages de segments de droite et de courbes. Le choix des nœuds de « coin » consiste en la sélection des deux nœuds les plus distants sur chaque interface. Tous les degrés de liberté des nœuds « coin » sont concernés dans la définition de ces contraintes additionnelles.

Le choix et la mise à jour des conditions de Robin (paramètre d'augmentation) pour l'approche mixte et leur influence sur l'efficacité et la robustesse ainsi que des études d'extensibilité en non-linéaire sont discutés dans le **PREPRINT 3**. On s'intéresse ici à l'influence du partitionnement sur le comportement de la méthode SNK mixte à travers un exemple de panneau raidi en compression **Figure 2.8**. Cette structure est représentative des panneaux constitutifs de structures aéronautiques telles que développées par le partenaire industriel, EADS IW. L'interaction entre phénomènes de flam-

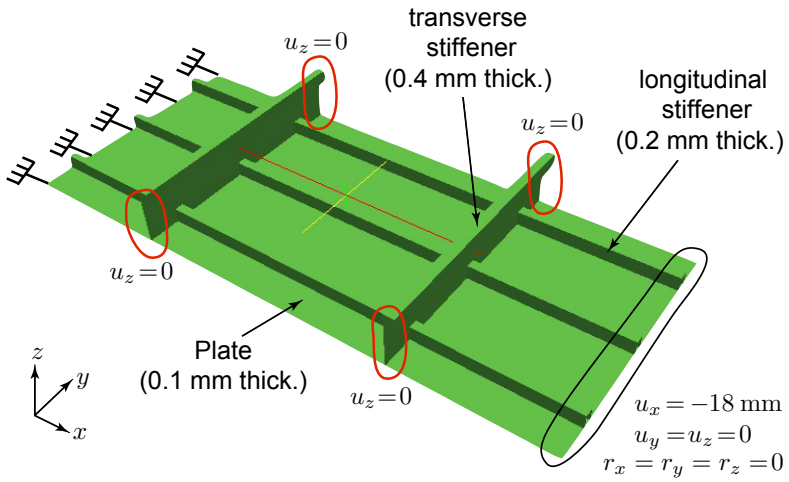
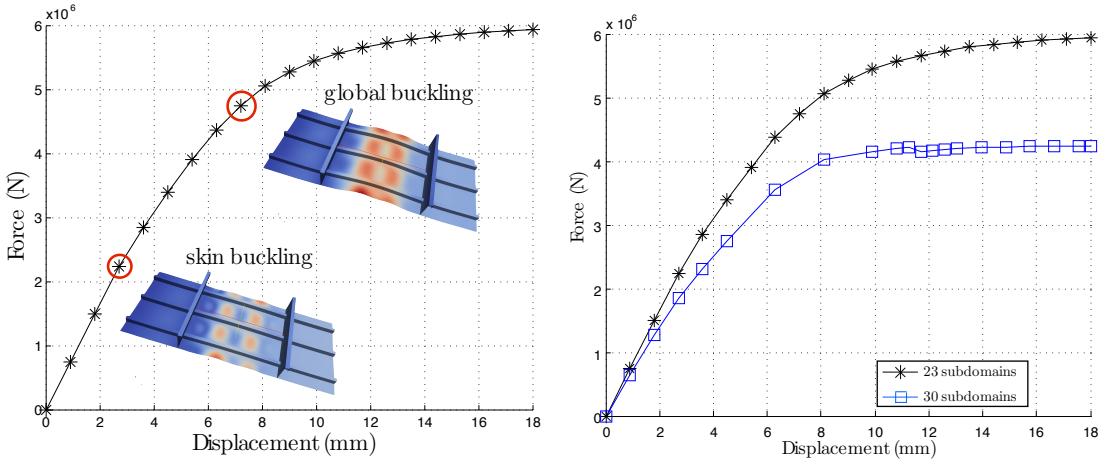


Figure 2.8 – Panneau raidi en compression : géométrie et conditions limites [Hinojosa *et al.*, 2014]

bage de peau localisés et flambage global des raidisseurs (voir **Figure 2.9(a)**) donne lieu à de nombreuses difficultés de convergence (bifurcations, instabilités...). Les méthodes SNK se sont montrées plus robustes que la méthode NKS primale pour traiter ce type de problème non-linéaire géométrique particulièrement ardu.

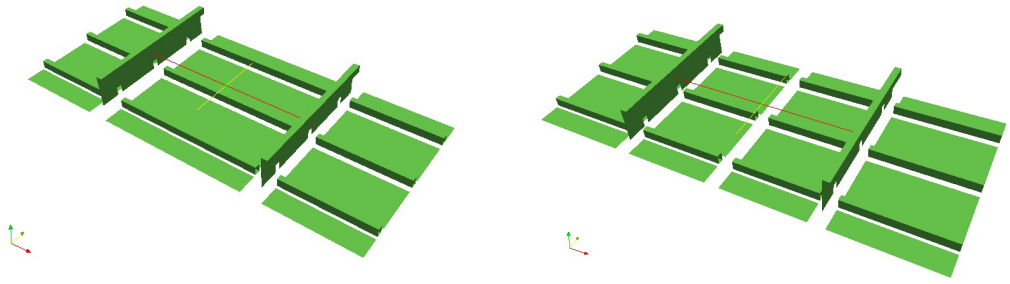


(a) Flambage local et global

(b) Deux chemins d'équilibre

Figure 2.9 – Comportement en compression du panneau raidi : flambage local et flambage global, deux chemins d'équilibre obtenus par les décompositions de la **Figure 2.10** [Hinojosa *et al.*, 2014]

Les deux partitionnements en 23 et 30 sous-domaines proposés en **Figure 2.10** conduisent à deux chemins d'équilibre différents pour le comportement en compression (voir **Figure 2.9(b)**). On constate en effet que les modes de flambage de peau initiés sont différents : 4 lobes pour la décomposition en 30 sous-domaine et 5 lobes pour celle en 23 sous-domaines.
A la différente de la décomposition en 23 sous-domaines, le fait qu'une interface se situe transversalement en plein milieu d'une peau du panneau pour la décomposition en 30 sous-domaines, empêche



(a) 23 sous-domaines (b) 30 sous-domaines

Figure 2.10 – Décomposition du pannerau raidi en 23 et 30 sous-domaines [Hinojosa *et al.*, 2014]

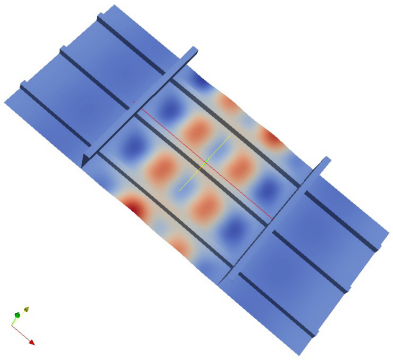
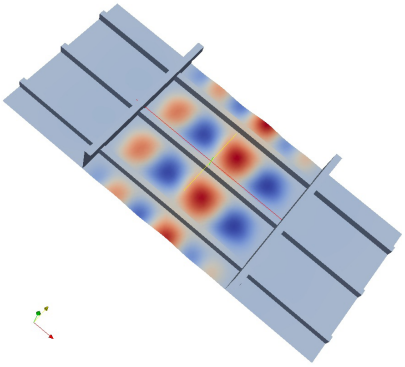
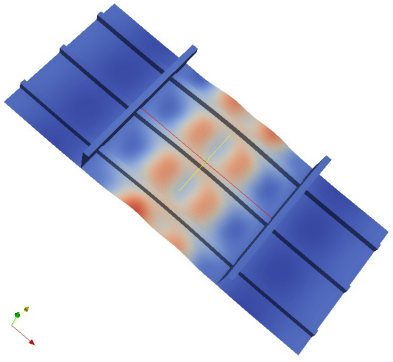
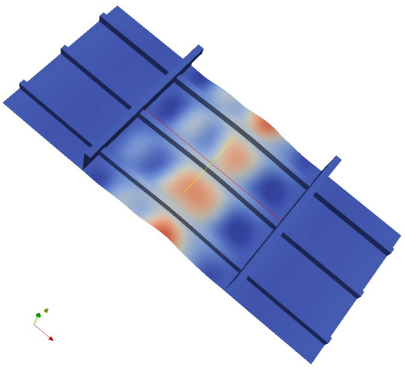
Décomposition en 23 sous-domaines	Décomposition en 30 sous-domaines
	
Flambage de peau à 5 lobes	Flambage de peau à 4 lobes
	
Flambage global des raidisseurs	Flambage global des raidisseurs

Figure 2.11 – Déformées montrant les phénomènes de flambage de peau et de flambage global pour les deux décompositions en sous-domaines données en **Figure 2.10**

le mode à 5 lobes de se développer. En effet, des difficultés de convergence ont nécessité de multiplier par un coefficient de 1000 (pénalisation) la valeur du choix du paramètre d'augmentation (de Robin) afin de forcer la continuité des déplacements et rotations sur cette interface problématique

pour la décomposition en 30 sous-domaines. Dans le cas présent seule une bande d'éléments du sous-domaine voisin a été utilisée pour estimer par défaut l'opérateur $\left[Q_h^{(s)}\right]$.
Ce choix du paramètre d'augmentation (de Robin) est donc *a priori* trop « raide » pour pouvoir suivre le chemin d'équilibre à 5 lobes (même si on observe en pratique une oscillation des itérés de l'algorithme entre les deux solutions). Si ce choix est acceptable sans pour autant être optimal pour les interfaces localisées à l'interface avec les raidisseurs, cette approximation est trop grossière pour une interface coupant une peau du panneau. Pour appuyer cette explication, il a été constaté que les approches SKN primale et mixte avec ce choix de paramètre conduisaient aux mêmes performances ce qui laisse à penser que le terme d'augmentation n'est ici pas optimal et mériterait d'être amélioré. Dans le cadre de la méthode FETI-DP, on pourra se référer à [Amini *et al.*, 2009a] qui propose un préconditionneur adapté pour l'assemblage de plaques avec raidisseurs.

Le choix de la décomposition est donc crucial concernant la robustesse. Un partitionnement qui respecte la « technologie » du composant – c'est-à-dire le positionnement des raidisseurs – et une certaine homogénéité dans la « rigidité » des interfaces (pas d'interface en plein milieu d'une peau) semble préférable.

➜ Bilan et perspectives

Les méthodes de décomposition de domaine avec condensation non-linéaire (Schur-Newton-Krylov) se montrent plus robustes que les méthodes Newton-Krylov-Schur. Si **l'approche mixte montre une grande robustesse**, le **choix des paramètres d'augmentation** est crucial quant à la convergence de la stratégie. L'**influence du partitionnement en sous-domaines** a également pu être mise en évidence dans le cas où les phénomènes non-linéaires localisés se développent à cheval sur plusieurs sous-domaines.
Les exemples fournis concernant le comportement de ces méthodes pour l'analyse post-flambage de structures s'appuyant sur des modèles de poutre ou de plaque, ont permis d'illustrer les contributions relatives à l'**implémentation d'un préconditionneur BDD-C pour la résolution en parallèle du problème tangent d'interface** ainsi qu'à l'intégration d'une **méthode de continuation** pour suivre des chemins d'équilibre présentant un comportement de type *snap-back*. Ce domaine d'application permet de mettre en exergue plusieurs perspectives.

La première concerne l'**amélioration des paramètres d'augmentation (de Robin) de l'approche mixte**. Une approximation à moindre coût dans un contexte de forte hétérogénéité de rigidité parmi les sous-domaines (en présence d'instabilités géométriques ou matérielles plus ou moins localisées) est une question largement ouverte. Deux pistes peuvent être abordées. La première concerne la proposition d'approximation de rang faible de la rigidité de l'environnement de chaque sous-domaine. On pourra se référer par exemple aux travaux de [Negrello *et al.*, 2018] ou dans le contexte des méthodes mixtes d'analyse globale-locale à [Gendre *et al.*, 2011]. La deuxième piste consiste à proposer un problème grossier d'interface plus pertinent par des approches GENEO [Spillane et Rixen, 2013] par exemple. Ce point fait actuellement l'objet de discussions pour une collaboration avec J. Hinojosa de l'Université de Talca au Chili. Dans ce cas, l'introduction de ce problème grossier peut conduire à revisiter l'interprétation des paramètres d'augmentation.

Une deuxième perspective concerne **le pilotage des méthodes SNK mixtes notamment en non-linéaire géométrique afin de contrôler d'éventuelles instabilités au niveau des solveurs non-linéaires locaux par sous-domaine ou mener des analyses de bifurcation**. Cette situation d'instabilité locale n'a pas été rencontrée en pratique mais un mauvais choix de paramètre d'augmentation

(trop raide ou trop souple) pourrait exhiber ce genre de phénomène. Aussi, dans un souci de robustesse, la question se pose d'introduire une méthode de continuation au niveau global sur le problème d'interface et au niveau local sur les sous-domaines.

3 Réduction de modèle du problème grossier de la DDM mixte basée sur la LATIN

En non-linéaire, le coût de calcul, de stockage et de mise à jour du préconditionneur ou du problème grossier/réduit d'interface est un point sensible. Afin de rendre la DDM mixte basée sur la méthode LATIN extensible, un problème réduit d'interface est défini à partir de la vérification partielle des conditions de transmission aux interfaces entre sous-domaines. Plus précisément, on vérifie à chaque étape de la méthode l'équilibre des interfaces au sens macroscopique tel que défini au **Chapitre 1** par la propriété de découplage (1.9) et la définition des quantités macroscopiques (1.10). Ainsi, on définit l'espace d'admissibilité des efforts macroscopiques suivant :

$$\mathscr{F}_{ad}^{M} = \left\{ \left\{ \underline{F}^{M(s)} \right\}_{1 \leqslant s \leqslant n^s}, \quad \underline{F}^{M(s)} + \underline{F}^{M(s')} = \underline{0}, \quad \forall\, \Gamma^{(ss')} \right\} \tag{2.20}$$

On peut de la même manière introduire l'espace d'admissibilité $\mathscr{W}_{ad}^{M}$ cependant cette condition n'est valable que pour certains comportements d'interface (p. ex. interface parfaite). L'équilibre à l'interface étant toujours vérifié quel que soit le comportement, on choisira donc l'espace d'admissibilité des efforts macroscopiques $\mathscr{F}_{ad}^{M}$.

Cette contrainte d'admissibilité (2.20) est ajoutée au groupe $\mathbf{A_d}$ d'admissibilité de la méthode LATIN (voir (2.10)). La prise en compte de cette condition peut être faite en introduisant un multiplicateur de Lagrange $\dot{\widetilde{W}}^{M(s)}$ par sous-domaine conduisant à la modification de la direction de recherche $\mathbf{E}^{-}$ (2.12) sur les interfaces [Ladevèze et Nouy, 2002, Nouy, 2003] :

$$\mathbf{h}^{-}\left(\underline{F}^{(s)} - \underline{\hat{F}}^{(s)}\right) + \left(\underline{\dot{W}}^{(s)} - \underline{\dot{\hat{W}}}^{(s)} - \dot{\widetilde{W}}^{M(s)}\right) = \underline{0}, \quad \forall\, \underline{x} \in \partial\Omega^{(s)}, \quad \forall\, s \tag{2.21}$$

ce qui modifie l'étape linéaire du **Problème 5** qui devient simplement :

Problème 7 (Nouvelle étape linéaire sur un sous-domaine (s)**)** *Trouver* $\left(\boldsymbol{\sigma}^{(s)}, \underline{F}^{(s)}\right) \in \mathscr{S}_{ad}^{(s)}$ *tel que :* $\forall\, \left(\delta\boldsymbol{\sigma}^{(s)}, \delta\underline{F}^{(s)}\right) \in \mathscr{S}_{ad,0}^{(s)}$,

$$\int_{\Omega^{(s)}\times[0,T]} \left(\mathbf{K}^{-1}\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{(s)} + \mathbf{H}\boldsymbol{\sigma}^{(s)}\right) : \delta\boldsymbol{\sigma}^{(s)}\,\mathrm{d}V\mathrm{d}t + \int_{\partial\Omega^{(s)}\times[0,T]} \mathbf{h}\,\underline{F}^{(s)} \cdot \delta\underline{F}^{(s)}\,\mathrm{d}\Gamma\mathrm{d}t =$$
$$\int_{\Omega^{(s)}\times[0,T]} \left(\mathbf{H}\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(s)} - \hat{\dot{\varepsilon}}_p^{(s)}\right) : \delta\boldsymbol{\sigma}^{(s)}\,\mathrm{d}V\mathrm{d}t + \int_{\partial\Omega^{(s)}\times[0,T]} \left(\mathbf{h}\,\underline{\hat{F}}^{(s)} + \underline{\dot{\hat{W}}}^{(s)} + \dot{\widetilde{W}}^{M(s)}\right) \cdot \delta\underline{F}^{(s)}\,\mathrm{d}\Gamma\mathrm{d}t \tag{2.22}$$

Le **Problème 7** est un *problème linéaire à état fixé* qui dépend des quantités « chapeau » connues provenant de l'étape locale précédente et du multiplicateur $\dot{\widetilde{W}}^{M(s)} \in \mathscr{W}^{M(s)}$. On souligne le fait que la direction de recherche $\mathbf{H}$ (et éventuellement $\mathbf{h}$) est également connue et fixée par l'évolution de l'état définie également à l'étape locale précédente en tout point et en tout instant (voir (2.13)). Par

conséquent, on peut, par linéarité, écrire la solution **s** de ce problème sur une sous-structure (s) de façon formelle comme suit :

$$\mathbf{s}^{(s)} = \bar{\bar{\mathbf{s}}}^{(s)}\left(\underline{\dot{\bar{W}}}^{M(s)}\right) + \hat{\hat{\mathbf{s}}}^{(s)}\left(\hat{\mathbf{s}}^{(s)}\right) \tag{2.23}$$

Ainsi, on peut en déduire de même :

$$\underline{F}^{M(s)} = \underline{\bar{\bar{F}}}^{M(s)} + \underline{\hat{\hat{F}}}^{M(s)} = \mathbf{L}_F^{(s)}\left(\underline{\dot{\bar{W}}}^{M(s)}\right) + \underline{\hat{\hat{F}}}^{M(s)}$$

où l'opérateur $\mathbf{L}_F^{(s)}$ est obtenu par résolution du **Problème 7** pour des quantités « chapeau » nulles et des chargements macroscopiques $\underline{\dot{\bar{W}}}^{M(s)}$ imposés :

Problème 8 (Problème microscopique sur un sous-domaine (s)**)** *Trouver* $\left(\boldsymbol{\sigma}^{(s)}, \underline{F}^{(s)}\right) \in \mathscr{S}_{ad}^{(s)}$ *tel que :* $\forall \left(\delta\boldsymbol{\sigma}^{(s)}, \delta\underline{F}^{(s)}\right) \in \mathscr{S}_{ad,0}^{(s)}$,

$$\int_{\Omega^{(s)}\times[0,T]} \left(\mathbf{K}^{-1}\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{(s)} + \mathbf{H}\boldsymbol{\sigma}^{(s)}\right) : \delta\boldsymbol{\sigma}^{(s)} \mathrm{d}V\mathrm{d}t + \int_{\partial\Omega^{(s)}\times[0,T]} \mathbf{h}\,\underline{F}^{(s)} \cdot \delta\underline{F}^{(s)} \mathrm{d}\Gamma\mathrm{d}t = \int_{\partial\Omega^{(s)}\times[0,T]} \underline{\dot{\bar{W}}}^{M(s)} \cdot \delta\underline{F}^{(s)} \mathrm{d}\Gamma\mathrm{d}t \tag{2.24}$$

Plus précisément, étant donné une base macroscopique spatiale $\left\{\underline{\beta}_i^M(\underline{x})\right\}_{1\leqslant i\leqslant n_x^M}$ de l'espace $\mathscr{W}^{M(s)}$ sur une des n_{int} interfaces $\Gamma^{(ss')}$ du sous-domaine (s) avec son voisin (s') (voir **Figure 2.12**) et une base macroscopique temporelle $\left\{\alpha_i^M(t)\right\}_{1\leqslant i\leqslant n_t^M}$ définie par morceaux sur un partitionnement grossier de l'intervalle de temps d'étude $[0, T]$, on peut alors poser [Nouy, 2003, Passieux, 2008] :

$$\underline{\dot{\bar{W}}}^{M(s)}(\underline{x}, t) = \sum_{i=1}^{n_t^M}\sum_{j=1}^{n_x^M} c_i^j \alpha_i^M(t)\underline{\beta}_i^M(\underline{x}), \quad \text{pour} \quad \underline{x} \in \Gamma^{(ss')} \tag{2.25}$$

On pourra se référer aux travaux de [Loiseau, 2001, Guidault *et al.*, 2007] qui proposent une base ma-

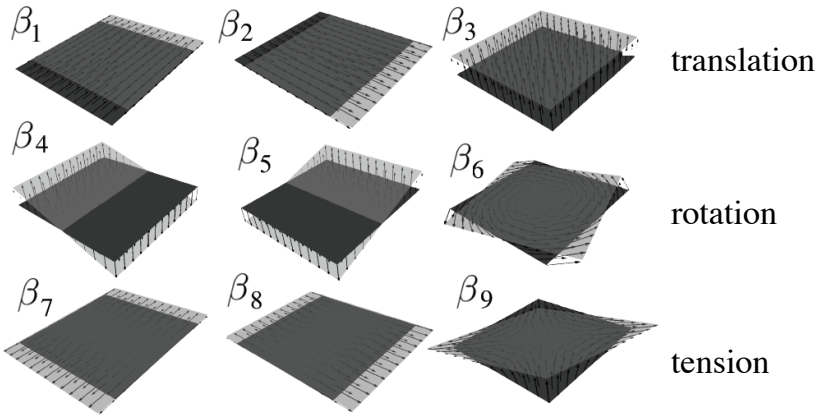


Figure 2.12 – Base macroscopique spatiale $\left\{\underline{\beta}_i^M\right\}_{1\leqslant i\leqslant n^M}$ de l'espace $\mathscr{W}^{M(s)}$ sur une interface plane de forme rectangulaire $\Gamma^{(ss')}$ qui extrait la partie linéaire d'une quantité spatiale d'interface [Cremonesi *et al.*, 2013]

croscopique spatiale $\left\{\underline{\beta}_i^M(\underline{x})\right\}_{1\leqslant i\leqslant n_x^M}$ qui extrait des parties polynomiales ou à [Guidault *et al.*, 2008]

qui propose une base macroscopique discontinue pour simuler la propagation de fissure. Afin de rendre l'approche extensible (au moins en espace), il convient que cette base contiennent au moins les mouvements de corps rigide de l'interface (à savoir les six premières fonctions de translation et de rotation en **Figure 2.12**). L'étude de l'extensibilité « en temps » est étudié dans [Passieux, 2008, Passieux *et al.*, 2010].

L'opérateur $\mathbf{L}_F^{(s)}$, qui peut être interprété comme un opérateur de comportement « homogénéisé » sur le sous-domaine espace-temps $\Omega^{(s)} \times [0,T]$, est obtenu en résolvant une série de **Problème 8** où l'on prend successivement pour $\underline{\dot{\widetilde{W}}}^{M^{(s)}}$ les fonctions de base macroscopiques $\left\{\underline{\beta}_i^M(\underline{x})\right\}_{1\leqslant i\leqslant n_x^M}$ et $\left\{\alpha_i^M(t)\right\}_{1\leqslant i\leqslant n_t^M}$. Leur coût de calcul est relativement réduit car $\underline{\dot{\widetilde{W}}}^{M^{(s)}}$ dépend de peu de paramètres. Cependant, il doit être recalculé dès lors que les directions de recherche **H** et **h** sont mises à jour. On peut alors formuler le problème réduit (grossier ou macroscopique) d'interface formulé en multiplicateur $\underline{\dot{\widetilde{W}}}^{M^{(s)}}$:

Problème 9 (Problème macroscopique d'interface) *Trouver* $\left\{\underline{\dot{\widetilde{W}}}^{M^{(s)}}\right\}_{1\leqslant s\leqslant n^s} \in \mathcal{W}_{ad,0}^M$ *(c.a.d. continus sur les interfaces et nuls sur* $\partial_u\Omega$*) tel que :* $\forall \left\{\delta\underline{\dot{\widetilde{W}}}^{M^{(s)}}\right\}_{1\leqslant s\leqslant n^s} \in \mathcal{W}_{ad,0}^M$,

$$\sum_s \int_{\partial\Omega^{(s)}\times[0,T]} \delta\underline{\dot{\widetilde{W}}}^{M^{(s)}} \cdot \left(\mathbf{L}_F^{(s)}\left(\underline{\dot{\widetilde{W}}}^{M^{(s)}}\right) + \underline{\hat{\dot{F}}}^{M^{(s)}}\right) \mathrm{d}\Gamma\mathrm{d}t = \sum_s \int_{(\partial\Omega^{(s)}\cap\partial_t\Omega)\times[0,T]} \delta\underline{\dot{\widetilde{W}}}^{M^{(s)}} \cdot \underline{\bar{t}}\,\mathrm{d}\Gamma\mathrm{d}t$$

Ce problème couple toutes les inconnues macroscopiques $\left\{\underline{\dot{\widetilde{W}}}^{M^{(s)}}\right\}_{1\leqslant s\leqslant n^s}$ qui dépendent de peu de paramètres, les $\left\{c_i^{j(s)}\right\}_{1\leqslant s\leqslant n^s}$. Il est donc de taille raisonnable : $n_x^M \times n_t^M$ fois le nombre d'interfaces $\Gamma^{(ss')}$ du problème. Une fois le **Problème 7** résolu pour un multiplicateur $\underline{\dot{\widetilde{W}}}^{M^{(s)}}$ nul, on détermine alors la partie $\hat{\dot{\mathbf{s}}}^{(s)}$ de la solution (2.23), et donc la contribution locale $\underline{\hat{\dot{F}}}^{M^{(s)}}$. On peut alors résoudre le **Problème 9** afin de déterminer la valeur des multiplicateurs macroscopiques $\left\{\underline{\dot{\widetilde{W}}}^{M^{(s)}}\right\}_{1\leqslant s\leqslant n^s}$ puis terminer la résolution du **Problème 7**.

Remarque 1 *Le problème microscopique par sous-domaine sous sa forme* ***Problème 7*** *ou sous celle utilisée pour le calcul de l'opérateur* $\mathbf{L}_F^{(s)}$, ***Problème 8****, peuvent être résolus de façon incrémentale après sa dualisation pour obtenir une formulation en déplacement [Nouy, 2003, Passieux, 2008]. Résoudre ce problème d'évolution parabolique à chaque itération de la méthode LATIN est très coûteux. Aussi, on utilise classiquement une technique d'approximation radiale (PGD) pour le résoudre [Nouy et Ladeveze, 2004, Ladevèze* et al.*, 2010].*

➜ Point de blocage

Le problème grossier d'interface, ***Problème 9*** *est construit par assemblage d'opérateurs homogénéisés locaux* $\mathbf{L}_F^{(s)}$ *sur chacun des sous-domaines. Chacun de ces opérateurs locaux est obtenu par une procédure d'homogénéisation numérique consistant à résoudre une série de problèmes microscopiques,* ***Problème 8*** *par sous-domaine, pour des chargements macroscopiques donnés. Leur*

calcul dépend des directions de recherches $\mathbf{H}$ *et* $\mathbf{h}$ *dont la mise à jour au cours des itérations est nécessaire en non-linéaire.* ***La ré-actualisation des opérateurs homogénéisés*** $\mathbf{L}_F^{(s)}$ ***et l'assemblage du problème macroscopique sont cependant des opérations coûteuses en temps de calcul.***

➜ Revue (non exhaustive) des techniques de réduction de modèle en homogénéisation

Plusieurs travaux cherchant à construire un modèle réduit d'opérateur homogénéisé en non-linéaire existent dans la littérature. L'idée consiste à résoudre une succession de problèmes microscopiques par sous-structure/VER pour tous les chargements macroscopiques qui peuvent être rencontrés lors du calcul ou choisis *a priori*. Dans [Hernández *et al.*, 2014], la POD est utilisée. On trouvera aussi une application de la POD pour l'homogénéisation de structures au comportement hyperélastique dans [Yvonnet et He, 2007]. La PGD est utilisée dans [Lamari *et al.*, 2010] pour l'homogénéisation du comportement thermique de VER de matériaux hétérogènes ou encore dans [El Halabi *et al.*, 2013] pour la méthode FE^2 en linéaire.

Dans une approche assez différente, on pourra également se référer aux méthodes permettant de réduire le nombre de variables d'état régissant l'évolution non-linéaire d'un VER de matériau hétérogène par la *Transformation Field Analysis* (TFA) [Dvorak *et al.*, 1994, Fish *et al.*, 1997, Chaboche *et al.*, 2001] ou la *Nonuniform Transformation Field Analysis* (NTFA) [Michel et Suquet, 2003, Michel et Suquet, 2004, Michel et Suquet, 2009, Roussette *et al.*, 2009].

La procédure utilisée dans la DDM mixte basée sur la LATIN ne se base pas sur une décomposition en VERs mais en sous-domaines pouvant être à l'extrême tous différents. L'illustration suivante propose une utilisation de la réduction de modèle par PGD en variables de temps, d'espace et de paramètres de chargement macroscopique pour la construction de l'opérateur homogénéisé utilisé dans le problème réduit d'interface afin de diminuer de façon significative les coûts de calcul et de stockage associés.

➜ Illustration : PGD pour la construction de l'opérateur homogénéisé de la DDM LATIN

Ces travaux sont décrits dans le **PREPRINT 4** de l'article [Cremonesi *et al.*, 2013] rédigé au cours du post-doctorat de M. Cremonesi, dirigé par P. Ladevèze, co-encadré par D. Néron et financé par le projet ANR SIM-DREAM (Nouveau paradigme en SIMulation numérique - Décomposition en variables séparées pour la Réduction A priori de Modèle, projet entre l'EC Nantes (GEM), l'ENS Cachan (LMT) et l'INSA Lyon (LAMCOS), ANR-2010-COSI-006).

Dans la DDM mixte basée sur la méthode LATIN, les problèmes microscopiques par sous-domaine, **Problème 7** (ou **Problème 8**), sont résolus par la PGD. Elle peut se baser classiquement sur une méthode de construction s'appuyant sur une minimisation du résidu d'« équilibre » [Nouy, 2010]. Une autre alternative plus robuste consiste à construire une approximation qui minimise une erreur en direction de recherche [Nouy et Ladeveze, 2004, Ladevèze *et al.*, 2010]. Pour faire simple, la contrainte est cherchée sous forme séparée comme suit :

$$\boldsymbol{\sigma}^{(s)}(\underline{x}, t) = \sum_{i=1}^{M} A_i(t)\boldsymbol{B}_i(\underline{x}) \tag{2.26}$$

A partir de la définition (2.25) de $\underline{\dot{\widetilde{W}}}^{M^{(s)}}(\underline{x}, t)$, on propose dans le **PREPRINT 4** une représentation sous forme séparée en variable du temps, d'espace et des paramètres c_i^j (avec $1 \leqslant i \leqslant n_i^M$ et $1 \leqslant j \leqslant$

n_x^M) :

$$\boldsymbol{\sigma}^{(s)}(\underline{x},t) = \sum_{i=1}^{M} A_i(t)\boldsymbol{B}_i(\underline{x})C_i(\underline{c}^{(s)}) \tag{2.27}$$

où $\underline{c}^{(s)} = [\underline{c}_1 \dots \underline{c}_{n_t^M}]^T$ concatène par exemple sous forme de vecteurs colonnes $\underline{c}_i$ les coefficients c_i^j.
Il convient bien évidemment d'intégrer la formulation faible sur l'espace des paramètres dont le domaine de variation est à choisir. On pourra par exemple s'appuyer sur une prédiction élastique du calcul lors de l'initialisation de la méthode LATIN.
Par des résolutions successives des problèmes microscopiques, **Problème 8**, on en déduit ainsi un nouvel opérateur « homogénéisé » tel que :

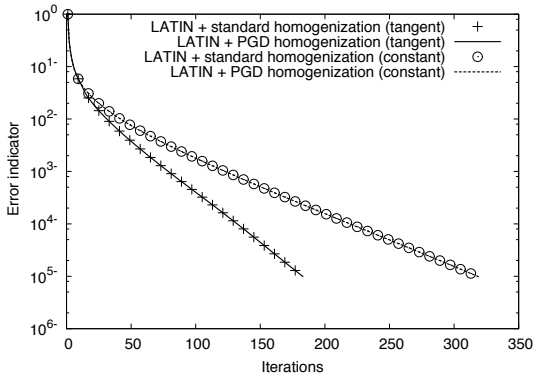
$$\mathbf{L}_F^{(s)} : \left\{ \begin{array}{ccc} \mathscr{W}^{M(s)} & \rightarrow & \mathscr{F}^{M(s)} \\ \underline{\dot{\widetilde{W}}}^{M(s)}\left(\underline{x},t,\underline{c}^{(s)}\right) & \mapsto & \underline{\tilde{F}}^{M(s)} = \sum_{i=1}^{M} a_i(t)\underline{b}_i(\underline{x})c_i(\underline{c}^{(s)}) \end{array} \right. \tag{2.28}$$

Dû à la linéarité du **Problème 8**, on notera que les fonctions c_i sont linéaires en variable $\underline{c}^{(s)}$. Le problème réduit d'interface **Problème 9** sera donc linéaire en ces coefficients.
Un rapide calcul permet de montrer que le nombre de problèmes spatiaux à résoudre pour déterminer les fonctions spatiales $\boldsymbol{B}_i(\underline{x})$ (problème le plus coûteux lors de la génération des triplets par un algorithme de puissance itérée pour construire la PGD de la contrainte (2.27)) est de l'ordre de $M \times n_{int} \times n_x^M \times n_{max}$ où n_{max} est le nombre maximal d'itérations de l'algorithme de puissance itérée. Ce nombre est à comparer à celui obtenu pour la construction de la PGD sous la forme (2.26) à savoir $M \times n_{int} \times n_x^M \times n_t^M \times n_{max}$. Dans le **PREPRINT 4** , afin de simplifier la présentation, la base macroscopique temporelle n'est pas introduite. On suppose ainsi que les fonctions $\{\alpha_i^M(t)\}_{1 \leqslant i \leqslant n_t^M}$ correspondent simplement à une discrétisation en n_t éléments finis temporels de $[0, T]$.

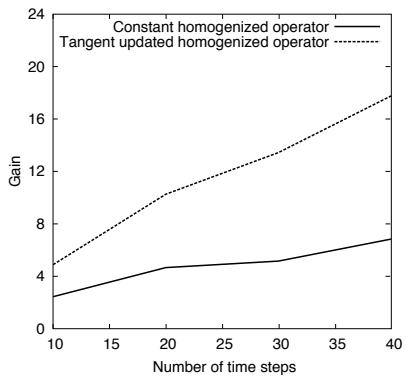
La **Figure 2.13(a)** illustre dans le cas d'un comportement académique non-linéaire dépendant du temps l'intérêt de mettre à jour la direction de recherche **H** (calcul de l'opérateur tangent (2.13)) quant au taux de convergence. On constate également que la nouvelle procédure selon la PGD définie par (2.27) (courbes *PGD homogenization*) ne détériore pas le taux de convergence et la courbe de convergence se superpose à celle obtenue avec la PGD de (2.26).
Le gain en termes de nombre de problèmes spatiaux microscopiques en fonction du nombre de pas de temps n_t à résoudre pour le calcul de l'opérateur homogénéisé est donné en **Figure 2.13(b)**. Comme attendu, on constate que **le gain est d'autant plus intéressant (augmentation quasi-affine) que le nombre de pas de temps augmente** ce qui est appréciable dans le cas où un raffinement temporel est nécessaire pour décrire des phénomènes évoluant rapidement. Un gain proche de l'ordre de 20 est même obtenu pour un nombre modeste de 40 pas de temps. On notera que l'intérêt de la procédure réside bien évidemment dans son application en non-linéaire, le cas linéaire permettant de précalculer l'opérateur homogénéisé à l'initialisation et ne nécessitant pas de mise à jour.

➜ Bilan et perspectives

Dans l'objectif de **diminuer le coût de calcul et de mise à jour de l'opérateur homogénéisé** par sous-domaine utilisé dans la définition du problème grossier de la DDM mixte multiéchelle basée sur la LATIN, la **construction d'une PGD de la solution sous la forme d'une représentation en variables séparées (temps-espace-paramètres de chargement macroscopique)** a été proposée. Le taux de convergence n'est pas dégradé par cette procédure et une **réduction significative du coût de calcul, en particulier pour le non-linéaire,** est obtenu. Le gain est d'autant plus important que le nombre de



(a) Indicateur de convergence de la méthode LATIN



(b) Gain en nombre de problèmes spatiaux microscopiques

Figure 2.13 – Indicateur de convergence de la méthode LATIN avec (*tangent*) ou sans (*constant*) mise à jour de la direction de recherche **H**, gain en nombre de problèmes spatiaux microscopiques en fonction du nombre de pas de temps pour le calcul de l'opérateur homogénéisé [Cremonesi *et al.*, 2013]

pas de temps augmente (dépendance affine). On soulignera également le **gain en termes de stockage** lié à l'intérêt de représenter l'opérateur homogénéisé sous forme PGD.

Cette procédure de construction du comportement homogénéisé par PGD ouvre la voie vers plusieurs pistes de développement. Le rôle de cet opérateur étant de rendre compte du comportement global de la structure, sa réutilisation pour un cas proche est évident. **L'opérateur homogénéisé pourrait ainsi être calculé *offline* et stocké pour être réutilisé avantageusement** pour déterminer la réponse de la structure à un nouveau chargement ou à de petites modifications de sa microstructure dans le cadre de l'optimisation par exemple. Dans tous les cas, l'approche mériterait d'être appliquée à des **comportements plus complexes** (comportement élasto-plastique ou endommageable par exemple). Enfin, on pourrait tirer parti de la **technique d'hyper-réduction** décrite ci-après, en **Section 4**, afin de réduire encore les coûts de calcul inhérents à la résolution par PGD des problèmes microscopiques nécessaires pour la détermination de l'opérateur homogénéisé.

4 Technique d'hyper-réduction pour la réduction de modèle en non-linéaire

Dans le cadre des DDM avec condensation linéaire et de la DDM basée sur la LATIN, les problèmes non-linéaires résolus au niveau des sous-domaines (voir respectivement **Problème 6** et **Problème 7**) peuvent être coûteux. Dans le cas de la méthode LATIN pour laquelle une approximation de la solution définie sur tout le domaine spatial et temporel est recherchée à chaque itération ce point peut être critique dans la situation où les sous-domaines ont un comportement non-linéaire. Comme discuté en **Section 3** dans le cadre de la méthode LATIN, les techniques de réduction de modèle par PGD et de base réduite sont alors classiquement utilisées pour résoudre le **Problème 7** d'évolution non-linéaire par sous-domaine.

➜ Point de blocage

Bien que les techniques de réduction de modèle (ROM) permettent de diminuer la dimension du problème dans le sens où moins de « degrés de liberté » sont nécessaires pour représenter la solution, ***la complexité de calcul liée à l'évaluation des termes non-linéaires et à la construction du modèle réduit (projection sur la base réduite) dépend de la taille initiale du problème de départ potentiellement de grande dimension****. Ce point qui est un véritable « goulot d'étranglement » pour la réduction de modèle en non-linéaire, peut être particulièrement sensible lorsque la taille de la base réduite évolue au cours du calcul comme c'est le cas pour les méthodes de réduction de modèle basée sur la* Proper Generalized Decomposition *(PGD).*

➜ Revue (non exhaustive) des techniques d'hyper-réduction

Les méthodes de réduction de modèle sont d'autant plus performantes que le modèle réduit construit par projection dans la base réduite n'est construit qu'une seule fois. Dans le cas des méthodes où la base réduite est calculée au préalable lors d'une étape de calcul *offline* d'apprentissage puis stockée, la résolution du problème consiste à en « projeter les équations » dans la base réduite (p. ex. en utilisant une formulation de type Galerkine) pour former un système de taille modeste, dont la résolution sera rapide. Le coût de cette phase *online* est donc faible, à condition que la construction du modèle réduit projeté ne soit pas elle-même trop coûteuse, ou ne soit pas répétée à de nombreuses reprises.

En décomposition de domaine par exemple, les méthodes de réduction de modèle peuvent être utilisées pour réduire les temps de calcul des problèmes par sous-domaine en particulier si le comportement reste dans son régime linéaire. Comme vu précédemment en **Section 3**, elles peuvent être utilisées en quasi-statique pour construire un comportement homogénéisé. En dynamique, on peut générer une base réduite par POD ou SVD pour les sous-domaines qui restent dans leur régime linéaire à partir d'une collection de *snapshots* générés à la volée au cours du calcul. Dès que les non-linéarités se développent dans un sous-domaine, la solution n'est plus obtenue par ROM mais par un calcul sur le modèle non-linéaire initial non réduit. On trouvera par exemple dans [Confalonieri *et al.*, 2013, Corigliano *et al.*, 2013] une application de cette stratégie pour un problème électro-mécanique couplé dans lequel la non-linéarité est confinée dans les forces électro-statiques à l'interface entre les sous-domaines mécaniques au comportement élastique linéaire. L'élasto-plasticité en dynamique est traitée dans [Corigliano *et al.*, 2015] et la propagation d'une fissure cohésive dans un milieu quasi-fragile en dynamique dans [Corigliano *et al.*, 2016]. Enfin, [Radermacher et Reese, 2014] s'intéresse aux problèmes de mise en forme. Dans ces travaux, **la base réduite par sous-domaine n'étant destinée qu'à représenter la réponse élastique, elle est au final de taille relativement modeste et le coût de projection en linéaire sur cette base est négligeable. Il n'en est pas de même en non-linéaire qui plus est pour une base réduite de grande taille et qui évolue.**

Plusieurs techniques existent dans la littérature pour répondre à cette problématique, en particulier **dans le contexte des approches de réduction de modèle s'appuyant sur une étape d'apprentissage** (p. ex. POD-Galerkine, base réduite). La qualité de l'approximation de la solution en non-linéaire dépend alors de cette procédure d'apprentissage et des données sur lesquelles elle s'appuie. En particulier, **la question du choix de l'échantillonnage de l'espace des paramètres ou des *snapshots* se pose afin de représenter correctement et à moindre coût la solution et plus précisément les**

termes non-linéaires. L'*Empirical Interpolation Method* (EIM) est probablement une des méthodes les plus populaires [Barrault *et al.*, 2004, Grepl *et al.*, 2007]. Différentes variantes en ont été proposées comme la version discrète (*Discrete* EIM (DEIM) [Chaturantabut et Sorensen, 2010]) ou la *Best Interpolation Point Method* (BPIM) [Nguyen et Peraire, 2008]. Une autre famille de méthode est celle des applications de la Gappy-POD comme l'*A Priori Hyper-Reduction* (APHR) [Ryckelynck, 2005], la *Missing Point Estimation* (MPE) [Astrid *et al.*, 2008] ou la *Gauss Newton with approximated tensors* (GNAT) [Carlberg *et al.*, 2013]. On pourra aussi se référer à l'*Energy-Conserving Sampling and Weighting* (ECSW) [Farhat *et al.*, 2014]. Une stratégie de sélection adaptative des échantillons (des *snapshots*) de l'espace paramétrique est proposée dans [Lu *et al.*, 2018a, Lu *et al.*, 2018b] dans le cas de problèmes de soudage à plusieurs paramètres (terme source paramétré non-linéaire) afin de construire en *offline* des abaques virtuels ou des surfaces de réponse. La solution obtenue sous forme séparée (produits de fonctions dépendant d'un seul paramètre) peut alors être avantageusement exploitée par exemple pour calculer la sensibilité d'une fonction coût à un paramètre et mener, pour un coût réduit, des calculs *online* d'optimisation ou d'identification de paramètres de soudage [Lu *et al.*, 2019].

Concernant les méthodes s'appuyant sur la PGD, les techniques pour répondre au problème sont beaucoup moins nombreuses. La possibilité d'enrichir la base réduite tout au long du calcul est un avantage certain pour résoudre efficacement les problèmes non-linéaires. Cependant, **le fait que la base réduite évolue continuellement rend les techniques précédentes, comme l'EIM, *a priori* moins pertinentes dans ce contexte**. En effet, *pour un nombre fixé de points « magiques » d'interpolation*, l'erreur commise dans les coefficients utilisés pour interpoler les termes non-linéaires domine quand la taille de la base réduite augmente [Grepl *et al.*, 2007]. Ajouter davantage de points magiques devient nécessaire dès lors que la base réduite évolue. Cette opération est cependant coûteuse. Une telle technique risque d'être moins efficace dans ce cas, tout du moins dans le contexte de la méthode LATIN qui s'appuie sur la PGD.

➜ Illustration : technique des points de référence (RPM) pour la ROM en non-linéaire

Dans le cadre de la thèse de M. Capaldo dirigée par P. Ladevèze, co-encadrée par D. Néron et financée par le projet ANR SIM-DREAM, la technique des points de référence (RPM) a été étudiée. Le **PREPRINT 5** de l'article [Capaldo *et al.*, 2017] montre comment une **réduction significative de la complexité de calcul** a pu être obtenue lors de la construction de modèle réduit pour les systèmes d'équations aux dérivées partielles non-linéaires paramétrées ou dépendantes du temps.

Basé sur le concept de points et de paramètres/instants de référence avec leurs domaines/patchs d'influence, la RPM définit un format « compressé » des données à partir duquel une approximation par patch de rang faible des opérateurs peut être reconstruite à bas coût par des formules explicites, et sans avoir recours à une techniques basée sur la SVD. Dans le **PREPRINT 5**, la RPM est appliquée à la résolution d'une équation aux dérivées partielles elliptique non-linéaire paramétrée, initialement étudiée dans [Grepl *et al.*, 2007], par une méthode de réduction de modèle basée sur la PGD. Le solveur non-linéaire retenu est la méthode LATIN qui appliquée dans ce cas présente des similarités avec les méthodes ADMM [Glowinski et Le Tallec, 1989, Glowinski et Le Tallec, 1990, Glowinski, 2015]. La formulation faible sur le domaine spatiale Ω et l'espace $\mathscr{D}$ des paramètres du problème étudié s'écrit

sous la forme :

Problème 10 (Formulation faible sur le domaine espace-paramètre) *Trouver $u \in \mathscr{S}$ tel que :*

$$\forall\, v \in \mathscr{S}, \quad A(u,v) + G(u,v) = L(v)$$

où A et L sont respectivement des formes bilinéaire et linéaire définies par :

$$A(u,v) = \int_{\mathscr{D}} a(u(\underline{\mu}, v(\underline{\mu})\, \mathrm{d}\mu \quad \textit{and} \quad L(v) = \int_{\mathscr{D}} l(v(\underline{\mu})\, \mathrm{d}\mu$$

La forme non-linéaire G est définie par :

$$G(u,v) = \int_{\mathscr{D}\times\Omega} g(u;\underline{\mu}\, v\, \mathrm{d}x\, \mathrm{d}\mu$$

avec :

$$\mathscr{S} = L^2(\mathscr{D},\mathscr{V}) = \{\, u : \mathscr{D} \to \mathscr{V}(\Omega),\ \int_{\mathscr{D}} \|u\|_{\mathscr{V}}^2\, \mathrm{d}\mu < \infty \,\}$$

Pour plus de détails sur les notations, on pourra se référer au **PREPRINT 5**.

Le solveur non-linéaire utilisé, la méthode LATIN, génère des approximations de la solution sur tout le domaine spatial et tout l'espace des paramètres (voir **Figure 2.1**) par corrections successives, et se prête donc bien à une représentation sous forme séparée en variable $\underline{x}$ d'espace et variable $\underline{\mu}$ de paramètre. En notant $\mathscr{P} = L^2(\mathscr{D};\mathbb{R}^2) := L^2(\mathscr{D})$ et en identifiant l'espace $\mathscr{S} = L^2(\mathscr{D},\mathscr{V})$ avec l'espace produit tensoriel $\mathscr{V} \otimes \mathscr{P}$, la correction $\delta u^{(n+1)}$ de l'étape linéaire est cherchée dans $\mathscr{V} \otimes \mathscr{P}$. Une approximation d'ordre k de l'itéré $u^{(n+1)}$ est ainsi cherchée sous la forme séparée suivante :

$$u^{(n+1)}(\underline{x},\underline{\mu}) \approx u_k^{(n+1)}(\underline{x},\underline{\mu}) = u^{(0)}(\underline{x},\underline{\mu}) + \sum_{i=1}^{k} \Phi_i(\underline{x})\, \lambda_i(\underline{\mu}) \tag{2.29}$$

où $u^{(0)} \in \mathbf{A_d}$ est une approximation initiale (sous forme séparée ou non) de la solution admissible vérifiant les conditions limites.
Chaque paire $(\lambda_i, \Phi_i) \in \mathscr{P} \times \mathscr{V}$ inconnue est générée progressivement (PGD « progressive ») pendant le calcul par un algorithme *glouton*. La construction d'une nouvelle fonction spatiale Φ_i, par un algorithme de type puissance itérée par exemple, est l'étape la plus coûteuse du processus. Aussi, à l'itération $n+1$ de la méthode LATIN, on commence généralement d'abord par une mise à jour des fonctions des paramètres $\{\lambda_i\}_{1\leqslant i\leqslant k}$ en utilisant la base réduite $\mathscr{W}_k = \{\Phi_i\}_{1\leqslant i\leqslant k}$ générée précédemment jusqu'à l'itération n. Cette *étape préliminaire* améliore de façon significative le taux de convergence des approches PGD « progressives » [Ladevèze *et al.*, 2010, Nouy, 2010, Bonithon et Nouy, 2012]. Elle correspond à l'étape de résolution *online* d'une technique classique de base réduite. La différence provient ici du fait que la base réduite $\mathscr{W}_k = \{\Phi_i\}_{1\leqslant i\leqslant k}$ évolue tout au long du calcul, ce qui rend les opérations de précalcul des opérateurs inefficaces. Le problème à résoudre peut s'écrire sous la forme suivante :

Problème 11 (Etape préliminaire / de mise à jour) *Trouver les corrections des fonctions des paramètres $\{\delta\lambda_i\}_{1\leqslant i\leqslant k}$ telles que :*

$1 \leqslant j \leqslant k,\ \forall\, \lambda^* \in \mathscr{P}$,

$$\sum_{i=1}^{k} \int_{\mathscr{D}} \lambda^* \left(a(\Phi_i,\Phi_j) + \int_{\Omega} \Phi_i\, \mathbf{H}^-(u^{(n)};\underline{\mu})\, \Phi_j\, \mathrm{d}x \right) \delta\lambda_i\, \mathrm{d}\mu = -\int_{\mathscr{D}} \lambda^*\, \mathscr{R}(u^{(n)},\Phi_j;\underline{\mu})\, \mathrm{d}\mu \tag{2.30}$$

où $\mathbf{H}^-$, direction de recherche de la méthode LATIN, est prise égale à l'opérateur tangent (voir aussi (2.13)) :

$$\mathbf{H}^-(u^{(n)};\underline{x},\underline{\mu}) = \left.\frac{\partial g(u;\underline{\mu})}{\partial u}\right|_{u=u^{(n)}} \tag{2.31}$$

On note que le terme $a(\Phi_i, \Phi_j)$, indépendant des paramètres $\underline{\mu}$, peut être précalculé à la condition que la base réduite ne change pas. Cependant le terme $\Phi_i\ \mathbf{H}^-(u^{(n)}; \underline{\mu})\ \Phi_j$ et le résidu $\mathscr{R}(u^{(n)}, \Phi_j\ \lambda^*; \underline{\mu})$ dépendent de $g(u^{(n)}; \underline{\mu})$ et doivent être évalués pour chaque nouvelle valeur de paramètre et chaque nouvel itéré $u^{(n)}$. L'évaluation de ces termes et la projection sur la base réduite donnent lieu à une complexité de calcul qui est fonction de la taille N du problème initial. Cela illustre le point de blocage rencontré classiquement pour la réduction de modèle en non-linéaire (voir le **PREPRINT 5** pour le calcul détaillé de la complexité). **Ce problème n'est donc pas spécifique à la réduction de modèle par PGD mais à la plupart des méthodes de base réduite.**

L'approche EIM propose une technique d'interpolation des termes non-linéaires à partir de la construction *offline* d'une base réduite supplémentaire dédiée. Elle permet de construire une interpolation de la fonction non-linéaire g sous la forme :

$$g(u^{(n)}; \underline{x}, \underline{\mu}) \approx g_M(u^{(n)}; \underline{x}, \underline{\mu}) = \sum_{m=1}^{M} \varphi_m^M(\underline{\mu})\ q_m(\underline{x}) \tag{2.32}$$

où M points « Magiques » d'interpolation du domaine spatial, $\{\underline{x}_m^M\}_{1 \leqslant m \leqslant M}$, et M points « Magiques » de l'espace des paramètres, $\{\underline{\mu}_m^M\}_{1 \leqslant m \leqslant M}$, sont déterminés par un processus de sélection *greedy* de façon à construire en *offline* les fonctions d'interpolations $\{q_m(\underline{x})\}_{1 \leqslant m \leqslant M}$. Pour chaque itéré $u^{(n)}$, les fonctions coefficients $\{\varphi_m^M(\underline{\mu})\}_{1 \leqslant m \leqslant M}$ doivent être mises à jour en *online* pour le nouveau modèle réduit de $u^{(n)}$ évalué aux points magiques d'interpolation $\{\underline{x}_m^M\}_{1 \leqslant m \leqslant M}$. On notera que la fonction g_M est interpolante aux points magiques spatiaux, c.a.d. $g(u^{(n)}; \underline{x}_m^M, \underline{\mu}) = g_M(u^{(n)}; \underline{x}_m^M, \underline{\mu})$ pour $1 \leqslant m \leqslant M$ [Grepl *et al.*, 2007]. L'opérateur tangent du **Problème 11** peut être approché par l'EIM comme suit :

$$\mathbf{H}^-(u^{(n)}; \underline{x}, \underline{\mu}) = \left.\frac{\partial g(u; \underline{\mu})}{\partial u}\right|_{u=u^{(n)}} \approx \mathbf{H}_M^-(u^{(n)}; \underline{x}, \underline{\mu}) = \sum_{m=1}^{M} \bar{\varphi}_m^M(\underline{\mu})\ q_m(\underline{x}) \tag{2.33}$$

où $\bar{\varphi}_m^M$ est la dérivée partielle de φ_m^M par rapport à $\underline{\mu}$. L'approximation du résidu $\mathscr{R}$ par l'EIM peut être également faite. On ne le détaillera pas ici (pour plus de détails voir [Grepl *et al.*, 2007]). Ainsi, grâce à la représentation (2.32) sous forme séparée du terme non-linéaire, (2.30) peut être approchée par l'EIM comme suit :

$$\begin{aligned} &1 \leqslant j \leqslant k,\ \forall\, \lambda^* \in \mathscr{P}, \\ &\sum_{i=1}^{k} \int_{\mathscr{D}} \lambda^* \left(a(\Phi_i, \Phi_j) + \sum_{m=1}^{M} \bar{\varphi}_m^M(\underline{\mu}) \left(\int_\Omega \Phi_i\ q_m(\underline{x})\ \Phi_j\ \mathrm{d}x \right) \right) \delta\lambda_i\ \mathrm{d}\mu = -\int_{\mathscr{D}} \lambda^*\ \mathscr{R}(u^{(n)}, \Phi_j; \underline{\mu})\ \mathrm{d}\mu \end{aligned} \tag{2.34}$$

Dès que les M fonctions $\{q_m(\underline{x})\}_{1 \leqslant m \leqslant M}$ sont déterminées et que la base réduite $\mathscr{W}_k = \{\Phi_i\}_{i=1 \leqslant i \leqslant k}$ est fixée, les termes $a(\Phi_i, \Phi_j)$ et $\int_\Omega\ \Phi_i\ q_m(\underline{x})\ \Phi_j\ \mathrm{d}x$ qui sont indépendants du paramètre peuvent être précalculés. A chaque itération, la complexité numérique de la projection Galerkine et celle de la détermination des fonctions coefficients $\{\varphi_m^M(\underline{\mu})\}_{1 \leqslant m \leqslant M}$ sont respectivement en $\mathscr{O}(k^2 M)$ et $\mathscr{O}(M^2)$. Comme $M, k \ll N$, la complexité du calcul *online* est indépendante de la dimension N du problème de départ.

L'EIM pourrait donc être utilisée pour le **Problème 11**, cependant le fait que la base réduite $\mathscr{W}_k = \{\Phi_i\}_{i=1 \leqslant i \leqslant k}$ évolue au cours du calcul dans une approche PGD rend cette approche moins pertinente. En effet, pour un nombre M fixé de points magiques, l'erreur sur les fonctions coefficients $\{\varphi_m^M(\underline{\mu})\}_{1 \leqslant m \leqslant M}$, utilisées pour interpoler les termes non-linéaires, domine quand la taille k de la base réduite augmente. Ajouter des points magiques peut alors s'avérer nécessaire. Cependant, la

détermination des points magiques en paramètre $\{\underline{\mu}_m^M\}_{1\leqslant m\leqslant M}$ peut être particulièrement coûteuse [Grepl *et al.*, 2007].

La RPM propose une approche plus pragmatique. Elle ne s'appuie pas sur une approximation de la fonction non-linéaire g (c.a.d. l'opérateur tangent $\mathbf{H}^-$, voir (2.33)). Elle consiste en fait à approcher le calcul des intégrales impliquées dans la projection Galerkine sur la base réduite. Il s'agit de calculer à moindre coût chaque contribution au modèle réduit, c.a.d. chaque terme/entrée α_{ij} :

$$\alpha_{ij} = \int_{\mathscr{D}\times\Omega} \lambda^*(\underline{\mu})\,\Phi_i(\underline{x})\,\mathbf{H}^-(u^{(n)};\underline{x},\underline{\mu})\,\Phi_j(\underline{x})\,\delta\lambda_i(\underline{\mu})\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu, \quad 1\leqslant i,j\leqslant k \tag{2.35}$$

sans sommation sur les indices répétés. Cette technique RPM est utilisée à chaque itération de la méthode LATIN pour la résolution de l'étape préliminaire du **Problème 11**. Il est important de noter que **même si le calcul approché des intégrales n'est pas suffisamment précis, de nouveaux termes PGD seront automatiquement ajoutés pour « corriger/compenser » ces erreurs d'intégration tout au long des itérations LATIN jusqu'à convergence**.
Plus précisément, la RPM s'appuie sur : (i) une approximation sous forme réduite basée sur la notion de points de référence pour simplifier l'évaluation des intégrandes, (ii) sur une technique permettant de reconstruire à faible coût à partir de formules explicites, une approximation de rang faible par patch sous forme séparée des intégrandes de (2.35) sans avoir recours à une technique basée sur la SVD. En introduisant l'espace d'approximation $\mathscr{P}_h\in\mathscr{P}$ dans α_{ij} on obtient :

$$\alpha_{ij} \approx \int_{\mathscr{D}\times\Omega} \left(\sum_{r=1}^{p} \lambda^{*r}\xi_r(\underline{\mu})\right) \Phi_i(\underline{x})\,\mathbf{H}^-(u^{(n)};\underline{x},\underline{\mu})\,\Phi_j(\underline{x}) \left(\sum_{s=1}^{p} \delta\lambda_i^s\xi_s(\underline{\mu})\right) \mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu \tag{2.36}$$

$$\approx \sum_{r=1}^{p}\sum_{s=1}^{p} \lambda^{*r} \left(\int_{\mathscr{D}\times\Omega} \underbrace{\xi_r(\underline{\mu})\,\Phi_i(\underline{x})\,\mathbf{H}^-(u^{(n)};\underline{x},\underline{\mu})\,\Phi_j(\underline{x})\,\xi_s(\underline{\mu})}_{\text{Intégrande } \omega_{rsij}(\underline{\mu},\underline{x})} \mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu \right) \delta\lambda_i^s \tag{2.37}$$

sans sommation sur les indices répétés.
L'espace des paramètres $\mathscr{D}$ est divisé en m_μ sous-domaines $\mathscr{D}_i$ dont les centres $\underline{\mu}_i$ sont appelés paramètres de référence. De même, le domaine spatial Ω est décomposé en m_x sous-domaines Ω_j dont les centres $\underline{x}_j$ définissent m_x points de référence (en espace). Points et paramètres de références $\underline{x}_j$ et $\underline{\mu}_i$ peuvent être choisis arbitrairement, par exemple selon un partitionnement régulier du domaine $\mathscr{D}\times\Omega$. La partie $\mathscr{D}_i\times\Omega_j$ du domaine $\mathscr{D}\times\Omega$ définit un patch (i,j).

La première étape de la RPM, consiste à définir des composantes généralisées $\bar{\omega} := \{(\bar{\omega}^\mu_{ab}, \bar{\omega}^x_{ab})\}$ (version « compressée ») de l'intégrande ω de (2.37) (où les indices $r\,s\,i\,j$ ont été supprimés pour alléger les notations) telles que pour $1\leqslant a\leqslant m_\mu$ et $1\leqslant b\leqslant m_x$:

$$\bar{\omega} := \left\{ \begin{array}{lcccc|lcccc} \bar{\omega}^\mu_{ab}(\underline{\mu}) & = & \omega(\underline{\mu},\underline{x}_b) & \text{si } \underline{\mu}\in\mathscr{D}_a & & \bar{\omega}^x_{ab}(\underline{x}) & = & \omega(\underline{\mu}_a,\underline{x}) & \text{si } \underline{x}\in\Omega_b \\ \bar{\omega}^\mu_{ab}(\underline{\mu}) & = & 0 & \text{sinon} & & \bar{\omega}^x_{ab}(\underline{x}) & = & 0 & \text{sinon} \end{array} \right\} \tag{2.38}$$

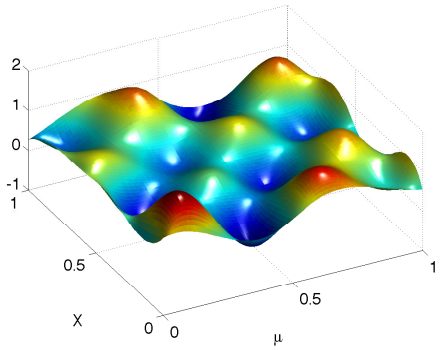
La **Figure 2.14** illustre les notions de composantes généralisées et de patchs pour une fonction scalaire à deux variables. On notera que certaines opérations algébriques élémentaires deviennent alors triviales sous la forme des grandeurs généralisées (voir **Tableau 2.2**).

La deuxième étape consiste à reconstruire à partir des composantes généralisées une approximation $\bar{\bar{\omega}}$ **de rang faible par patch sous forme séparée de l'intégrande** ω pour $1\leqslant a\leqslant m_\mu$ et $1\leqslant b\leqslant m_x$:

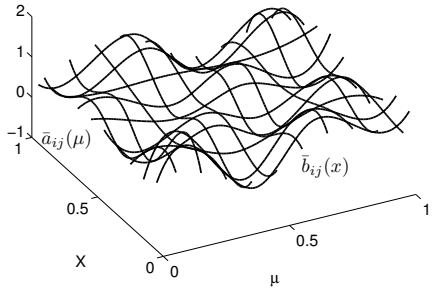
$$\forall(\underline{\mu},\underline{x})\in\mathscr{D}_a\times\Omega_b, \quad \omega(\underline{\mu},\underline{x}) \approx \bar{\bar{\omega}}(\underline{\mu},\underline{x}) = \bar{\bar{\omega}}^\mu_{ab}(\underline{\mu})\,\bar{\bar{\omega}}^x_{ab}(\underline{x}) \tag{2.39}$$

Addition	$\overline{f + f'}$	$=$	$\bar{f} + \bar{f}'$
Multiplication	$\overline{f\, f'}$	$=$	$\bar{f}\, \bar{f}'$
Dérivation	$\overline{\partial f/\partial \mu}$	$=$	$\partial \bar{f}/\partial \mu$
Opérateur	$\overline{H\, f}$	$=$	$\bar{H}\, \bar{f}$

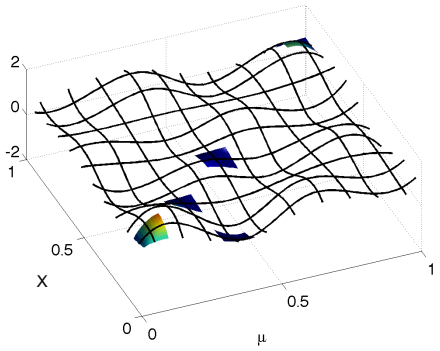
Tableau 2.2 – Opérations algébriques élémentaires sur les composantes généralisées



(a) Fonction $f(\mu, x)$



(b) Composantes généralisées $\bar{f}$ de $f(\mu, x)$



(c) Quelques patchs pour $f(\mu, x)$

Figure 2.14 – Composantes généralisées et quelques patchs pour une fonction f à deux variables ($m_\mu = 10$ et $m_x = 10$)

Ici, une approximation de rang 1 a été proposée mais on peut imaginer faire des approximations d'ordre supérieur. Les fonctions $\bar{\bar{\omega}}^{\mu}_{ab}(\underline{\mu})$ et $\bar{\bar{\omega}}^{x}_{ab}(\underline{x})$ sont définies par des formules explicites en fonction des composantes généralisées comme décrit dans le **PREPRINT 5**. Une reconstruction triviale consiste à les définir comme suit :

$$\bar{\bar{\omega}}^{\mu}_{ab}(\underline{\mu}) = \frac{\bar{\omega}^{\mu}_{ab}(\underline{\mu})}{\bar{\omega}^{\mu}_{ab}(\underline{\mu}_a)} = \frac{\bar{\omega}^{\mu}_{ab}(\underline{\mu})}{\bar{\omega}^{x}_{ab}(\underline{x}_b)} \qquad \text{et} \qquad \bar{\bar{\omega}}^{x}_{ab}(\underline{x}) = \bar{\omega}^{x}_{ab}(\underline{x}) \tag{2.40}$$

Ainsi, l'intégrande ω dans (2.37) peut être approchée sur chaque patch pour $1 \leqslant a \leqslant m_\mu$ et $1 \leqslant b \leqslant m_x$

comme suit : $\forall (\underline{\mu}, \underline{x}) \in \mathscr{D}_a \times \Omega_b$,

$$\omega(\underline{\mu}, \underline{x}) \approx \bar{\omega}^{\mu}_{ab}(\underline{\mu})\, \bar{\omega}^{x}_{ab}(\underline{x}) \tag{2.41}$$

$$\approx \frac{1}{\mathbf{H}^-(u^{(n)}; \underline{x}_b, \underline{\mu}_a)} \left(\xi_r(\underline{\mu})\, \mathbf{H}^-(u^{(n)}; \underline{x}_b, \underline{\mu})\, \xi_s(\underline{\mu})\right) \left(\Phi_i(\underline{x})\, \mathbf{H}^-(u^{(n)}; \underline{x}, \underline{\mu}_a)\, \Phi_j(\underline{x})\right) \tag{2.42}$$

Sous cette forme séparée, le calcul de l'intégrale de ω peut ainsi se faire par séparation de variables sur chaque patch (a, b) :

$$\int_{\mathscr{D}_a \times \Omega_b} \omega \, dx \, d\mu \approx \ldots$$
$$\ldots \frac{1}{\mathbf{H}^-(u^{(n)}; \underline{x}_b, \underline{\mu}_a)} \underbrace{\left(\int_{\mathscr{D}_a} \xi_r(\underline{\mu})\, \mathbf{H}^-(u^{(n)}; \underline{x}_b, \underline{\mu})\, \xi_s(\underline{\mu})\, d\mu\right)}_{= \left(\overline{\boldsymbol{M}}_a(\underline{x}_b)\right)_{rs}} \underbrace{\left(\int_{\Omega_b} \Phi_i(\underline{x})\, \mathbf{H}^-(u^{(n)}; \underline{x}, \underline{\mu}_a)\, \Phi_j(\underline{x})\, dx\right)}_{\approx [\Phi_i]_b^T \overline{\boldsymbol{K}}_b(\underline{\mu}_a)[\Phi_j]_b} \tag{2.43}$$

Ainsi, si la direction de recherche $\mathbf{H}^-$ n'est pas mise à jour ou si la base réduite n'évolue pas, il est donc possible de faire l'économie de certains calculs au cours des itérations de la méthode LATIN. Après introduction de l'espace d'approximation $\mathscr{V}_h \in \mathscr{V}$, on note $[\Phi_i]_b$ le vecteur nodal associé à la discrétisation du mode spatial Φ_i ($\Phi_i(\underline{x}) \approx \sum_{j=1}^{N} \Phi_i^j \varphi_j(\underline{x}) = \Phi_i^j \varphi_j$) restreinte au sous-domaine spatial Ω_b. De même, on définit la matrice $\overline{\boldsymbol{K}}_b(\underline{\mu}_a)$ dans (2.43) par assemblage des contributions des éléments finis spatiaux localisés dans le sous-domaine Ω_b et dont les termes sont définis par :

$$\left(\overline{\boldsymbol{K}}_b(\underline{\mu}_a)\right)_{ij} = \int_{\Omega_b} \varphi_i(\underline{x})\, \mathbf{H}^-\left(u^{(n)}; \underline{x}, \underline{\mu}_a\right) \varphi_j(\underline{x})\, \mathrm{d}x \tag{2.44}$$

La matrice $\overline{\boldsymbol{M}}_a(\underline{x}_b)$ est définie de façon similaire. On notera que les matrices $\overline{\boldsymbol{K}}_b(\underline{\mu}_a)$ (resp. $\overline{\boldsymbol{M}}_a(\underline{x}_b)$) ne sont évaluées qu'aux m_μ paramètres de référence $\underline{\mu}_a$ (resp. m_x points de référence $\underline{x}_b$). Le calcul approché de ces intégrales sous forme séparée permet donc de tirer parti de la structure tensorielle de l'approximation proposée du problème.

En pratique pour le **Problème 10**, le nombre de points de référence (en espace) m_x étant négligeable devant la taille N de l'espace de discrétisation spatiale, on a généralement $\frac{N}{m_x} \gg \frac{p}{m_\mu}$ avec p la taille de l'espace de discrétisation des paramètres. Dans ce cas, le gain sur la complexité de calcul est en $\mathscr{O}\left(\frac{p}{m_\mu}\right)$, soit un ordre de grandeur en pratique.

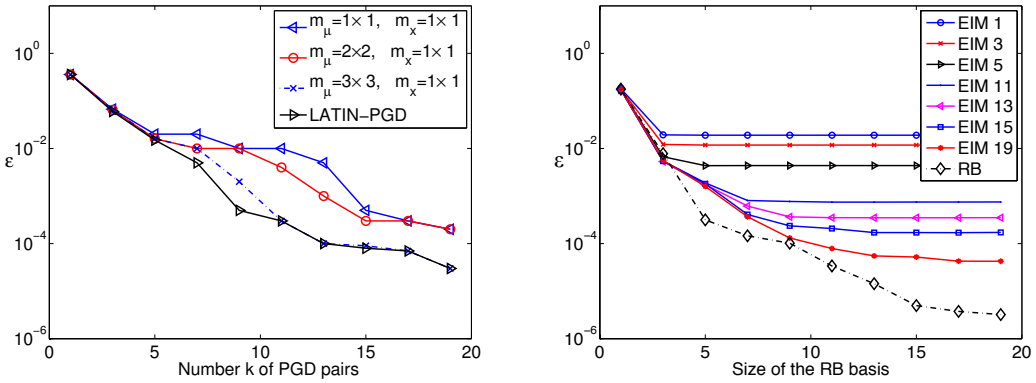
On définit l'erreur suivante :

$$\epsilon = 1/p \sum_{j=1}^{p} \frac{\| u_{ref}(\underline{x}, \underline{\mu}_j) - u_m(\underline{x}, \underline{\mu}_j) \|_{L^2}}{\| u_{ref}(\underline{x}, \underline{\mu}_j) \|_{L^2}} \tag{2.45}$$

où u_m fait référence à la solution obtenue par la méthode de réduction de modèle considérée. Les méthodes LATIN-PGD et LATIN-PGD-RPM utilisent ici un solveur non-linéaire LATIN. Les méthodes de base réduite basées sur une étape d'apprentissage *offline*, RB et RB-EIM, utilisent un solveur non-linéaire de type Newton-Raphson. Les méthodes LATIN-PGD et RB, sans techniques d'hyper-réduction RPM ou EIM, sont utilisées pour référence.

Les niveaux d'erreur ϵ obtenus pour les différentes techniques employées pour résoudre le **Problème 10** sont globalement comparables dés lors que la taille de la base réduite (ou le nombre k de

termes de la PGD) augmente (**Figure 2.15**). L'ajout de points/paramètres de référence (en particulier l'ajout de paramètre de référence) fait tendre la courbe de convergence vers celle de la LATIN-PGD qui n'utilise pas la technique d'approximation RPM. Cependant, pour un nombre M de points magiques



(a) Erreur ϵ pour la LATIN-PGD-RPM avec $m_x = 1\times 1$ et $m_\mu = \{1\times 1, 2\times 2, 3\times 3\}$

(b) Erreur ϵ pour la RB-EIM et différents nombres M de points magiques of magic points (de 1 à 19

Figure 2.15 – Erreur ϵ définie par (2.45) en fonction de la taille k de la base réduite $\mathcal{W}_k$ pour la LATIN-PGD-RPM et la RB-EIM avec différents nombres de points de référence/ points magiques pour le **Problème 10**

fixés, la courbe de convergence de la méthode RB-EIM présente un plateau lorsque la taille k de la base réduite devient supérieure à M (voir **Figure 2.15(b)**). En effet, comme signalé précédemment, à nombre M de points magiques fixé, l'erreur sur les fonctions coefficients $\{\varphi_m^M(\underline{\mu})\}_{1\leqslant m\leqslant M}$ utilisées pour interpoler les termes non-linéaires (voir (2.32)) finit par dominer lorsque la dimension k de la base réduite $\mathcal{W}_k$ augmente. Augmenter le nombre M de points magiques (et la taille de la base réduite) devient alors nécessaire afin de faire décroitre davantage le niveau d'erreur. Cependant, cette opération est très coûteuse. Dans le cas de la LATIN-PGD-RPM, la base réduite $\mathcal{W}_k$ est enrichie tout au long des itérations et l'erreur décroît de façon monotone pour un nombre suffisant de points/paramètres de référence. Il est intéressant de noter que même pour un nombre modeste de points/paramètres de référence, la méthode converge.

Concernant les temps de calcul, pour un calcul non-linéaire donné, les coûts de calcul cumulés de l'étape d'apprentissage *offline* et de l'étape *online* pour la méthode RD-EIM sont comparables à celui de l'approche LATIN-PGD-RPM.

➜ Bilan et perspectives

Afin de réduire les coûts de calculs lié à la construction du modèle réduit (projection sur la base réduite) dans le cadre de la réduction de modèle non-linéaire, la *Reference Point Method* (RPM) a été proposée. Elle permet d'approcher le calcul des intégrales impliquées dans le calcul des résidus et jacobiens lors de la construction du modèle réduit. A partir d'un volume d'information réduit défini en quelques points de références du domaine d'intégration, la RPM permet de construire à moindre coût une représentation de rang faible à variables séparées des opérateurs sur tout le domaine sans avoir recours à une SVD afin de pouvoir réaliser les calculs d'intégrales par séparation de variables

(représentation tensorielle des quantités). **Il ne s'agit donc pas d'une technique d'interpolation** des termes non-linéaires comme la méthode EIM mais plutôt d'approximation des intégrales.

Particulièrement adaptée pour les approches PGD dans laquelle la base réduite évolue au cours du calcul, les éventuelles erreurs d'approximation sont automatiquement compensées/corrigées par des termes PGD additionnels tout au long du processus jusqu'à convergence. Les gains obtenus en termes de coût de calcul permettent de gagner en pratique au moins un ordre de grandeur.

Concernant les perspectives, l'**extension à des cas d'application plus complexes avec un grand nombre de variables** doit être investigué. Cette situation soulève bien entendu de nombreuses questions qui dépassent les motivations de la RPM comme le choix du format de représentation des tenseurs en grande dimension (format de Tucker, format hiérarchique de Tucker, format en train de tenseurs...[Hackbusch, 2012, Falcó *et al.*, 2018]), le choix de la technique de résolution (voir p. ex. [Bonithon et Nouy, 2012, Giraldi et Nouy, 2019])... Cependant, la technique RPM mériterait d'être testée de façon empirique dans ce type de cas et devrait permettre d'atteindre des gains encore plus importants même si ceux-ci risquent d'être dépendants de la régularité de la classe de problème étudiée.

Le **choix des points de référence** nécessiterait d'être examiné. Il pourrait être basé sur un processus de sélection adaptatif à partir d'un indicateur d'erreur à définir. A ce propos, la méthode LATIN qui propose des approximations successives sur tout le domaine d'étude propose un cadre intéressant pour guider ce choix.

Enfin, le niveau de développement et d'intrusivité de ce type de méthode de réduction de modèle étant conséquent (en particulier du fait que les quantités manipulées sont représentées dans un format non standard), le développement de solutions adaptées et robustes pour leur **implémentation dans un code de calcul commercial** reste toujours une question d'actualité.

5 Orientations futures

Robustesse (convergence) et efficacité (temps de calul) sont bien les qualités attendues des méthodes HPC en non-linéaire afin de pouvoir s'établir dans le milieu industriel. Là encore, convaincre avec des méthodes robustes mises en œuvre sur des applications qui parlent à l'ingénieur est primordial. Il reste cependant encore de nombreux challenges.

Un premier axe possible de travail porte sur le traitement des problèmes en non-linéaires géométriques en exploitant la DDM et la réduction de modèle. Nombre de modèles rencontrés dans le domaine aéronautique, automobile ou naval sont des modèles s'appuyant sur des modèles plaques, coques, poutres (ou hybrides) susceptibles de subir de grands déplacements et de présenter des instabilités géométrique et/ou matérielle.
Dans ce chapitre, le traitement de phénomènes non-linéaires géométriques, à effet plus ou moins localisés, a été abordé à travers les méthodes de décomposition de domaine basée sur les méthodes de Schur. Plusieurs pistes d'améliorations qui pourraient être explorées ont été proposées afin de **définir un problème réduit/grossier d'interface optimal en non-linéaire et dont la mise à jour puisse se faire à moindre coût**. Ce point fait actuellement l'objet de discussions pour une collaboration avec J. Hinojosa de l'Université de Talca au Chili.

Concernant la DDM basée sur la méthode LATIN également présentée dans ce chapitre, il semblerait intéressant de revisiter les travaux débutés il y a plus de 20 ans [Boucard, 1996, Ladevèze, 1999, Michel-Ponnelle, 2001], sans méthode de décomposition de domaine, pour traiter les problèmes en grands déplacements et/ou grandes déformations à l'aune des derniers développements réalisés en réduction de modèle notamment par la PGD. En rupture avec les approches incrémentales classiques, cette approche globale en temps offre un cadre de travail intéressant pour mettre en place le pilotage de l'algorithme afin de passer des points d'instabilités géométrique ou matérielle (voir p. ex. [Boucard, 1996, Vandoren *et al.*, 2013]). Combinée à une décomposition du domaine spatial qui respecte la technologie des composants, on devrait pouvoir **proposer des solutions de pilotage locale et globale originales**. La simulation en non-linéaire géométrique reste un domaine difficile en ingénierie et beaucoup moins exploré que le calcul linéaire. Cela explique peut-être en partie pourquoi les perspectives et besoins de développement et de financement dans ce domaine ne sont pas clairement définis actuellement. Néanmoins, proposer des stratégies de calcul alternatives permettant de gagner en robustesse en non-linéaire géométrique peut constituer un domaine de recherche attractif en particulier si elles sont développées dans l'esprit de respecter un environnement logiciel de développement.

Un deuxième axe de recherche concerne le traitement des problèmes présentant de nombreuses interfaces de contact frottant. Là encore, DDM et réduction de modèle peuvent apporter des solutions intéressantes pour traiter ces problèmes de mécanique non régulière. **La réduction de modèle pour les problèmes présentant des interfaces mobiles** (propagation de fissure, front de propagation d'onde ou d'endommagement, interface de contact frottant...) **reste encore une question très ouverte.**

De façon générale, **les techniques actuelles de ROM ne permettent pas véritablement de capturer efficacement les phénomènes de contact frottant**. Le contenu multiéchelle des quantités d'interface de contact (présence de glissements macroscopiques et microscopiques) ainsi que les évolutions du front délimitant les zones d'adhérence et de glissement difficiles à capturer suivant les algorithmes de contact utilisés, expliquent en partie cette difficulté. Certaines applications comme la fatigue de contact nécessite pourtant de calculer précisément ces quantités de contact et en un temps de calcul raisonnable. Pour certaines applications d'intérêt (p. ex. des milieux architecturés comme les câbles multi-fils ou les composites tissés), des gains peuvent être cependant attendus. Le cas de la prédiction de la tenue en fatigue d'un câble sera discuté dans le **Chapitre 3**.

Pour répondre à ce challenge, la **méthode de décomposition de domaine mixte basée sur la méthode LATIN propose une méthode très robuste** pour prendre en compte le contact frottant du fait de ses similitudes avec les méthodes de lagrangien augmenté. On trouve d'ailleurs une application intéressante de la méthode LATIN avec la PGD dans [Giacoma *et al.*, 2014, Giacoma *et al.*, 2015, Giacoma *et al.*, 2016]. Une des difficultés abordées dans ces travaux est la construction d'une base réduite par une PGD progressive qui soit optimale. La difficulté à capturer efficacement le statut de contact au cours du processus de calcul rend la nécessité de **mettre en place une méthode de tri et de « compaction » de la base réduite** sous peine d'avoir une base réduite peu optimale. Ce point a fait l'objet du stage de Master 2 de A. Roche réalisés en 2020 dont les premiers résultats confortent l'intérêt de trier la base et tendent à indiquer, par conséquent, que les méthodes de réduction de modèle basées sur une phase d'apprentissage *offline* risqueraient d'être fortement prises en défaut *a priori*. Concernant l'amélioration du taux de convergence des algorithmes de lagrangien augmenté, on pourra également tirer parti des travaux de [Zavarise et Wriggers, 1999, Zavarise et De Lorenzis, 2012].

Par ailleurs, le contenu multiéchelle en espace des modes spatiaux obtenus est également mis en évidence. Aussi, **adjoindre une méthode de décomposition de domaine multiéchelle en espace qui res-**

pectent la physique du problème, notamment les composants (fils, fibres, torons) dans le cas de milieux architecturés, devrait permettre (i) de séparer efficacement les effets globaux dus aux interfaces de contact grâce à un problème grossier performant (ii) à capturer naturellement le contenu multiéchelle des phénomènes par la construction de base réduite locale par composant/sous-domaine.

3

Interfaces et assemblages

« L'ordre et la connexion des idées est le même que l'ordre et la connexion des choses. »

Baruch Spinoza

DANS CE DERNIER CHAPITRE, on s'intéresse à la modélisation des interfaces de liaison dans les assemblages. La modélisation des interfaces au sens large dans les assemblages est souvent un point sensible en ingénierie mécanique. Les interfaces entre pièces peuvent être surfaciques (interface parfaite, interface de contact-frottant...) mais également décrire des éléments de jonction très localisés (point ou cordon de soudure, liaison boulonnée, rivet...) ou des liaisons cinématiques. Nombre d'applications en ingénierie peuvent se contenter de modèles de comportement très simples dans les pièces (élastique linéaire, comportement de solide rigide). En revanche, la complexité réside souvent dans les interfaces sièges de phénomènes souvent non-linéaires (frottement, amortissement, plasticité...), plus ou moins localisés mais ayant souvent une forte influence sur le comportement global et la tenue des structures. Au cours du projet européen CELPACT (CELular structures for imPACT performance, AST5-CT- 2006-031038), coordonné par le DLR, l'introduction de défauts de rectitude des arêtes de pliage d'une âme de composite sandwich en papier Nomex a par exemple été cruciale pour représenter son comportement global en compression hors-plan [Baranger *et al.*, 2011b]. Les liaisons sont également souvent source importante d'incertitudes liées au procédé d'assemblage ou d'obtention. Leur comportement complexe et incertain conduit souvent les ingénieurs, à utiliser des modèles de liaisons très, voire trop, simples et s'appuyant essentiellement sur les éléments de connexion disponibles classiquement dans les codes commerciaux.

La modélisation des interfaces dans les assemblages et mécanismes est un vaste sujet que ce chapitre ne prétend pas décrire de façon exhaustive. Le mémoire présente seulement quelques contributions réalisées ces dernières années dans le domaine de la **modélisation d'interfaces localisées dans les assemblages**. Il a pour objectif de **fournir à l'ingénieur des outils et des démarches d'aide à la modélisation** s'intégrant facilement dans ses processus de dimensionnement et dans les codes éléments finis commerciaux couramment employés en calcul des structures.

1 Enjeux de la modélisation des éléments de connexion

La simulation à l'échelle d'une structure ou d'un assemblage met en jeu un nombre souvent important d'éléments de connexion. On trouve par exemple environ 3 000 000 d'attaches sur un avion A380, 50 000 sur un Rafale, 3 500 sur un moteur de la gamme des CFM56 ou encore entre 4 000 et 6 000 points de soudure électrique sur un véhicule automobile. Aussi, la modélisation des liaisons/interfaces mécaniques permettant de décrire les interactions plus ou moins localisées entre des composants ou pièces d'une structure ou d'un assemblage est au cœur du métier de l'ingénieur.

Si une modélisation à l'échelle fine de ces interfaces peut être raisonnable pour un calcul local autour de la liaison, cela n'est pas le cas pour un calcul à l'échelle de la structure complète qui nécessite souvent des modélisations simplifiées. L'utilisation de ces modèles fins de détails locaux, réputés être aussi fidèles que possible au « réel », ou d'observations phénoménologiques expérimentales sont cependant riches d'enseignement. **Pour ce faire, l'approche la plus intuitive est de s'appuyer sur ce que l'on appréhende souvent le mieux : les mouvements relatifs, la cinématique.** Le choix de la cinématique est d'ailleurs un ingrédient fondamental donnant lieu à différentes théories dans le domaine de la mécanique : mécanique des solides (mouvements de corps rigide) et modélisation des liaisons mécaniques, mécanique des milieux continus déformables (cinématique poutre, plaque ou coque, théorie du premier gradient, milieu micromorphe, milieu de Cosserat et second gradient), l'homogénéisation (théorie au premier gradient ou au second gradient)... Cependant, il n'est pas toujours facile d'appréhender correctement tous les couplages de phénomènes dans les cas de chargements complexes et de phénomènes non-linéaires. Aussi, tout outil numérique permettant d'assister le modélisateur dans son travail est le bienvenu.

Dans les deux dernières décennies, **plusieurs outils remarquables issus de la recherche académique se diffusent de plus en plus largement dans le monde industriel et permettent de bâtir de nouvelles méthodologies de modélisation**. **La corrélation d'image** a ouvert la porte à la mise en place de méthodes d'analyse permettant de « filtrer » l'information pertinente issue de données expérimentales, plus ou moins massives, pour l'étude de liaison boulonnée [De Crevoisier *et al.*, 2012], l'extraction de conditions limites [Shakoor *et al.*, 2017], l'étude du phénomène d'indentation [Bouterf *et al.*, 2014], la compréhension du comportement des liaisons dans une structure pantographe [Hild *et al.*, 2020]. Ce « filtrage » de l'information expérimentale peut se faire à partir d'hypothèses faites *a priori* sur la « régularité » de la cinématique. Des outils de fouille de données peuvent également être utilisés pour aider à extraire et à identifier des séquences d'évènements remarquables en particulier dans le cas de données massives issues par exemple d'une tomographie d'un matériau à microstructure complexe.

Dans les situations où le choix d'une cinématique pertinente n'est pas évident, les **outils de réduction de modèle** peuvent être employés avantageusement pour exhiber des comportements/modes cinématiques remarquables. L'analyse d'une plaque composite stratifiée proposée dans [Bognet *et al.*, 2012] permet par exemple de retrouver des modes de cinématique plaque et des modes de « coin » plus complexes à identifier de manière intuitive. La motivation principale des méthodes de réduction de modèle étant généralement celle du calcul haute performance, il convient cependant de ne pas confondre la notion de modèle réduit dans un objectif de réduire la complexité numérique d'un modèle « fin » de référence et la notion de modèle simplifié se basant sur des hypothèses faites *a priori* qui peuvent éventuellement émerger de l'exploitation de bases réduites [Guidault, 2017]. Dans tous les cas, **injecter de la connaissance métier, à fort contenu mécanique,**

dans la démarche de modélisation en complément de ces outils permet généralement de bâtir des modèles robustes et efficaces.

➜ Points de blocage

La modélisation des liaisons nécessite un ***niveau d'expertise conséquent*** *qu'il est parfois difficile de transférer au sein d'une entreprise tant le* turnover *est important. Aussi, proposer des* ***modèles de connexion simplifiés et robustes à fort contenu mécanique****, afin d'en appréhender plus facilement le comportement, est primordial. Par ailleurs, ces modèles doivent pouvoir* ***s'intégrer et s'utiliser facilement dans les codes de calcul éléments finis commerciaux*** *couramment employés dans le milieu industriel. Enfin, tout modèle doit être accompagné d'une* ***méthodologie d'identification*** *que l'utilisateur doit pouvoir mettre en œuvre facilement afin d'adapter le modèle à sa situation voire à l'améliorer ou à le faire évoluer autant que possible.*

Les travaux présentés dans ce chapitre proposent des modèles simplifiés de liaisons localisées dans les situations suivantes :

— **Modéliser la réponse globale de la liaison à l'échelle de la structure :** seules des quantités d'intérêt globales sont requises et l'on ne cherche pas nécessairement à reconstruire finement la solution locale (voir le modèle simplifié de liaison boulonnée en **Section 2** et la modélisation d'interactions de contacts localisés en **Section 4**).

— **Modéliser la réponse globale de la liaison et reconstruire à moindre coût la solution locale dans la liaison** dans l'objectif d'appliquer un critère de dimensionnement local (voir l'application à la modélisation de point de soudure électrique en **Section 3**)

Afin de pouvoir s'intégrer au mieux dans un contexte industriel, les modèles proposés s'appuient sur des fonctionnalités et outils de modélisation classiquement disponibles dans les codes de calcul.

➜ Revue (non exhaustive) des outils de modélisation disponibles dans les codes

Les connecteurs : Ils permettent de définir des relations cinématiques ou des comportements matériaux relativement simples, disponibles dans une librairie (*Connector* dans Abaqus™ ou *Mechanism Library* dans Samcef™), entre les degrés de libertés en déplacement de translation et/ou de rotation de deux nœuds. Ils sont généralement accessibles directement à travers l'interface graphique utilisateur du logiciel pour en facilité l'instanciation.

On distingue généralement les degrés de liberté contraints et ceux en fonction desquels on pourra décrire un comportement « matériau » ou associer un pilotage externe en déplacement ou effort imposé (actionneur). Les relations cinématiques permettent de modéliser les liaisons mécaniques les plus courantes : liaison rigide, liaison articulation, liaison glissière, liaison sphérique, liaison cardan... Les comportements matériaux classiquement disponibles en librairie sont généralement des comportements unidimensionnels relatifs à un seul degrés de liberté mais des comportements permettant d'exprimer les couplages entre degrés de liberté sont souvent disponibles.

Le comportement est généralement donné sous forme de relations entre les efforts de réactions F_i et les déplacements relatifs correspondants Δu_j des deux nœuds du connecteur. En élasticité, on définit ainsi les coefficients de raideur K_{ij} suivant :

$$F_i = K_{ij} \Delta u_j$$

Des comportements non-linéaires classiques sont usuellement disponibles comme illustré en **Figure 3.1** dans le cas unidimensionnel. Il est également possible d'intégrer un état préchargé dans le comportement.

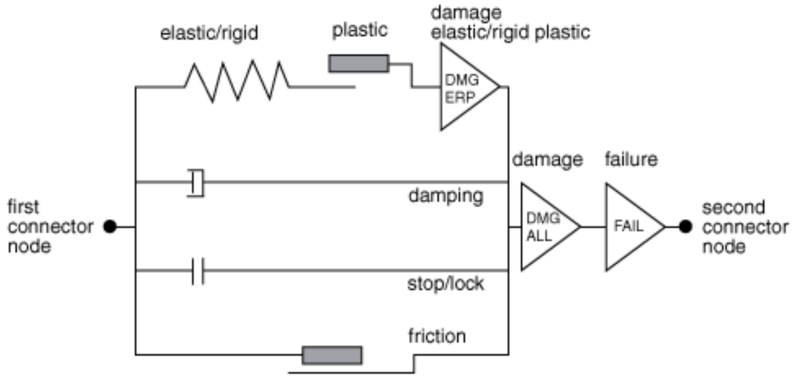


Figure 3.1 – Exemples de comportements unidimensionnels disponibles dans Abaqus™

La définition d'un comportement non-linéaire couplant les degrés de liberté reste cependant plus délicate à mettre en place et varie d'un logiciel à l'autre. Par ailleurs, la documentation associée pour en comprendre l'utilisation nécessite souvent un niveau d'expertise plutôt avancé. Aussi malgré une offre de choix de comportements souvent très variés, l'utilisateur plus chevronné préfère généralement définir lui-même son propre élément ou matériau utilisateur pour un maximum de souplesse et de portabilité. Par ailleurs, il pourra également créer des éléments s'appuyant sur un nombre arbitraire de nœuds.

Les éléments et matériaux utilisateur : Leur utilisation nécessite un niveau d'utilisation plus avancé ce que les documentations des logiciels ne manquent généralement pas de signaler tant les possibilités sont infinies et difficilement documentables de manière exhaustive. A ce titre, les éléments utilisateurs (*user elements*) ne sont bien souvent pas accessibles à partir de l'interface graphique utilisateur mais par une interface de programmation (fichier .inp dans Abaqus™ ou Bacon dans Samcef™). Leur implémentation dans les codes commerciaux les plus connus se fait généralement en langage Fortran mais d'autres langages comme le C peuvent être utilisés.
Un matériau utilisateur (*UMAT* dans Abaqus™/Standard ou *VUMAT* dans Abaqus™/Explicit) peut être utilisé avec la plupart des éléments finis disponibles dans le code. Leur définition nécessite généralement les étapes suivantes :

- Définition explicite de la contrainte (Cauchy généralement) ou du taux de contrainte ;
- Définitions des variables internes sous forme explicite ou en taux (suivant la formulation) et des dépendances éventuelles au temps, à la température ou à d'autres champs ;
- Choix d'un schéma d'intégration temporel (Euler explicite ou implicite, point milieu...) de la loi de comportement en taux ;
- Calcul du jacobien en implicite.

Des lois locales pour décrire la transmission de force de cisaillement entre deux surfaces de « contact » en deux nœuds en vis-à-vis peuvent également être définies ce qui donne la possibilité par exemple de définir des lois de frottement spécifiques pour les problèmes de contact frottant.
Les éléments utilisateurs (*UEL* dans Abaqus™/Standard ou *VUEL* dans Abaqus™/Explicit) peuvent s'appuyer sur un nombre arbitraire de nœuds où sont définies les variables nodales associées aux champs inconnus couramment disponibles dans les codes (déplacement, rotation, température...). A chaque incrément et chaque itération du solveur non-linéaire incrémental, la routine de l'élément utilisateur est appelée et définit basiquement :

- La contribution à la formulation faible du problème de l'élément : efforts intérieurs (avec mise à jour des variables internes) et efforts extérieurs de l'élément et contribution au résidu du

problème linéarisé ;
— La définition du jacobien (matrice tangente) de l'élément.

La définition des efforts intérieurs peut faire appel à un comportement matériau utilisateur (p. ex. *UMAT* dans Abaqus™/Standard) s'il existe. Leur développement nécessite un niveau d'expertise avancé mais offre un maximum de flexibilité tout en permettant l'écriture de fichiers de sortie de résultats très utiles pour le post-traitement et les étapes de déboggage.
Dans [Tiirats *et al.*, 2020] par exemple, un modèle surfacique de revêtement fin est implémenté sous la forme d'un *UEL* dans Abaqus™ afin de représenter finement la solution locale dans la couche mince du revêtement par un développement polynomial dans l'épaisseur.

Les outils basiques de connexion de « maillages » : Il existe de nombreux outils dans les codes commerciaux permettant de connecter des maillages y compris s'appuyant sur des cinématiques différentes (p. ex raccord d'un maillage coque/poutre et d'un maillage volumique). Comme discuté dans l'illustration de la **Section 4** du **Chapitre 1**, l'écriture directe de relations cinématiques entre deux groupes d'un ou plusieurs nœuds peut se faire par l'intermédiaire de *Multi-Point Constraints* (MPC). Dans ce cas les degrés le libertés concernés des nœuds esclaves, exprimés en fonction des nœuds maîtres, sont éliminés directement du sytème d'équations du problème. De nombreuses relations préétablies (affine, quadratique...) basées sur les MPC sont généralement disponibles.
Une situation rencontrée couramment dans la modélisation des éléments de jonctions localisées est celle de la connexion cinématique d'un des nœuds d'un élément poutre ou d'un connecteur à son environnement (**Figure 3.2**). Il est alors possible de forcer une contrainte cinématique de mouve-

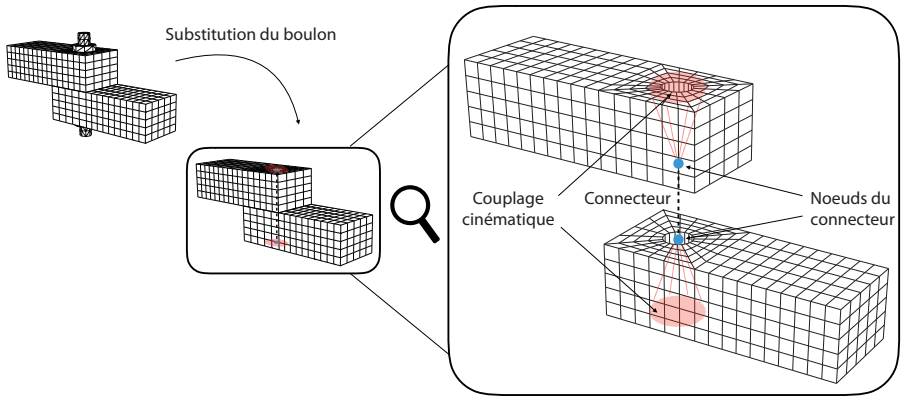


Figure 3.2 – Substitution d'un boulon par un connecteur et ses éléments de connexion cinématique à son envrionnement [Verwaerde *et al.*, 2020]

ment de corps rigide à tout ou partie des degrés de liberté des nœuds situés dans la zone de couplage (en rouge sur la **Figure 3.2**) et dont le mouvement (translation et /ou rotation) est piloté par celui du nœud de référence correspondant du connecteur (p. ex. *kinematic coupling* dans Abaqus™ ou *RBE* dans Samcef™).
Dans le cas où l'on souhaite un raccord plus « souple », des raccords cinématiques en « moyenne » existent (*distributing coupling* dans Abaqus™ ou *MEAN* dans Samcef™). Par exemple, dans le cas du *distributing coupling* de Abaqus™, l'utilisateur définit des fonctions de pondérations w_i en chacun des nœuds i de la zone de couplage Γ. Un cas pratique est celui d'une répartition régulière des N nœuds (maillage uniforme) dans la zone de couplage et un choix de fonctions de pondération uniformes. Dans ce cas, le barycentre G de la zone de couplage Γ est proche du centre géométrique de la

surface Γ et :

$$\underline{OG} = \frac{1}{\text{mes}(\Gamma)} \int_\Gamma \underline{OM}\, \mathrm{d}\Gamma \approx \sum_{i=1}^{N} \underline{OM}_i \frac{\text{mes}(\Gamma_i)}{\text{mes}(\Gamma)} \approx \sum_{i=1}^{N} \hat{w}^i\, \underline{OM}_i \quad \text{avec} \quad \hat{w}^i = \frac{w^i}{\sum_{i=1}^{N} w^i}$$

et où $\text{mes}(\Gamma_i)$ est une mesure de l'élément de surface (taille d'élément) associé au nœud i. On montre alors que le couplage cinématique obtenu définit une distribution d'effort affine $\underline{F}$ sur les nœuds couplés de résultante d'effort $\underline{F}_R$ et de moment M_R au point de référence R (éventuellement différent de G). Ainsi du point de vue continu, la distribution affine d'effort obtenue en tout point M de la surface couplée Γ est définie par :

$$\underline{F} = \frac{\underline{F}_R}{\text{mes}(\Gamma)} + (\boldsymbol{T}^{-1} \underline{\hat{M}}_R) \wedge \underline{GM} \tag{3.1}$$

où :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \underline{\hat{M}}_R & = & \underline{M}_R + \underline{GR} \wedge \underline{F}_R \\ \boldsymbol{T} & = & \displaystyle\int_\Gamma \left[(\underline{r} \cdot \underline{r}) \boldsymbol{I} - \underline{r} \otimes \underline{r} \right] \mathrm{d}\Gamma \approx \sum_{i=1}^{N} \left[(\underline{r}_i \cdot \underline{r}_i) \boldsymbol{I} - \underline{r}_i \otimes \underline{r}_i \right] \text{mes}(\Gamma_i) \quad \text{avec} \quad \underline{r} = \underline{GM} \end{array} \right.$$

Le déplacement $\underline{u}_R$ et la rotation $\underline{\Omega}_R$ du point de référence R sont quant à eux reliés « en moyenne » au déplacement $\underline{u}$ dans la zone de couplage Γ par :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \underline{u}_R & = & \displaystyle\frac{1}{\text{mes}(\Gamma)} \left(\int_\Gamma \underline{u}\, \mathrm{d}\Gamma \right) + \underline{\Omega} \wedge \underline{GR} \approx \sum_{i=1}^{N} \underline{u}_i \frac{\text{mes}(\Gamma_i)}{\text{mes}(\Gamma)} + \underline{\Omega} \wedge \underline{GR} \\ \underline{\Omega}_R & = & \boldsymbol{T}^{-1} \left(\displaystyle\int_\Gamma \underline{r} \wedge \underline{u}\, \mathrm{d}\Gamma \right) \approx \boldsymbol{T}^{-1} \left(\sum_{i=1}^{N} \underline{r}_i \wedge \underline{u}_i \text{mes}(\Gamma_i) \right) \end{array} \right. \tag{3.2}$$

Cette interprétation du *distributing coupling* de Abaqus™ dans un cas particulier permet à l'inverse de comprendre comment choisir les fonctions de pondération w_i en fonction de la taille des éléments dans la zone de couplage si l'on souhaite obtenir de façon approchée ce *raccord en torseur d'effort* (distribution affine d'effort).
Un raccord similaire est utilisé dans [Tannous *et al.*, 2014, Tannous *et al.*, 2015] pour le couplage d'un nœud poutre à un modèle volumique en dynamique dans Code_Aster™.

2 Modèle simplifié de liaison boulonnée

Les liaisons boulonnées sont des composants omniprésents dans les structures aéronautiques et parfois présents en très grand nombre. A titre d'exemple, un moteur d'avion CFM56 comporte environ 3 500 boulons. On estime qu'un gain de 3 g par boulon (correspondant à un gain en masse de 21 kg pour l'ensemble des deux moteurs d'un avion monocouloir) se traduirait par une économie de 83 000 litres de kérosène (soit 253 tonnes équivalent CO2 d'émission de gaz à effet de serre dont 247 tonnes d'émission de CO2) sur une exploitation annuelle d'un vol Paris-Toulouse (20 aller-retours par jour) [1].

Bien qu'*a priori* relativement bien maîtrisée, la méthode de serrage des liaisons boulonnées est source d'incertitudes et de difficultés tout au long du cycle de vie des produits aéronautiques, depuis

1. Selon l'éco-calculateur de la DGAC `http://eco-calculateur.aviation-civile.gouv.fr`

la phase de conception (processus long de validation de la tenue mécanique ou de la qualité des étanchéités) jusqu'à son exploitation (phénomènes de desserrage, d'usure voire de rupture...) en passant par l'assemblage (mise en place de procédures de serrage spécifiques, outillage coûteux, difficultés de la maîtrise des efforts de serrage...). Aussi, compte tenu de ces incertitudes, les concepteurs n'ont d'autres choix à l'heure actuelle que de prendre des facteurs de sécurité souvent importants pour éviter des problèmes qui peuvent survenir tout au long de la vie des assemblages.

Par ailleurs, pour des systèmes complexes ou innovants comme les structures composites, les méthodes de conception sont encore plus empiriques et la mise au point de modélisations ou d'essais technologiques allonge encore plus les délais de conception. Les bureaux d'études utilisent des modélisations 3D linéaires ou non linéaires pour simuler des assemblages, néanmoins ces modélisations sont coûteuses en termes de mise en données de modèles (CAO+maillage+conditions aux limites) et de temps de calcul (plusieurs dizaines d'heures de calcul). Le niveau de prédiction de ces modélisations est rarement disponible et les résultats de ces modèles sont souvent remis en cause faute de base d'essais représentatifs de la technologie utilisée.

➜ Points de blocage

Le dimensionnement des assemblages boulonnés nécessite l'utilisation de ***modèles simplifiés de liaison boulonnée*** *efficaces capables de prédire de façon satisfaisante leur réponse globale. En vue de leur optimisation, ces modèles doivent* ***s'appuyer sur des paramètres de conception pratiques*** *(précharge, coefficient de frottement, jeu diamétral...). Ils doivent également répondre au mieux aux pratiques industrielles en étant par exemple* ***facilement utilisables et exploitables dans les codes de calcul*** *couramment utilisés en bureaux d'études.*

➜ Revue (non exhaustive) des modèles simplifiés de liaisons boulonnées

Il existe de nombreux modèles simplifiés de liaisons boulonnées dans la littérature. Ils peuvent être analytiques ou numériques. Les modèles analytiques s'appuient souvent sur des hypothèses fortes limitant de ce fait leur domaine d'application à des cas bien spécifiques (domaine élastique, chargement simple, en quasi-statique ou dynamique...). **La plupart des modèles cherchent souvent à prédire uniquement la réponse élastique et la rigidité de l'assemblage.** On notera que de grandes disparités peuvent être rencontrées dans la pratique entre les résultats produits par les différents modèles. Il est difficile de classer tous ces modèles mais **on peut les distinguer par exemple selon la cinématique et leur capacité à prendre en compte des non-linéarités**.
Si on s'intéresse à ceux développés dans un code de calcul commercial (notamment Abaqus™), on pourra citer par exemple [Kim *et al.*, 2007] qui propose de modéliser le comportement d'un boulon en le substituant par un élément de poutre élastique relié aux zones d'appuis sur les plaques par des éléments rigides ou des éléments poutres. De façon similaire, [Gray et McCarthy, 2010] développe un connecteur s'appuyant sur un élément de poutre linéaire, représentant le boulon, dont les nœuds sont reliés à deux surfaces cylindriques rigides représentant les trous de passage de la vis. Le connecteur permet de lier des modèles plaques en interaction de contact frottant. Les travaux de [Askri *et al.*, 2016] modélisent chaque zone de contact potentiel (zones d'appui sous tête et sous écrou, fûts de perçage dans les plaques) par des surfaces rigides connectées rigidement à un modèle filaire articulé par des ressorts de translation et de rotation. Ces différentes approches conduisent cependant à **des connecteurs qui modélisent essentiellement le comportement élastique de la liaison et dont l'identification des paramètres n'est pas toujours évidente**. Par ailleurs, elles s'appuient parfois sur des outils de modélisation spécifiques au logiciel de calcul utilisé rendant difficile leur

portabilité dans un autre code.

Le **PREPRINT 6** de l'article [Verwaerde *et al.*, 2020] s'intéresse à l'**élaboration d'un modèle simplifié d'un assemblage boulonné et à sa méthodologie d'identification**. Ces travaux initiés au cours de la thèse de M.-F. Soulé De Lafont [Soulé De Lafont *et al.*, 2014, Guidault *et al.*, 2015] dirigée par P.-A. Boucard et financée par le projet FUI CARAB (Conception Avancée Robuste pour les Assemblages Boulonnés, coordonné par la SNECMA), sont revisités et poursuivis à travers celle de R. Verwaerde.

Le modèle simplifié se substitue à un boulon et a été implémenté sous forme d'un élément utilisateur dans le code Samcef™ puis dans le code Abaqus™ et permet de connecter des modèles volumiques ou plaques d'un assemblage (voir **Figure 3.2**). A ce sujet, on soulignera le fait que le travail consistant à dégrader/simplifier un modèle volumique en modèle plaque est une pratique peu courante en ingénierie car nécessitant trop d'étapes de manipulation de maillage et de temps ingénieur. La CAO du modèle étant faite, le temps de préparation de la géométrie des différentes pièces en vue de leur maillage (étape de pré-traitement, mise en donnée) est en effet bien plus important que le temps de simulation à proprement parler (voir **Figure 3.3**). Evidemment, dans le cas de l'optimisation ou d'appels répétés à la simulation d'un même modèle, le coût de simulation peut prendre le pas. **Aussi, la mise en place d'un modèle simplifié dans le modèle initial doit pouvoir se faire de façon aisée.**

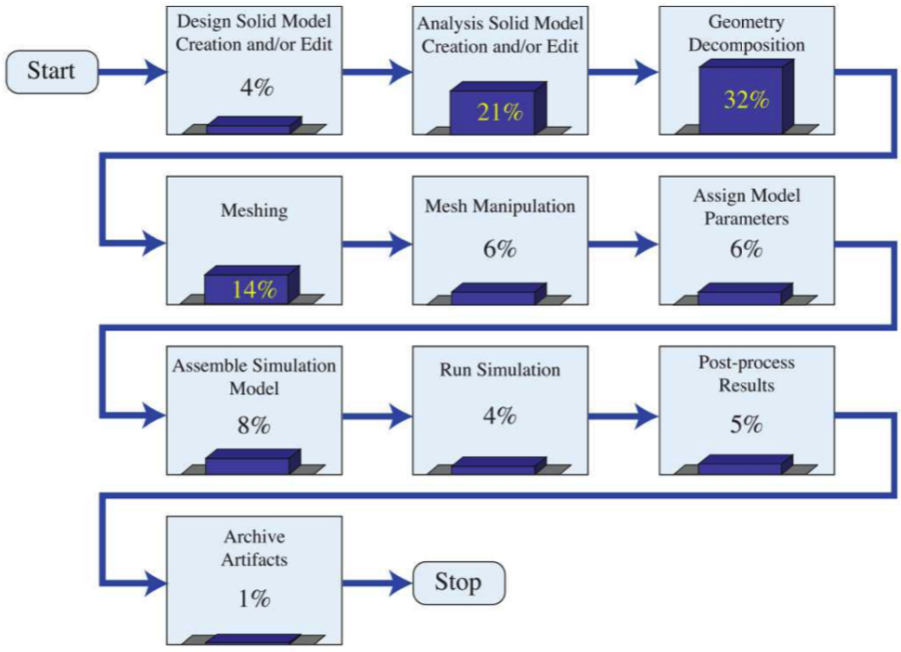
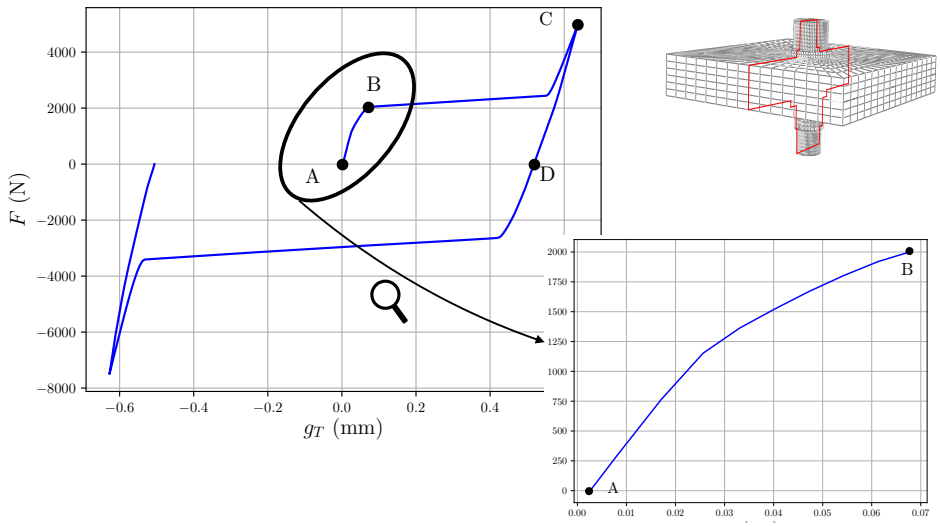


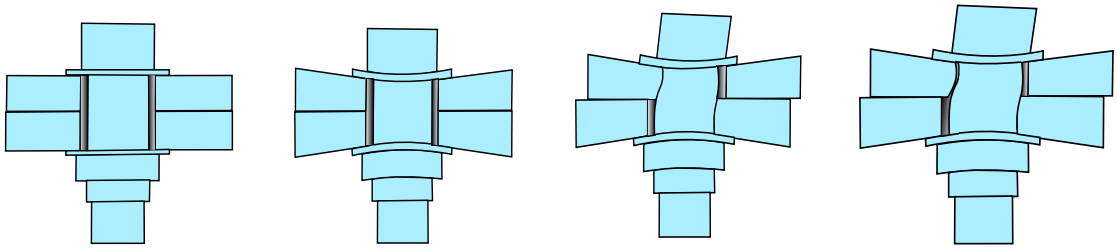
Figure 3.3 – Répartition moyenne en temps ingénieur associée à chaque étape du processus de développement d'un modèle de simulation [Boggs *et al.*, 2005, Cottrell *et al.*, 2009]

Le modèle simplifié proposé ne cherche pas à représenter de façon fine la solution au voisinage du boulon. Cependant, il doit être capable de prédire de façon satisfaisante des quantités d'intérêt globales comme : la rigidité globale du boulon, le décollement ou glissement des pièces assemblées (p. ex. pour des questions d'étanchéité), la plastification du boulon voire sa rupture. Les boulons sensibles ainsi détectés au sein d'un assemblage par ce modèle simplifié peuvent alors éventuellement faire *a posteriori* l'objet d'une étude locale avec un modèle plus fin.

L'approche adoptée pour la modélisation s'appuie au départ sur l'analyse phénoménologique du comportement d'un modèle volumique fin d'une liaison boulonnée élémentaire en configuration de simple recouvrement soumise à un chargement de cisaillement (**Figure 3.4**). Une liaison étant



(a) Evolution du saut de déplacement tangentiel $\boldsymbol{g}_T$ entre plaques en fonction de l'effort appliqué



(b) Configuration initiale avant précharge (A)

(c) Micro-glissements (B)

(d) Contact vis/alésage(C)

(e) Décharge (D)

Figure 3.4 – Comportement d'un assemblage boulonné en configuration de simple recouvrement soumis à un cycle de charge-décharge de cisaillement [Verwaerde *et al.*, 2020]

généralement dimensionnée de façon à éviter le « cisaillement » de la vis, provoqué par le glissement macroscopique survenant au-delà du point B et allant jusqu'au contact entre le corps de vis et l'alésage au point C, **seule la partie du comportement situé entre les points A et B (élasticité et micro-glissements) a été modélisée** (voir **Figure 3.4(a)**). On notera que la simulation de la phase de macro-glissement (voir **Figure 3.4(c)**) pose des difficultés numériques de convergence liées à la présence de modes rigides du boulon indéterminés qu'il convient de contrôler. Un calcul de dynamique peut permettre de résoudre ce problème classique en mécanique des assemblages dont le maintien en position des pièces se fait par adhérence. Dans un souci de robustesse, ce phénomène n'a pas été modélisé. Il reste cependant, dans le principe, possible d'alerter l'utilisateur lorsque le glissement devient trop important et excède le demi-jeu diamétral corps de vis/alésage. On précise que le saut de déplacement tangentiel $\boldsymbol{g}_T$ est obtenu en extrayant la moyenne des déplacements sur les zones d'appui sous tête de vis et sous écrou sur les plaques assemblées (zones rouges en **Figure 3.2**).

Un autre résultat bien connu est que la pression de contact entre plaques assemblées s'établit dans un voisinage proche du boulon, dans le cône de Rötscher, et de la même manière pour les efforts d'adhérence. Aussi, une hypothèse importante du modèle simplifié consiste à supposer que **tous les phénomènes de frottement sont pris en compte et encapsulés uniquement au niveau de l'élément utilisateur**. Cela permet ainsi d'utiliser des **conditions de contact sans frottement à l'interface entre plaques assemblées**. En limitant le nombre d'interactions de contact frottant, on **améliore la robustesse et l'efficacité** du modèle en réduisant de façon importante les difficultés de convergence survenant au cours des itérations de contact.

Le modèle simplifié, que nous appellerons connecteur dans la suite, respecte la technologie de l'assemblage. Aussi, **la cinématique retenue est celle d'une poutre de Timoshenko à comportement élasto-plastique, représentant le boulon, en parallèle d'un mécanisme de frottement affectant uniquement le comportement tangentiel/en cisaillement du connecteur**. Le comportement normal, dans l'axe du connecteur, prend en compte la raideur de la vis mais **permet également d'installer automatiquement la précharge**. Dans le PREPRINT 6, un comportement élastique est retenu pour l'élément poutre. L'intégration du comportement de poutre élasto-plastique est détaillée dans un article en cours d'écriture.

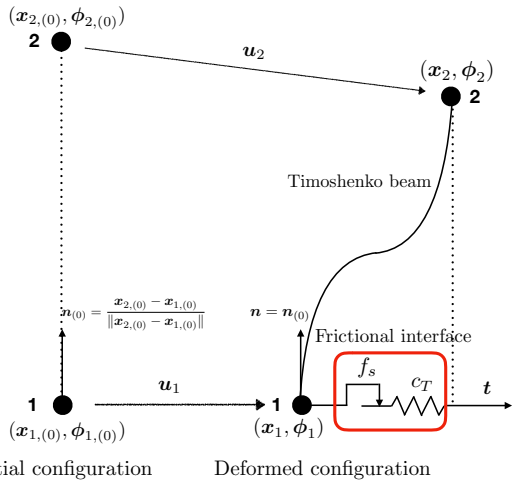


Figure 3.5 – Modèle du connecteur et sa cinématique - poutre de Timoshenko à comportement élasto-plastique en parallèle d'un mécanisme de frottement affectant uniquement le comportement tangentiel [Verwaerde *et al.*, 2020]

Les nœuds du connecteur sont reliés aux zones d'appui sous tête de vis et sous écrou (zones rouges en **Figure 3.2**) par des raccords cinématiques rigidifiant (*kinematic coupling* dans Abaqus™), la souplesse de ces zones étant déjà incluse dans la procédure d'identification des rigidités du connecteur comme décrit ci-après.

L'identification du comportement se fait à partir d'un modèle volumique détaillé de liaison générique à un boulon représentatif de la liaison étudiée en termes de géométrie et de comportement. Le modèle étant totalement paramétré et la procédure d'identification automatisée, l'utilisateur peut réaliser aisément la procédure d'identification chaque fois que nécessaire. Le fort sens physique donné aux paramètres du modèle permet cependant d'avoir des ordres de grandeur de leur valeur assez facilement. **Le choix adapté des conditions limites du problème générique** ainsi que l'influence de la discrétisation, de la précharge et des paramètres matériau et géométrique sur les

résultats de la procédure d'identification est une contribution importante du travail de thèse de R. Verwaerde [Verwaerde *et al.*, 2020]. De façon succincte, les paramètres du modèle simplifié sont les suivants :

— **La précharge** est donnée par l'utilisateur et automatiquement appliquée au premier pas de chargement du calcul ;
— **La limite d'élasticité** du boulon est aussi une donnée utilisateur ;
— **La rigidité élastique équivalente axiale (resp. de torsion) du boulon/poutre** est déterminée numériquement par une sollicitation de traction (resp. de torsion) sur le boulon à partir de conditions limites *ad hoc* sur le modèle volumique générique de façon à prendre en compte la souplesse de la tête de vis et de l'écrou ;
— Un test de cisaillement sur le modèle volumique générique (proche de celui illustré en **Figure 3.4** pour des cycles de charge-décharge d'amplitude croissante permet d'identifier :
  • **La rigidité élastique équivalente en flexion du boulon/poutre** dans la phase de glissement par mesure du glissement cumulé ;
  • **La rigidité élastique équivalente de cisaillement des plaques** (c_T en **Figure 3.5**) à partir de la réponse élastique ;
  • **Le coefficient de frottement équivalent** (μ en **Figure 3.5**) à partir du seuil de glissement et dont la valeur est proche du coefficient de frottement entre plaques assemblées.

On notera que la dépendance des valeurs identifiées à la précharge est également obtenue facilement par la procédure d'identification. Les valeurs identifiées sont donc valables pour une large gamme de valeur de précharge. Les courbes de réponse du modèle avec connecteur, issu de la procédure d'identification, et du modèle volumique générique (référence) pour une valeur de précharge donnée sont en bon accord (voir **Figure 3.6**). On constate que le comportement global obtenu correspond qualitativement à un comportement élasto-plastique avec écrouissage cinématique linéaire. Les travaux

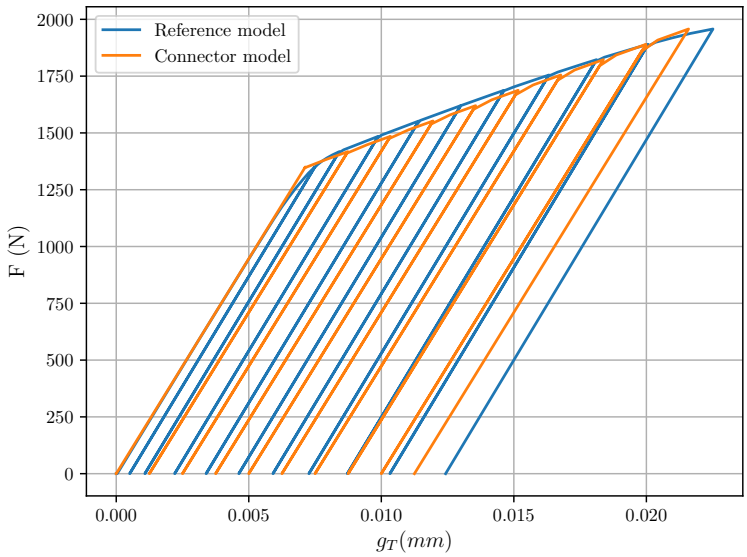


Figure 3.6 – Courbes de réponse de l'effort en fonction du saut de déplacement tangentiel entre plaques assemblées pour le modèle volumique de référence et le modèle avec connecteur

de thèse de M.-F. Soulé De Lafont propose un modèle de comportement de connecteur qui modélise directement ce comportement équivalent par une loi de frottement particulière s'appuyant sur une analogie avec un comportement élasto-plastique avec écrouissage isotrope linéaire. La contribution principale de la thèse de R. Verwaerde réside dans la proposition d'un modèle qui respecte

les composants et les phénomènes (ceux dus au boulon et ceux dus au frottement entre plaques, voir **Figure 3.5**), permettant ainsi un découplage des différents mécanismes et clarifiant ainsi l'interprétation du rôle des différents paramètres du modèle.

➜ Illustration : Assemblage à quatre boulons en configuration simple recouvrement

La **Figure 3.7** tirée du **PREPRINT 6** de l'article [Verwaerde *et al.*, 2020] montre les déformées obtenues pour le modèle avec connecteurs et le modèle volumique de référence pour un assemblage à quatre boulons, préchargés à 10 000 N, en configuration de simple recouvrement soumis à un cycle de charge-décharge de cisaillement. Les détails du modèle sont fournis dans le **PREPRINT 6**. Les

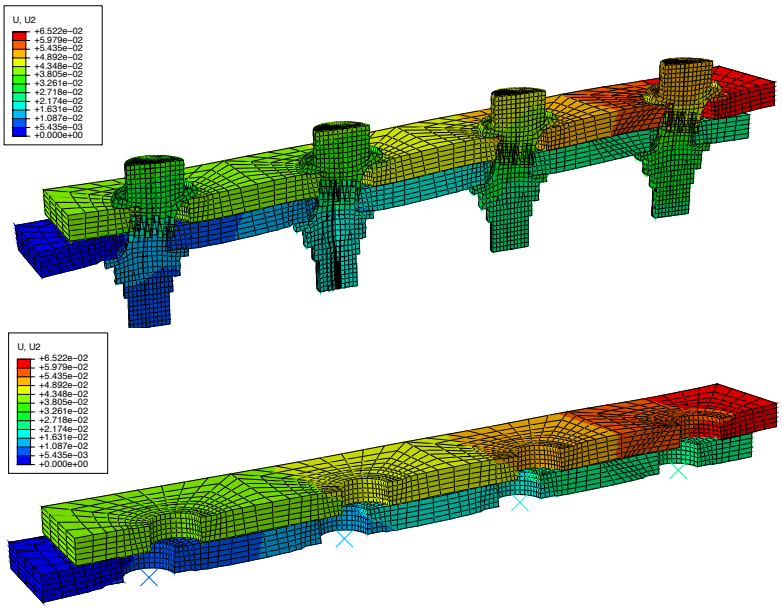


Figure 3.7 – Déformées de la configuration finale obtenues pour le modèle avec connecteurs et le modèle volumique de référence (déformées ×100)

évolutions en fonction de l'effort de cisaillement des sauts de déplacement $\boldsymbol{g}_T$ au niveau de chaque boulon sont en très bon accord avec le modèle volumique de référence (voir **Figure 3.8**). On notera les ruptures de pente dans le comportement pour le modèle avec connecteur induites par les glissements successifs au niveau de chaque boulon et les transferts de charge ainsi occasionnés. Cet effet « structure » est donc très bien capturé par le modèle simplifié proposé.

Le **Tableau 3.1** montre que l'on obtient un gain en temps de calcul significatif avec le modèle de connecteur par rapport au modèle volumique de référence. Ce gain est essentiellement dû au nombre plus réduit d'itérations du solveur non-linéaire dans la mesure où le modèle avec connecteurs met en jeu beaucoup moins d'interactions de contact frottant (contact sans frottement entre plaques assemblées, frottement uniquement au niveau des connecteurs). Le gain est en pratique d'autant plus important que les phénomènes de frottement surviennent au cours du calcul. Le nombre de degrés de liberté diminue également de façon sensible dû à la substitution des boulons par des connecteurs à deux nœuds. A ce propos, on notera que cette substitution est très aisée dans un code calcul et occasionne des gains appréciables en temps ingénieur concernant la mise en données du modèle avec connecteurs.

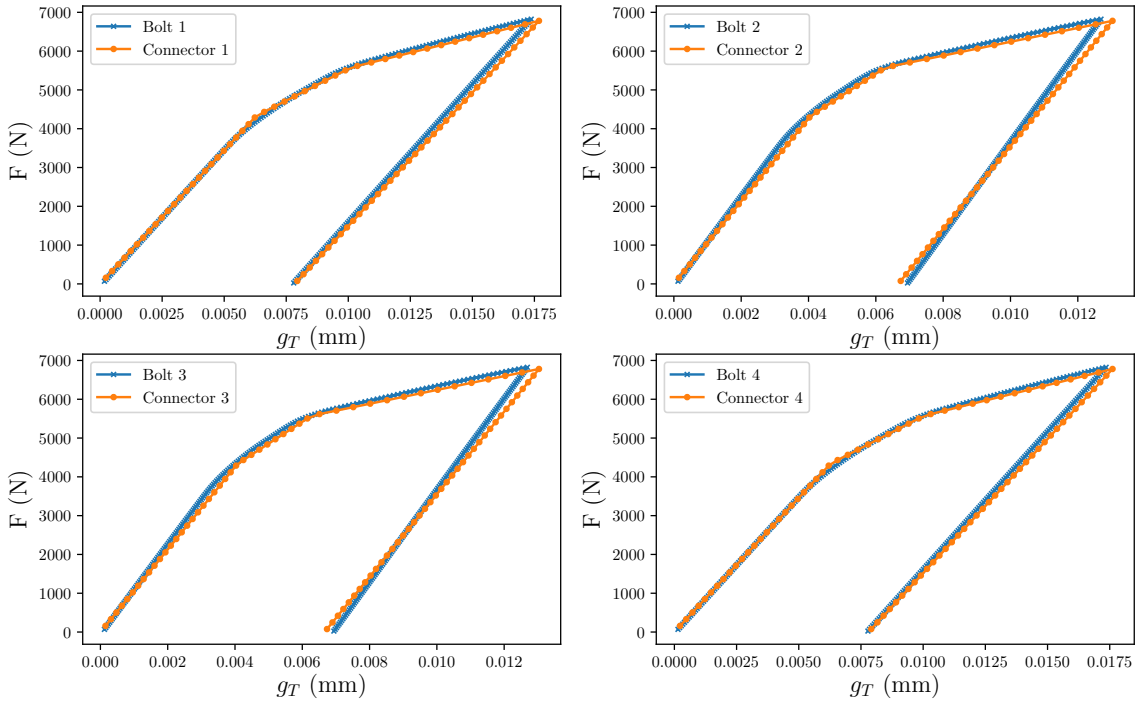


Figure 3.8 – Evolutions en fonction de l'effort de cisaillement des sauts de déplacement g_T au niveau de chaque boulon

	Modèle volumique de référence	Modèle avec connecteurs	Gain
Temps CPU (s)	14 067	1 670	×8
Nombre de d.d.l.	305 212	73 596	×4
Nombre d'itérations	495	249	×2

Tableau 3.1 – Comparaison en termes de temps CPU, de nombre de degrés de liberté (d.d.l.) et d'itérations du solveur non-linéaire pour la simulation de la **Figure 3.7**

➜ Bilan et perspectives

Le modèle simplifié de liaison boulonnée proposé permet de **prendre en compte automatiquement la précharge du boulon et encapsule les phénomènes de frottement** entre plaques assemblées et localisés au voisinage du boulon, permettant ainsi d'utiliser des interfaces de contact sans frottement dans le reste du modèle. Cela conduit à une **réduction importante du nombre d'itérations du solveur non-linéaire et donc de temps de calcul**, ce qui s'avère appréciable dans le cas de l'optimisation d'un assemblage boulonné. Par sa simplicité de mise en œuvre, il permet également un **gain de temps significatif dans la mise en données du problème**.
Le modèle simplifié de substitution du boulon a été implémenté sous forme d'un élément utilisateur dans le code Samcef™ puis dans Abaqus™. Cet élément utilisateur dans sa version initiale a par ailleurs fait l'objet d'une opération d'industrialisation avec Siemens. Celui-ci est **disponible sous la forme d'un connecteur, nommé BARC (Bolt Assembly Robust Connector), dans la version 19 de Samcef™** et dont les performances sont présentées dans [Paleczny *et al.*, 2019]. Un soin particulier a été apporté dans la documentation de ce connecteur pour discuter de son domaine d'application

ainsi que pour préciser la méthode d'identification de ses paramètres tout aussi importante que le modèle lui-même et indispensable pour l'ingénieur.

Plusieurs pistes d'amélioration visant à **enrichir le modèle** peuvent être envisagées. La prise en compte de la **plasticité dans la vis** fait l'objet de développements actuels de la thèse en cours de R. Verwaerde. Une autre amélioration consiste en la prise en compte du **contact entre le corps de vis et l'alésage** et de la reprise de rigidité qui l'accompagne (point *C* sur la **Figure 3.4(a)** et **Figure 3.4(d)**). Bien que cette situation extrême ne soit pas nécessairement désirée, un tel événement se doit d'être prédit par le modèle.
La méthodologie de modélisation proposée peut également être appliquée aux **assemblages de plusieurs plaques**. Ainsi, l'assemblage en configuration double recouvrement de trois plaques pourrait être traité par un élément poutre à trois nœuds.
Les études menées au cours de la thèse de R. Verwaerde montre que **le raccord cinématique entre les nœuds du connecteur et les plaques pourrait être amélioré** afin de mieux représenter la souplesse de la tête de vis et de l'écrou. Un raccord plus souple comme celui proposé par le *distributing coupling* dans Abaqus™ pourrait être investigué afin de choisir des fonctions de pondérations *ad hoc*, des fonctions uniformes (raccord en distribution affine d'effort, en torseur donné en (3.1)) procurant trop de souplesse. Une autre possibilité est d'exhiber des modes cinématiques par les outils de réduction de modèle pour des chargements types de la liaison boulonnée (comme proposé en **Section 3** pour l'étude des points de soudure électrique) de façon à construire ce raccord.
Enfin, un dernier point concerne la prise en compte des **grands déplacements et grandes rotations** de façon à répondre à un cadre plus large d'applications. Développé sous l'hypothèse des petites perturbations, l'élément utilisateur doit pouvoir s'intégrer dans une formulation en non-linéaire géométrique. Pour ce faire, les développements réalisés autour du contact localisé poutre-poutre en grandes rotations présentés en **Section 4** pourront être mis avantageusement à profit.

3 Modèle simplifié de point de soudure électrique

L'assemblage de structures en tôles par points de soudure électrique (PSE) (voir **Figure 3.9**) est obtenu par un procédé de mise en œuvre automatisé qui ne nécessite aucun apport de matière supplémentaire, n'alourdissant pas davantage la structure. Aussi, les PSE sont extrêmement utilisés en construction automobile notamment pour la conception de la caisse et de la carrosserie. On trouve par exemple entre 4000 à 6000 PSE par véhicule. La vérification de la tenue d'un PSE à la fatigue nécessite un maillage dont la taille de maille est beaucoup trop fine pour un calcul à l'échelle de la structure. Le diamètre d'un PSE (environ $6\,mm$) est en effet à comparer à la dimension d'un véhicule automobile. Là encore, le besoin de modèles simplifiés de PSE est une nécessité.

La simplicité apparente d'un PSE, en termes de géométrie tout du moins, conduit à proposer des modèles parfois très (voire trop) simple qui ne permettent pas de prédire de façon satisfaisante la durée de vie de certains PSE situés trop près de détails géométriques ou structuraux (bord de tôle, autre PSE, trou, cordon de soudure...) ou prenant mal en compte certaines sollicitations comme la torsion. Par ailleurs, l'identification des paramètres de ces modèles étant souvent dépendante de la taille des éléments des maillages des plaques soudées, leur identification ou leur calibration à partir de modèles de référence plus fins ou d'essais est à refaire à chaque changement de taille de maille. **Ce travail de modélisation et d'identification est d'autant plus difficile qu'un PSE est destiné à relier des structures minces de type tôles pour lesquels des modèles éléments finis plaques/coques sont**

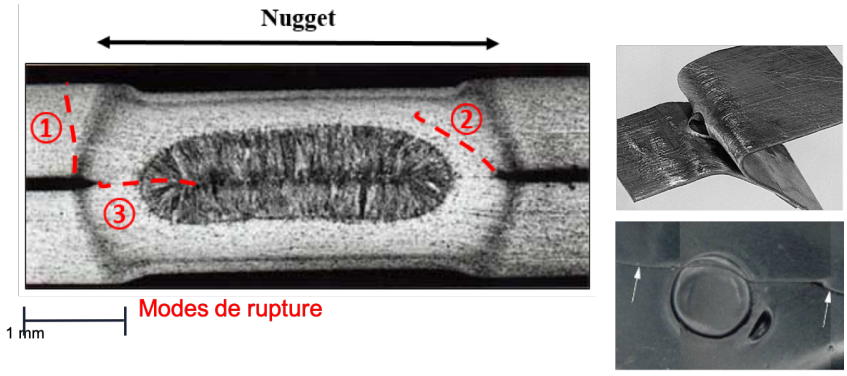


Figure 3.9 – Modes de rupture classiques d'un PSE

généralement utilisés. Définir un modèle simplifié s'insérant ou se connectant à ce type de modèle cinématique incapable de représenter des effets 3D localisés dans le voisinage du PSE est une véritable difficulté. Il en résulte une grande diversité de modèles simplifiés de PSE selon le cadre d'application (quasi-statique, dynamique, fatigue) ce qui complique significativement les procédures de calcul dans les bureaux d'étude.

➜ Points de blocage

> *Le dimensionnement des structures soudées nécessite un* ***modèle simplifié de PSE pour la connexion de modèles plaque*** *dont le domaine d'application est plus étendu par rapport aux modèles actuels et permettant de réaliser des* ***calculs de fatigue à moindre coût****. Il est également souhaitable de donner la possibilité à l'utilisateur d'apprécier* ***la qualité et les limites de son modèle*** *et, le cas échéant, de pouvoir* ***l'enrichir*** *en fonction des situations rencontrées.*

➜ Revue (non exhaustive) des modèles simplifiés de points de soudure

Plusieurs modèles simplifiés de PSE sont proposés dans la littérature avec, généralement, leur méthodologie de reconstruction de la solution locale en vue de leur dimensionnement. Les modèles les plus élémentaires modélisent le PSE par un élément poutre relié à un nœud appartement à chaque plaque respective. Ces **modèles de connexion « nœud à nœud »** conduisent cependant à une identification des paramètres de rigidité de l'élément poutre, à partir d'essais expérimentaux élémentaires par exemple, qui **dépendent de la discrétisation des maillages plaques au voisinage du PSE**.

Aussi, dans les années 2000, des modèles plus élaborés cherchant à **connecter les deux plaques dans une zone plus large au voisinage du PSE**, ont vu le jour. Dans [Salvini *et al.*, 2000, Vivio *et al.*, 2002, Vivio, 2009], le PSE est modélisé sur chaque plaque par un ensemble de poutres équivalentes de longueur identiques, disposées radialement, et reliées d'un côté à l'axe « rigide » du PSE et de l'autre aux éléments plaque. Le comportement élastique des poutres est obtenu par des modèles analytiques élémentaires. Le modèle ACM2 (*Area Contact Model 2*) connecte un élément fini hexaédrique aux éléments plaque par des poutres rigides [Kuratani *et al.*, 2011]. Le modèle CWELD de MSC Nastran™ propose un modèle poutre particulier qui peut être connecté aux modèles plaque sans nécessiter d'avoir deux nœuds en vis-à-vis. Les modèles ACM2 et CWELD sont encore très utilisés de nos jours dans le milieu industriel [Palmonella *et al.*, 2004, Palmonella *et al.*, 2005]. Ces modèles s'appuyant sur des cinématiques de poutres ou d'éléments finis volumiques, **manquent un peu**

de lien physique avec la cinématique et les effets tridimensionnels locaux induits par un PSE. Par ailleurs, les techniques de connexion aux modèles de plaque sont très **dépendantes de la taille de maille et de l'orientation des éléments** ce qui rend l'identification des paramètres de ces modèles délicate et très dépendante aux maillages. Les champs plaque locaux au voisinage du modèle PSE manquent également parfois de précision pour certaines sollicitations comme la torsion.

On peut également citer les **modèles de type *spider* ou *umbrella*** qui proposent un modèle composé de trois zones [Zhang et Taylor, 2001, Kang *et al.*, 2007] : un élément poutre central liant les deux plaques assemblées, puis pour chaque plaque, une première couche d'éléments de poutres rigides disposés radialement et une couche d'éléments plaque. Les propriétés de chaque zone sont calibrées à partir d'essais expérimentaux pour des configurations type de chargement.

Enfin [Burry *et al.*, 2008] propose un **enrichissement local de l'espace d'approximation du champ de déplacement plaque par la méthode X-FEM** sur la base de *handbooks* numériques obtenus sur un maillage fin. Les fonctions d'enrichissement générées représentent les modes de déformation locaux des tôles autour d'un point de soudure. Cela permet ainsi d'enrichir la cinématique d'un maillage plaque grossier pour un calcul à l'échelle d'une structure. Cependant, bien que la méthode améliore la cinématique du maillage grossier, elle **ne répond pas à la question de la modélisation du comportement** (p. ex. la raideur) du PSE à proprement parler. Par ailleurs, le développement de la X-FEM pour l'enrichissement de modèles éléments finis de plaque reste relativement ardu à implémenter dans un code commercial.

De manière générale, l'ensemble de ces modèles présente une **forte dépendance au maillage et conduit à des résultats en termes de rigidité équivalente et de prédiction de la durée de vie très disparates**. Certaines sollicitations simples comme la torsion ou combinées sont souvent mal prises en compte. Les méthodologies de modélisation proposées, s'appuyant sur des hypothèses cinématiques plus ou moins influencées par les éléments finis disponibles dans les codes (poutre, élément hexaédrique...), **manquent parfois de généricité** et ont du mal à introduire les effets locaux induits par exemple par un bord de tôle, un trou ou tout simplement un autre PSE. Par ailleurs, le **choix de la taille du modèle en fonction du diamètre du PSE n'est pas toujours étudiée**.

Face à ces difficultés, deux approches assez différentes peuvent être envisagées. **La première, assez naturelle, consiste à ne pas simplifier le modèle volumique de référence du PSE et à ne pas faire d'hypothèses cinématiques *a priori* trop fortes**. Plusieurs difficultés se posent alors : le raccord d'un modèle volumique du PSE avec les modèles plaque des tôles assemblées, le choix du rayon du modèle volumique, un coût de calcul raisonnable pour mener un calcul de fatigue sur une structure soudées à grand nombre de PSE.

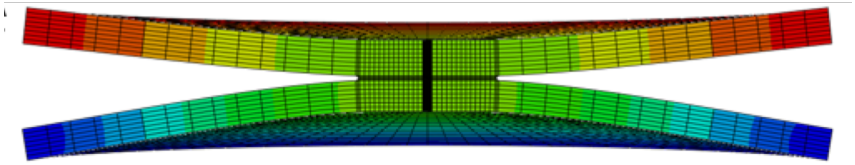
La deuxième approche consiste à construire un modèle simplifié comme proposé dans les approches de la littérature décrites précédemment. La méthodologie doit permettre d'élaborer un modèle simplifié (i) qui **ne s'appuie pas sur des hypothèses cinématiques *a priori* trop restrictives** et permette d'**exhiber automatiquement les modes cinématiques locaux** des tôles au voisinage du PSE, (ii) qui soit **adapté au couplage de modèles de plaque** et dont l'identification doit être indépendante de la discrétisation, et (iii) qui permette une **reconstruction rapide de la solution volumique** au voisinage du PSE et une estimation rapide et à moindre coût de la tenue en fatigue.

Ces deux approches sont actuellement étudiées dans le cadre des travaux de thèse de F. Mainnemare. Sous la direction de P.-A. Boucard, ce projet est mené en collaboration avec PSA Groupe et

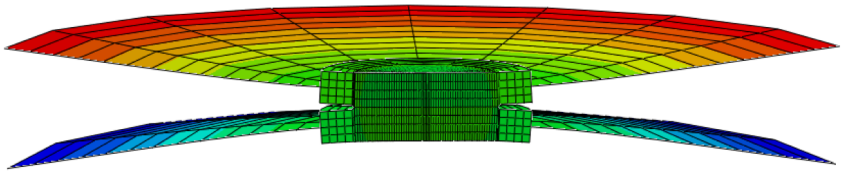
a pour objectif de proposer un modèle de PSE permettant d'améliorer la prédiction de la tenue à la fatigue de certains PSE situés trop près de détails géométriques ou structuraux (bord de tôle, autre PSE, trou, cordon de soudure...). Ces PSE « problématiques » peuvent représenter en effet 10% des PSE d'une caisse automobile et montrent les limitations des modèles simplifiés actuels. Les deux illustrations suivantes ne sont présentées que dans les grandes lignes car ces travaux sont actuellement en cours de développement.

➔ Illustration : Post-traitement sur base réduite d'un super-élément de PSE

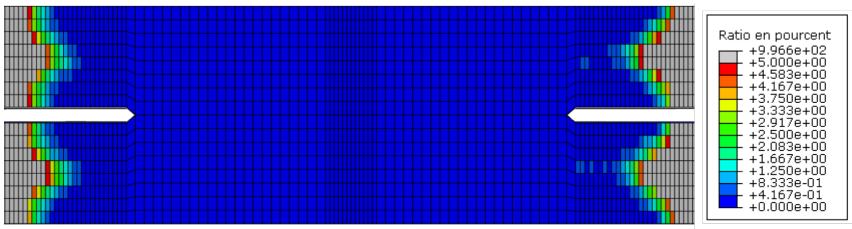
La première approche de modélisation de PSE, ici brièvement décrite, est principalement étudiée au cours de la thèse de F. Mainnemare. Face aux difficultés à représenter correctement les champs locaux à partir de données issues de modèles simplifiés, **cette approche ne cherche pas à construire un modèle simplifié.** Elle cherche à décrire la solution locale à partir d'un modèle volumique d'un PSE et à coupler celui-ci à un modèle plaque (voir **Figure 3.10(b)**). Les deux premières difficultés qui surviennent dans ce cas sont (i) le choix d'une technique de **raccord plaque-3D** et (ii) le **choix du rayon du modèle « fin » volumique** pour décrire les phénomènes tridimensionnels induits par le PSE que le modèle plaque ne peut décrire.



(a) Modèle volumique de référence d'un PSE et de son environnement



(b) Modèle de PSE par modèle hybride plaque-3D



(c) Erreur relative en énergie (en %) dans la zone d'intérêt

Figure 3.10 – Modèle volumique et modèle hybride d'un PSE et carte relative d'erreur en énergie dans la zone d'intérêt

Des techniques de raccord plaque-3D existent dans la plupart des codes commerciaux. Des couplage plus élaborés existent (voir p. ex. [Guguin *et al.*, 2014]). On peut montrer que les erreurs induites par le raccord sur des maillages plaques-3D (au moins dans le cas où les maillages sont quasi-compatibles sur le feuillet moyen) pénètrent généralement sur une épaisseur de plaque. La **Fi-**

gure 3.10(c) montre par exemple l'erreur en énergie commise avec un raccord plaque-3D disponible dans Abaqus™.

Une étude numérique préliminaire a permis de montrer que les effets tridimensionnels locaux dus au PSE et non représentables par un modèle plaque pénétraient également sur une dimension caractéristique de l'ordre de l'épaisseur de plaque. Ce résultat bien connu en analyse des effets de bord dans les plaques a permis de fixer approximativement le rayon de la zone modélisée par un modèle volumique à un rayon en fond d'entaille plus 1 à 1.5 fois l'épaisseur plaque de façon à inclure les effets dus au fond d'entaille et ceux dus au raccord plaque-3D [Mainnemare *et al.*, 2018, Mainnemare *et al.*, 2019].

Dans le cas de l'élasticité linéaire (calcul de fatigue à grand nombre de cycles), il est alors raisonnable de **construire un super-élément**, une bonne fois pour toute, de l'ensemble composé du modèle volumique de la zone d'intérêt du PSE et du raccord plaque-3D, le tout condensé sur les degrés de liberté des maillages plaques de chaque tôle entourant la zone d'intérêt du PSE. Le super-élement peut éventuellement intégrer la gestion de l'incompatibilité éventuelle entre les maillages plaque et le modèle 3D. La génération d'un super-élément est généralement coûteuse en particulier si la reconstruction (optionnelle) de la solution locale dans le PSE est demandée. Cependant, le super-élément du PSE étant ici identique pour tous les PSE d'une structure automobile, il est possible de le générer une seule fois à partir d'un fichier de sauvegarde, voire à l'utiliser dans un autre code de calcul qu'Abaqus™, et de l'instancier pour chaque PSE à modéliser. Une étude numérique a permis de montrer qu'en pratique un calcul sur une structure soudée incluant un nombre de PSE représentatif du nombre rencontré sur un véhicule automobile (soit environ 6000 PSE/super-élements) coûtait 2 à 3 fois plus en temps CPU, hors coût de reconstruction. Cette augmentation du temps de calcul reste cependant acceptable si la qualité de la solution locale du PSE est améliorée.

La dernière difficulté de la méthodologie consiste à **reconstruire à moindre coût la solution volumique dans le PSE/super-élement**. Pour ce faire, un modèle réduit de la solution dans la zone volumique d'intérêt a été générée pour une base de chargements élémentaires représentatifs de ceux vus par un PSE et appliqué sur un modèle élémentaire de PSE « suffisamment grand ». Cette base de chargement peut-être complétée en fonction des situations rencontrées par le PSE (p. ex. présence d'un bord de tôle proche). Une **POD au sens de la norme énergétique** des différentes solutions vo-

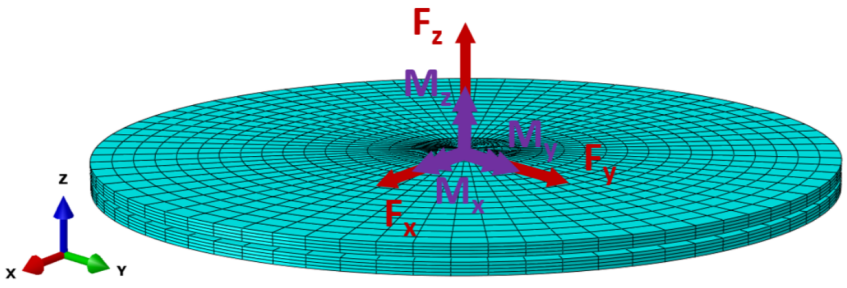


Figure 3.11 – Illustration de sollicitations élémentaires (efforts et moments) appliquées sur un nœud maître relié cinématiquement au bord extérieur du modèle étendu

lumiques élémentaires dans la zone proche du PSE permet ainsi d'exhiber des modes cinématiques pertinents et d'extraire pour chaque mode de cette base réduite la solution plaque (déplacement et rotation) sur le bord extérieur de la zone d'intérêt à une distance du centre du PSE correspondant à la zone de raccord plaque/3D du modèle hybride **Figure 3.10(b)**.

Les solutions bord obtenues sur chaque super-élément/PSE dans un calcul d'une structure soudée peuvent alors être projetées à moindre coût sur cette base réduite en post-traitement. La solution volumique correspondant peut alors être reconstruite au besoin par combinaison des différentes solutions volumiques de chaque mode. L'intérêt de la base réduite est qu'elle permet de **décomposer la solution sur des modes cinématiques qui sont *classés* par importance énergétique**. Bien que les sollicitations sur une structure soit complexes, les sollicitations locales sur un PSE sont souvent relativement simples et conduisent à une solution qui se décompose en pratique majoritairement sur très peu de modes (voire un seul) à chacun desquels on peut associer une carte de critère locale de fatigue. Cette constatation peut ainsi être exploitée avantageusement pour faire une estimation rapide de la durée de vie comme détaillé dans l'illustration suivante.

L'intérêt de l'approche est qu'il est alors possible d'utiliser le super-élément et la base réduite dans un autre code de calcul. **Dans le cadre de la thèse de F. Mainnemare par exemple, le super-élement est généré dans Abaqus™ et la base réduite est obtenue dans Matlab™. L'ensemble sera exploité à terme dans MSC Nastran™.** En revanche, bien que le coût de la projection soit relativement modeste, elle nécessite de projeter à maintes reprises la solution sur la base réduite pour chaque PSE à chaque fois que l'on souhaite reconstruire la solution locale pour appliquer un critère local de fatigue. Par ailleurs, la génération d'un super-élément (condensation statique) reste pertinente essentiellement dans le cas linéaire comme discuté en **Section 4** du **Chapitre 1**. L'approche qui suit vise à élaborer un modèle simplifié de PSE permettant de pallier en partie ces limitations.

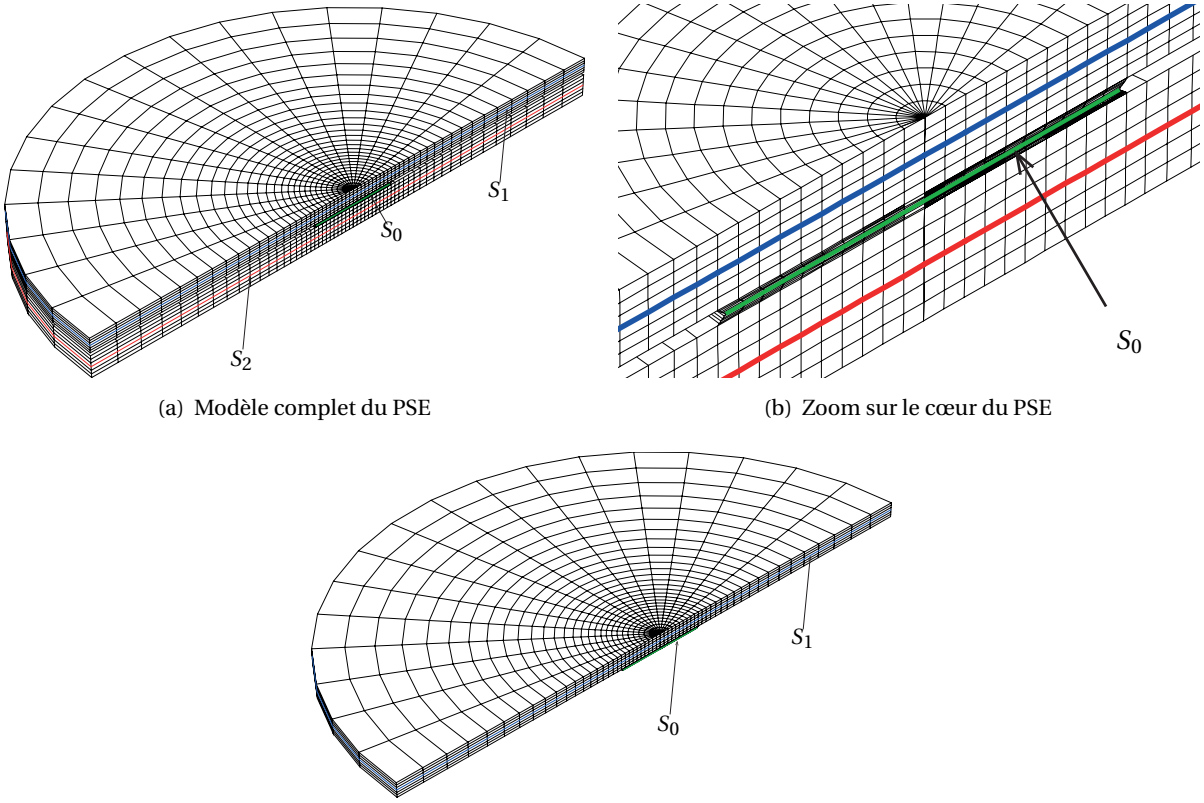
➜ Illustration : Construction d'un modèle simplifié de PSE par base réduite

La méthodologie de modélisation et d'enrichissement de modèle de PSE ici décrite est en cours de réflexion et a été développée en parallèle des travaux de thèse de F. Mainnemare. Elle n'a pas encore fait l'objet de publications. Aussi, la démarche ne sera présentée que dans ses grandes lignes.

Suivant la seconde approche évoquée précédemment, l'objectif est ici de construire un modèle simplifié de PSE qui puisse connecter directement des modèles plaques. La méthodologie d'identification est réalisée indépendamment des discrétisations des maillages plaques des tôles assemblées par les PSE. Elle peut donc être exploitée à chaque fois que les procédures de maillage, et donc la taille de maille, changent au sein d'un bureau d'étude. On notera à ce sujet qu'il est tout-à-fait possible de donner quelques contraintes sur la qualité et l'aspect du maillage au voisinage du PSE. En revanche, la taille minimale admissible des éléments est difficilement négociable et est proche du diamètre du PSE, c'est-à-dire de l'ordre de $5\,mm$. Aussi, ce maillage grossier ne permet pas toujours de représenter correctement la cinématique induite par la présence d'un PSE.

La démarche est en résumé la suivante. Sans faire d'hypothèses *a priori* sur la cinématique du PSE, **les outils de la réduction de modèle sont ici utilisés pour construire une bibliothèque de modes spatiaux permettant de décrire les champs plaque locaux vus par les tôles liées par un PSE dans toutes les situations rencontrées en pratique.** De façon similaire à l'homogénéisation cinématique, cette base réduite de modes plaque est ensuite utilisée pour élaborer un modèle simplifié de connecteur utilisable à l'échelle d'une structure soudée automobile. Il est ensuite possible de déterminer à moindre coût la tenue en fatigue de chaque PSE par une procédure de relocalisation 3D de la solution au voisinage du PSE tout en contrôlant la qualité de la base réduite utilisée par le modèle simplifié de PSE et à l'enrichir le cas échéant. Contrairement au **Chapitre 2**, la réduction de modèle est ici utilisée pour construire un modèle simplifié *a priori* et non pour construire un modèle réduit dans le but de réduire la complexité d'un calcul s'appuyant sur un modèle donné.

La première étape de la démarche, est une étape d'apprentissage, qui consiste à exhiber tous les champs équivalents plaques qu'un PSE peut rencontrer. Une liste de configurations de PSE peut être identifiée par l'utilisateur en fonction de son application cible : un PSE seul, un PSE proche d'un bord de tôle, deux PSE proches, un PSE proche d'un cordon de soudure... Afin d'illustrer la méthode, on considère ici la situation d'un PSE seul (**Figure 3.12**).



(a) Modèle complet du PSE

(b) Zoom sur le cœur du PSE

(c) Demi-modèle du PSE

Figure 3.12 – Modèle volumique d'un PSE, feuillets moyens S_1 et S_2 des plaques et section S_0 du cœur du PSE

Le feuillet moyen de la plaque supérieure (resp. inférieure) est noté S_1 (resp. S_2). Le bord extérieur de S_1 et S_2 sont respectivement ∂S_1 et ∂S_2. Pour simplifier encore davantage la présentation, **seule la moitié supérieure du modèle est considérée dans la suite** (**Figure 3.12(c)**). Cette partie est composée de la plaque supérieure du PSE et de la moitié du cœur du PSE (en vert sur la **Figure 3.12(b)**) dont le plan de symétrie ou section est noté S_0.

Différentes configurations de chargement peuvent être appliquées sur ce modèle élémentaire de PSE. Il convient *a minima* de solliciter le PSE sur une base de chargements élémentaires correspondant aux composantes d'un torseur d'effort (comme illustré précédemment en **Figure 3.11**). Cependant des chargements plus complexes peuvent être proposés pour cette étape d'apprentissage. Ici, on suppose que le demi-modèle de PSE est encastré sur la surface S_0 et qu'un mouvement de corps rigide est imposé sur la partie Γ_1 de ∂S_1 définie par l'angle α (**Figure 3.13**). La partie complémentaire $\partial S_1 \backslash \Gamma_1$ est libre d'effort. Un déplacement $\underline{U}_d$ et une rotation $\underline{\Omega}_d$ sont imposés au nœud maître O.

Des éléments finis quadratiques (éléments cu20, cube à 20 nœuds, dans Cast3M™) sont utilisés

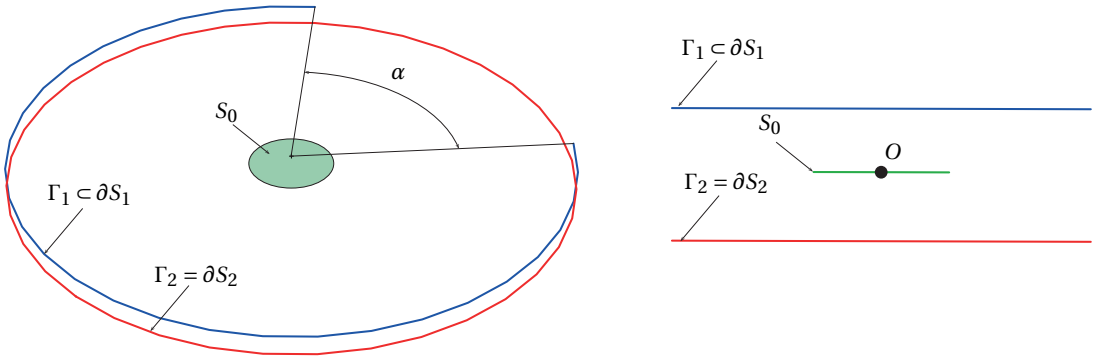
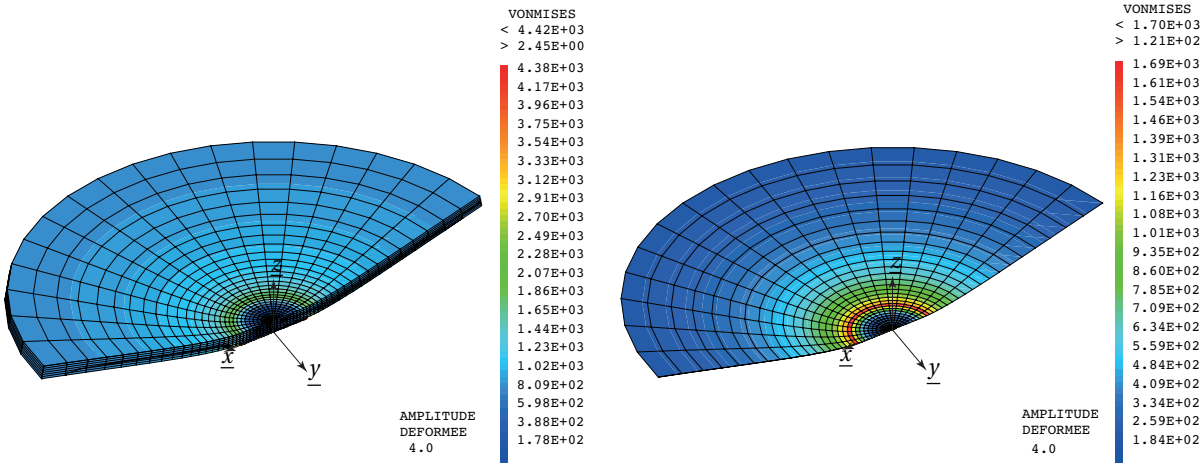


Figure 3.13 – Entités géométriques utilisées pour la définition des conditions limites

pour le modèle volumique afin de représenter correctement l'énergie de déformation de cisaillement des plaques et d'être cohérent avec le modèle plaque utilisé dans la suite. La déformée du demi-modèle 3D de PSE et la contrainte de Von Mises sont fournies en **Figure 3.14(a)** pour un déplacement imposé $\underline{U_d} \cdot \underline{z} = 1\,mm$ sur tout le bord par l'intermédiaire du nœud maître O ($\alpha = 0°$ et $\Gamma_1 = \partial S_1$).



(a) Demi-modèle volumique du PSE

(b) Solution plaque reconstruite définie sur S_1

Figure 3.14 – Déformée et contrainte de Von Mises pour le demi-modèle volumique du PSE et le modèle plaque reconstruit sur le feuillet moyen S_1 de la plaque supérieure dans le cas d'un déplacement imposé $\underline{U_d} \cdot \underline{z} = 1\,mm$ au nœud maître O ($\alpha = 0°$ et $\Gamma_1 = \partial S_1$)

Pour chaque solution du modèle volumique, un champ plaque sur le feuillet moyen S_1 de la plaque supérieure est reconstruit de la façon suivante. Le champ de déplacement du modèle volumique est projeté sur un maillage de la plaque supérieure à un élément dans l'épaisseur (**Figure 3.15**). Le déplacement $\underline{u}^+$ (resp. $\underline{u}^-$) de la face supérieure (resp. inférieure) de la plaque supérieure d'épaisseur e est extrait comme illustré en **Figure 3.15**. Un champ de déplacement plaque $\underline{u}^P$ est alors reconstruit à partir de $\underline{u}^+$ et $\underline{u}^-$ comme suit :

$$\underline{u}^P(M) = \underline{U}(m) + \underline{\Omega}(m) \wedge \underline{mM}$$

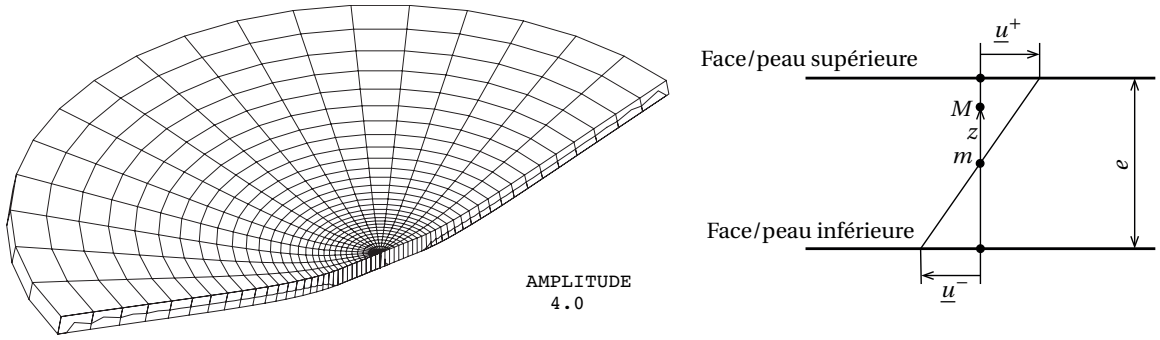


Figure 3.15 – Projection de la solution du modèle volumique de la **Figure 3.14(a)** sur un maillage de la plaque supérieure à un élement dans l'épaisseur et définition des déplacements $\underline{u}^+$ et $\underline{u}^-$ des peaux/faces supérieure et inférieure de la plaque

où :

$$\underline{\Omega}(m) \wedge \underline{mM} = \begin{pmatrix} 0 & -\Omega_z & \Omega_y \\ \Omega_z & 0 & -\Omega_x \\ -\Omega_y & \Omega_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ z \end{pmatrix} = z \begin{pmatrix} \Omega_y \\ -\Omega_x \\ 0 \end{pmatrix}$$

On en déduit que :

$$\begin{cases} \underline{U}(m) & = & \dfrac{\underline{u}^+ + \underline{u}^-}{2} \\ \begin{pmatrix} \Omega_y \\ -\Omega_x \\ 0 \end{pmatrix} & = & \dfrac{\underline{u}^+ - \underline{u}^-}{e} \end{cases} \tag{3.3}$$

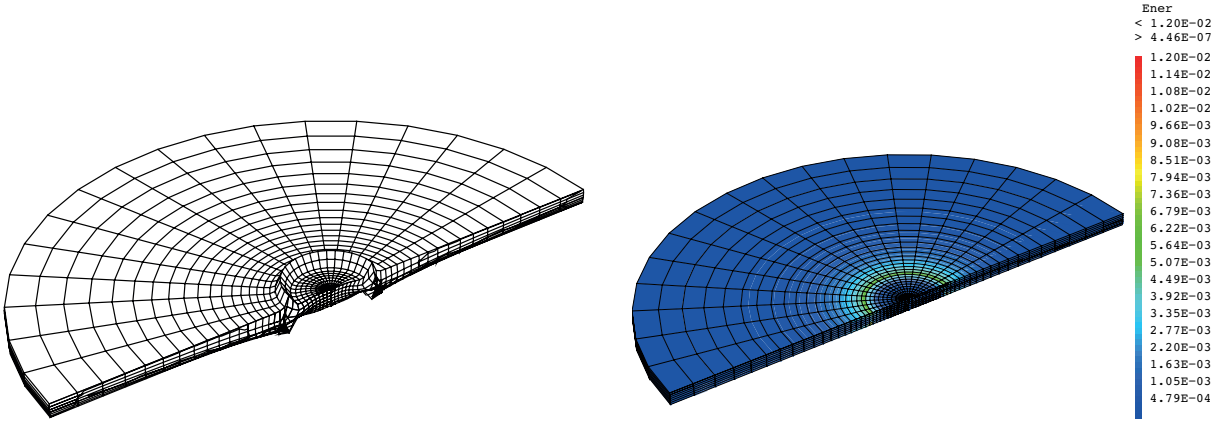
Finalement, on obtient :

$$\underline{u}^P(M) = \frac{\underline{u}^+ + \underline{u}^-}{2} + z\frac{\underline{u}^+ - \underline{u}^-}{e} \tag{3.4}$$

La composante de rotation Ω_z est supposée nulle. Cette construction est simple lorsque les maillages des peaux supérieure et inférieure de la plaque sont identiques. La solution plaque reconstruite (3.4) définie sur le feuillet moyen S_1 de la plaque supérieure pour la solution du modèle volumique de la **Figure 3.14(a)** est représentée en **Figure 3.14(b)**.

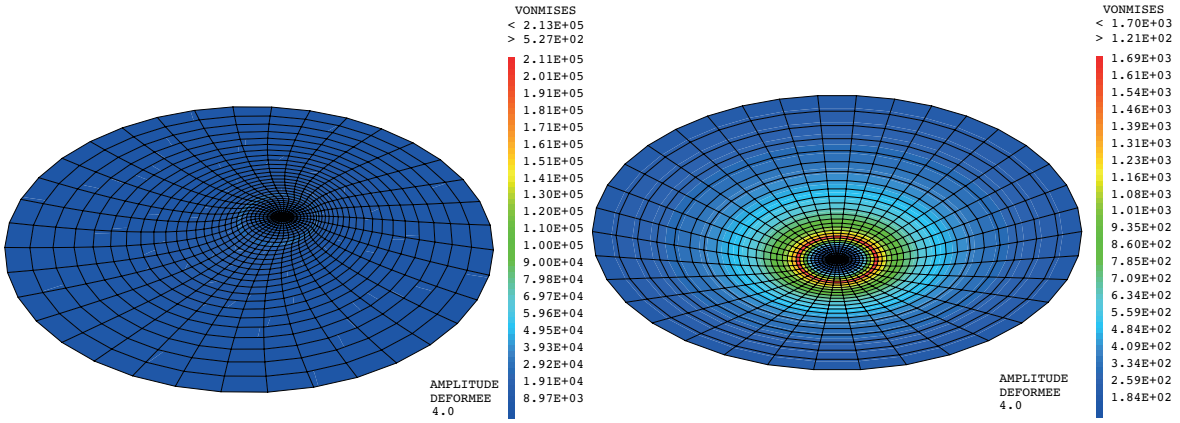
Il est intéressant de représenter en **Figure 3.16** la déformée associée à la différence entre le champ de déplacement $\underline{u}$ issu du modèle volumique de la **Figure 3.14(a)** et le champ de déplacement plaque reconstruit $\underline{u}^P$ sur la plaque supérieure. On constate que les effets tridimensionnels (c.a.d. déformation dans l'épaisseur), que le champ plaque ne peut représenter, sont localisés au voisinage du cœur du PSE. Ces effets localisés décroissent rapidement pour disparaître presque totalement à une distance égale à environ une épaisseur de plaque e de l'entaille du PSE.

La **Figure 3.17** montrent plusieurs champs de déplacement plaque $\underline{u}^P$ reconstruits associés à différents cas de chargement élémentaire. De nombreux autres cas de chargements peuvent être envisagés en fonction des situations rencontrées afin de générer une collection de m champs plaque $\{\underline{u}^{P,(l)}\}_{1\leqslant l\leqslant m}$. Si l'on identifie classiquement un élement $\underline{u}^P$ de l'espace d'approximation $\mathscr{U}_h$ avec un vecteur d'inconnues nodales $[\underline{u}^P] = (u_1^P, \ldots, u_n^P)^T$ où $n = 6N$ est le nombre de degrés de liberté de déplacement et de rotation et N est le nombre de nœuds du maillage plaque, on peut collecter en colonnes les m vecteurs d'inconnues nodales associés au m champs plaque $\{\underline{u}^{P,(l)}\}_{1\leqslant l\leqslant m}$ dans une matrice de dimension $n\times m$, $\boldsymbol{A} = \left([\underline{u}^{P,(1)}], [\underline{u}^{P,(2)}], \ldots, [\underline{u}^{P,(m)}]\right)$.

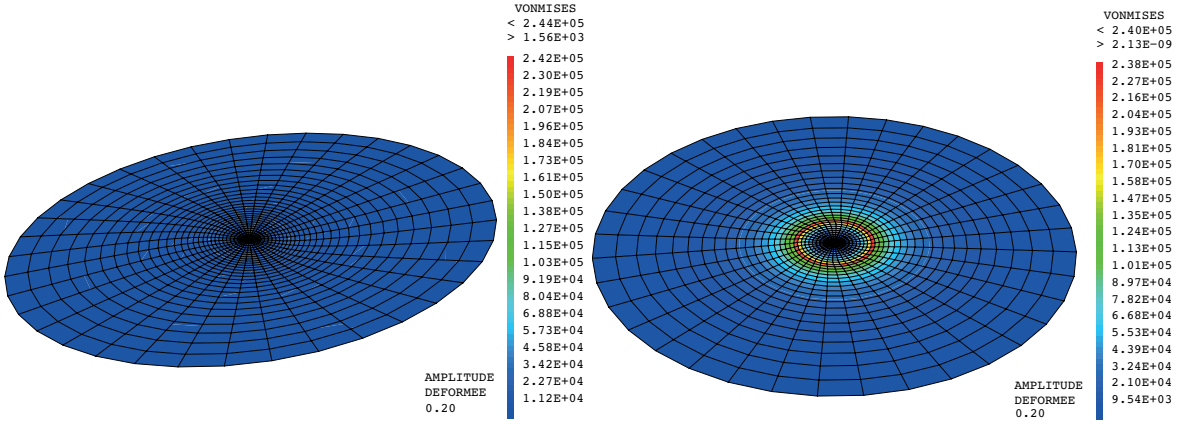


(a) Différence $\underline{u} - \underline{u}^P$ (×800) (b) Erreur en énergie associée à $\underline{u} - \underline{u}^P$

Figure 3.16 – Déformée et erreur en énergie associée à la différence entre le champ de déplacement $\underline{u}$ issu du modèle volumique de la **Figure 3.14(a)** et le champ de déplacement plaque reconstruit $\underline{u}^P$ sur la plaque supérieure



(a) Cas $\underline{U}_d \cdot \underline{x} = 1$ (b) Cas $\underline{U}_d \cdot \underline{z} = 1$



(c) Cas $\underline{\Omega}_d \cdot \underline{x} = 1$ (d) Cas $\underline{\Omega}_d \cdot \underline{z} = 1$

Figure 3.17 – Déformée du modèle plaque reconstruit pour différents cas de chargement

Une POD (*Proper Orthogonal Decomposition*) au sens de la norme énergétique associée au modèle de comportement plaque choisi peut ainsi être réalisée sur la collection des m champs plaque $\left\{\underline{u}^{P,(l)}\right\}_{1\leqslant l\leqslant m}$ afin d'exhiber une base de M modes cinématiques plaque $\left\{\underline{U}^{P,(l)}\right\}_{1\leqslant l\leqslant M}$ avec $M \leqslant m$. Dans le cas de l'élasticité linéaire, en introduisant la matrice de rigidité associée au modèle plaque choisi $\boldsymbol{K}^P$, cela revient, sous forme discrète, à réaliser une SVD sur la matrice $\sqrt{\boldsymbol{K}^P}\boldsymbol{A}$ [2]. La dimension n des champs plaque discrétisés étant en pratique relativement petite ainsi que le nombre m de champs solutions, faire cette SVD reste raisonnable. On note $\boldsymbol{U} = \left(\left[\underline{U}^{P,(1)}\right], \left[\underline{U}^{P,(2)}\right], \ldots, \left[\underline{U}^{P,(M)}\right]\right)$ la base des M premiers modes cinématiques plaque discrétisés avec $M \leqslant m$.

La deuxième étape de la démarche consiste à construire le modèle simplifié de PSE permettant de décrire un déplacement plaque discrétisé au voisinage du PSE sous la forme :

$$\left[\underline{u}^P\right] \approx \left[\underline{u}^{PSE}\right] = \sum_{i=1}^{M} \alpha_i \left[\underline{U}^{P,(i)}\right] = \boldsymbol{U}\,\boldsymbol{\alpha} \tag{3.5}$$

où les coefficients α_i jouent le rôle de nouveaux « degrés de liberté » et $M \leqslant m$. Dans le cas où l'on cherche à modéliser un comportement élastique linéaire, on peut chercher la solution plaque sous la forme (3.5) qui minimise l'énergie potentielle plaque :

$$\begin{aligned} e_p\left(\underline{u}^P\right) &= \frac{1}{2}\left[\underline{u}^P\right]^T \boldsymbol{K}^P \left[\underline{u}^P\right] - \left[\underline{u}^P\right]^T \left[\underline{F}^P_{ext}\right] && (3.6)\\ &= \frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}^T\left(\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{K}^P\boldsymbol{U}\right)\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}^T\left(\boldsymbol{U}^T\left[\underline{F}^P_{ext}\right]\right) && (3.7)\\ &= \frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}^T\boldsymbol{U}^T\left(\boldsymbol{K}^P\boldsymbol{U}\boldsymbol{\alpha} - \left[\underline{F}^P_{ext}\right]\right) && (3.8) \end{aligned}$$

où $\underline{F}^P_{ext}$ sont les efforts extérieurs s'exerçant sur la plaque, en particulier ceux exercés par le cœur du PSE. La **Figure 3.18** représente les efforts nodaux intérieurs $\boldsymbol{K}^P\boldsymbol{U}$ le long d'un diamètre dans le cas où la base ne contiendrait que le mode de la **Figure 3.14(b)**. On constate que les efforts intérieurs non nuls se localisent sur le bord extérieur de la plaque où sont appliqués les conditions limites mais également dans la zone centrale correspondant au cœur du PSE. Cette zone correspond à la zone d'action du PSE et donc définit le rayon de raccord R du modèle simplifié de PSE au modèle plaque. On notera que le rayon d'influence R est légèrement supérieur au rayon r du PSE. Le choix de R peut cependant être optimisé et mérite des investigations supplémentaires. On peut ainsi définir le comportement élastique simplifié du PSE par la matrice de dimension $M \times M$:

$$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{U}_{|R}^T \boldsymbol{K}^P \boldsymbol{U}_{|R}$$

où $\boldsymbol{U}_{|R}$ désigne la restriction de la base dans un domaine surfacique Γ_R du feuillet moyen centré sur le centre du PSE et situé dans un rayon R.

La troisième étape de la démarche consiste à raccorder le modèle simplifié de PSE à son environnement. Il s'agit en fait de connecter cinématiquement dans un rayon R l'espace d'approximation du PSE défini sur la base réduite à l'espace d'approximation éléments finis $\mathscr{U}_h^P$ du déplacement plaque. En d'autres termes, il s'agit d'imposer au sens faible la relation cinématique (3.5) :

$$\int_{\Gamma_R} \underline{F}^* \cdot (\underline{u}^P - \underline{u}^{PSE}) \mathrm{d}\Gamma = 0, \quad \forall\, \underline{F}^* \in \mathscr{F} \tag{3.9}$$

2. La racine carré de la matrice de rigidité $\boldsymbol{K}^P$ peut être obtenue par une décomposition de Schur $\boldsymbol{K}^P = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{D}\boldsymbol{Q}^H$, où $\boldsymbol{D}$ est diagonale pour une matrice hermitienne (ici symétrique) semi-définie positive, en posant $\sqrt{\boldsymbol{K}^P} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{Q}^H$

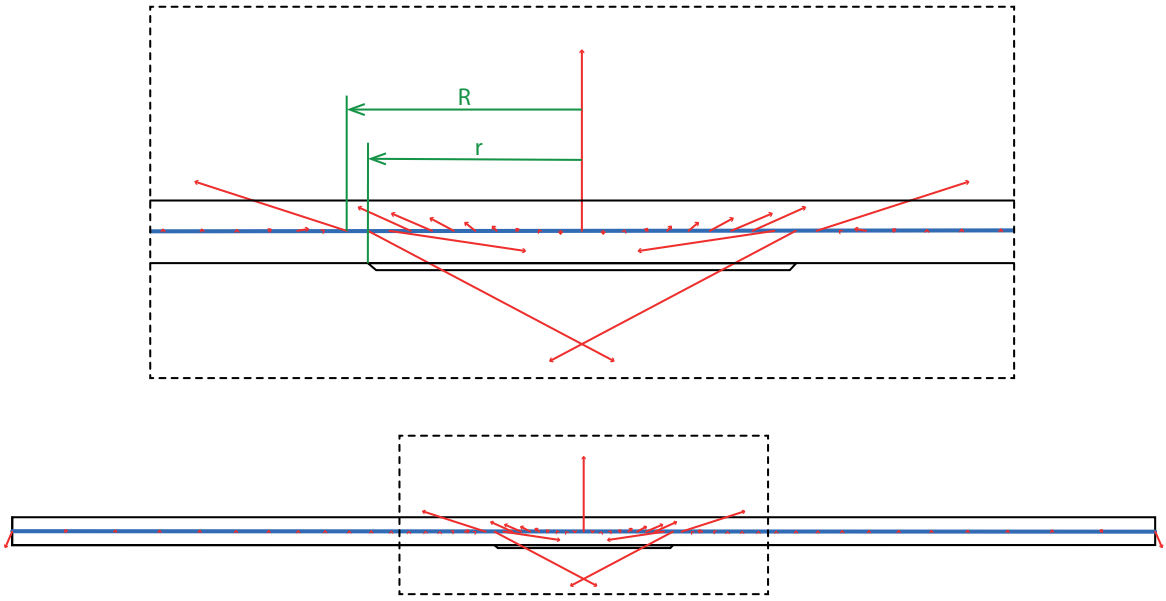


Figure 3.18 – Efforts nodaux intérieurs obtenus le long d'un diamètre pour le modèle plaque reconstruit de la **Figure 3.14(b)**

Différents choix de l'espace d'approximation $\mathscr{F}_h$ peuvent être considérés comme discuté au **Chapitre 1**.

Par ailleurs, différentes approches d'intégration du modèle simplifié de PSE peuvent être proposées selon l'utilisation que l'on souhaite en faire (voir **Figure 3.19**).

— **Cas 1 : utilisation du modèle simplifié de PSE pour connecter des modèles plaque** dont le maillage d'approximation dans le domaine surfacique Γ_R n'est pas nécessairement identique à celui utilisé pour l'identification du comportement du modèle de PSE ;

— **Cas 2 : construction d'un super-élément dans le domaine surfacique** Γ_R du modèle simplifié de PSE et de son raccord cinématique.

Dans le cas 1, on peut choisir un maillage grossier des plaques au voisinage d'un PSE relativement structuré et suffisamment fin pour décrire les premiers modes de la base réduite $\boldsymbol{U}_{|R}$ dans le domaine surfacique Γ_R et précalculer les conditions de couplage cinématique issue de (3.9). Cette contrainte de maillage reste somme toute acceptable. Dans le cas 2, on utilisera par simplicité directement le maillage plaque utilisé pour l'identification du comportement du modèle de PSE. Dans les deux situations, l'avantage de la construction du modèle simplifié de PSE ici proposée est qu'elle permet d'obtenir directement les coefficients α_i (degrés de liberté du modèle de PSE) sans étape de projection sur la base réduite. Un autre avantage concerne le fait que la base réduite portant sur des champs de déplacement plaque, elle ne nécessite pas d'utiliser de raccord cinématique particulier comme un raccord 3D-plaque.

La dernière étape consiste à vérifier la tenue en fatigue du PSE en fonction d'un critère local. Le fait d'avoir décomposé la solution locale au PSE sur une base cinématique à fort contenu mécanique peut être le cas échéant exploité avantageusement. A partir, de la décomposition sur la base cinématique $\boldsymbol{U}_{|R}$ et connaissant chaque coefficient α_i à chaque pas de temps, il est possible de reconstruire

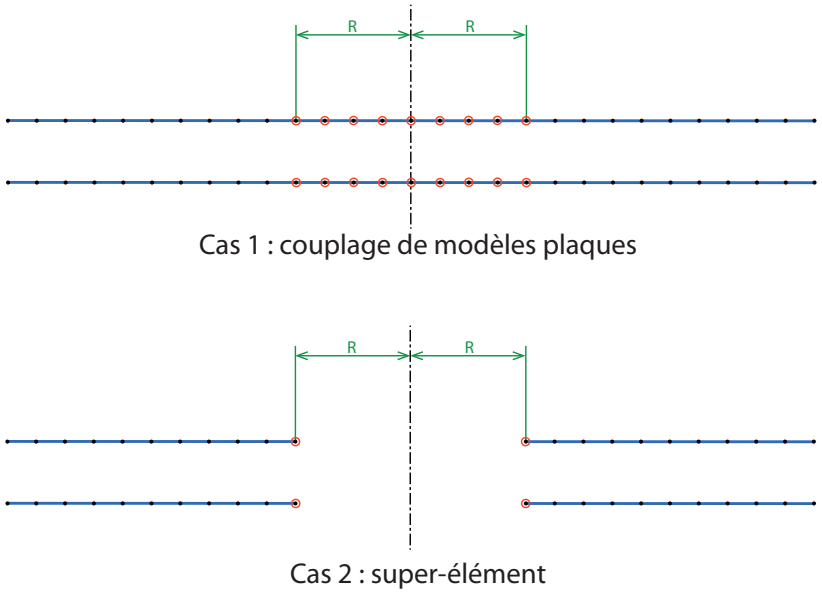


Figure 3.19 – Cas d'utilisation du modèle simplifié de PSE

une contrainte locale « macroscopique » sous la forme :

$$\boldsymbol{\Sigma}(\underline{x},t) = \alpha_i(t)\boldsymbol{\Sigma}_i(\underline{x})$$

où le champ de contrainte locale $\boldsymbol{\Sigma}_i(M)$ correspond au mode plaque $\underline{U}^{P,(i)}$. Dans le cas du critère de fatigue multiaxial de Dang Van [Dang Van *et al.*, 1989, Dang Van, 1999] par exemple, la contrainte « mésoscopique » dans un état stabilisé (accommodation élastique) est recherchée sous la forme :

$$\boldsymbol{\sigma}(\underline{x},t) = \boldsymbol{\Sigma}(\underline{x},t) + \boldsymbol{\rho}^*(\underline{x})$$

où le champ de contrainte résiduelle mésoscopique à l'état adapté, $\boldsymbol{\rho}^*$, est indépendant du temps. On suppose que l'on approche la partie déviatorique $\operatorname{dev}\rho^*$ comme pour l'étape d'initialisation de la procédure décrite dans [Dang Van *et al.*, 1989] :

$$\operatorname{dev}\rho^* \approx \operatorname{dev}\tilde{\rho}^* = \frac{1}{T}\int_0^T \operatorname{dev}\boldsymbol{\Sigma}(\underline{x},t)\,\mathrm{d}t = \left(\frac{1}{T}\int_0^T \alpha_i(t)\,\mathrm{d}t\right)\operatorname{dev}\boldsymbol{\Sigma}_i(\underline{x})$$

comme $\operatorname{dev}\boldsymbol{\Sigma}(\underline{x},t) = \alpha_i(t)\operatorname{dev}\boldsymbol{\Sigma}_i(\underline{x})$. On en déduit que :

$$\operatorname{dev}\boldsymbol{\sigma} = \operatorname{dev}\boldsymbol{\Sigma} + \operatorname{dev}\rho^* \approx \left(\alpha_i(t) + \frac{1}{T}\int_0^T \alpha_i(t)\,\mathrm{d}t\right)\operatorname{dev}\boldsymbol{\Sigma}_i(\underline{x}) = \beta_i(t)\operatorname{dev}\boldsymbol{\Sigma}_i(\underline{x})$$

Pour une contrainte de cisaillement mésoscopique maximale calculée selon le critère de Tresca par exemple, une approximation du critère de fatigue de Dang Van peut être définie comme suit :

$$d \approx \max_t\left[\frac{1}{2}\frac{Tresca\left(\beta_i(t)\operatorname{dev}\boldsymbol{\Sigma}_i(M)\right)}{b - a\,\alpha_i(t)\,P_i(M)}\right] \leqslant 1$$

où la partie hydrostatique, $P_i(\underline{x}) = \dfrac{1}{3}\operatorname{Tr}\boldsymbol{\Sigma}_i(\underline{x})$, et la partie déviatorique, $\operatorname{dev}\boldsymbol{\Sigma}_i(\underline{x})$, de la contrainte macroscopique de chaque mode peuvent être pré-calculées. Le coefficient $\beta_i(t)$ peut être calculé à la volée sur tout l'intervalle d'étude.

$$\beta_i(t) = \alpha_i(t) + \frac{1}{T}\int_0^T \alpha_i(t)\,\mathrm{d}t, \quad \forall t \in [0,T]$$

On obtient ainsi une estimation du critère local (carte) de fatigue au voisinage de chaque PSE.

Bien que les chargements soient complexes à l'échelle de la structure, on peut supposer qu'en pratique les sollicitations locales sur un PSE sont relativement simples. Aussi, si l'on considère que l'un des modes $\mathbf{\Sigma}_i(t)$ est dominant pour un PSE donné, le premier par exemple, le critère se réduit simplement à :

$$d \approx \max_t \left[\frac{1}{2} \frac{\beta_1(t) Tresca(\mathrm{dev}\mathbf{\Sigma}_1(M))}{b - a\,\alpha_1(t)\,P_1(M)} \right] \leqslant 1$$

où la quantité $Tresca(\mathrm{dev}\mathbf{\Sigma}_1(M))$ peut aussi être pré-calculée. Il est ainsi possible d'obtenir une estimation à moindre coût des PSE pour lesquels le critère de tenue à la fatigue n'est pas vérifié. On notera que ce critère n'est pas conservatif. Il fournit juste un indicateur de fatigue. Aussi, un calcul plus précis du critère de fatigue doit être mené par la suite au moins pour les PSE problématiques.

➜ Bilan et perspectives

Deux approches de modélisation du comportement d'un point de soudure électrique (PSE) ont été proposées afin de permettre la vérification de la tenue en fatigue de structures soudées à grand nombre de PSE. Les deux méthodes s'appuient sur la **construction d'une base réduite de chargements élémentaires qui permet une reconstruction rapide de la solution volumique dans le PSE** dans le but d'appliquer un critère de fatigue locale. **La base réduite peut être enrichie au besoin** de façon à représenter tous types de configuration de PSE (en bord de tôle, proche d'un autre PSE...). Dans le cas de l'élasticité linéaire, un super-élement peut raisonnablement être construit pour représenter le comportement du PSE à l'échelle de la structure. Il est montré que l'utilisation de super-élements augmente en pratique le temps de calcul d'un facteur compris entre 2 et 3 pour un véhicule automobile comportant entre 4000 et 6000 PSE ce qui reste acceptable si la qualité est au rendez-vous.

La deuxième approche présentée a l'avantage de proposer un modèle simplifié de PSE permettant de connecter directement des modèles plaques sans nécessiter l'utilisation de super-éléments. **Les degrés de libertés de ce modèle simplifié sont directement les coefficients d'amplitude des modes de la base réduite** ce qui permet de reconstruire la solution locale explicitement au cours du calcul sans étape de projection sur une base réduite. Cela permet de **mettre en place des indicateurs de tenue à la fatigue à moindre coût** qui peuvent être très utiles pour l'optimisation de structures soudées.

A court terme, il conviendrait d'évaluer les performances des deux approches sur des cas industriels et notamment d'apprécier leur capacité à améliorer la prédiction de la tenue à la fatigue des PSE les plus problématiques comme ceux situés en bord de tôle ou en interaction avec un trou ou un joint de colle par exemple. La **mise en place d'une méthode d'enrichissement adaptative de la base réduite** (ou du comportement du modèle simplifié de PSE suivant l'approche) en fonction des cas rencontrés pourrait également être investiguée.

Concernant la deuxième approche, un autre axe de développement concerne la prise en compte de phénomènes non-linéaires au niveau du PSE. La méthodologie de construction du modèle simplifié de PSE pour des cas de chargement connus ici illustrée en élasticité linéaire pourrait être étendue à la prise en compte de phénomènes de plasticité voire de rupture. Pour ce faire, on peut s'inspirer des approches s'appuyant par exemple sur la *Nonuniform Transformation Field Analysis* (NTFA) [Michel et Suquet, 2003, Michel et Suquet, 2004, Michel et Suquet, 2009, Roussette *et al.*, 2009] ou encore sur la méthodologie de construction d'une loi de comportement simplifiée pour des trajets de chargements donnés à partir d'une loi de comportement complexe pour

les composites à matrice céramique proposée dans [Baranger, 2013, Friderikos et Baranger, 2016].

On notera enfin que ces travaux peuvent être étendus à la modélisation d'autres éléments de connexion localisés comme les rivets par exemple.

4 Modèle simplifié de contact-frottant pour les câbles d'ancrage

Les structures composées de fils ou de fibres longues sont très répandues en ingénierie mécanique. Les câble d'ancrage de structures *off-shore*, les câbles électriques, les haubans de ponts suspendus, les matériaux textiles comme les sangles sont des exemples typiques. Le comportement mécanique de ces structures est largement influencé par les phénomènes de contact frottant à l'échelle des fibres/fils qu'il convient de prendre en compte afin de prédire leur tolérance à l'endommagement ou à la fatigue. Malgré les progrès remarquables réalisés dans le domaine de la simulation et des moyens de calcul, les analyses à l'état limite prenant en compte différentes sources d'incertitudes, les études de sensibilité ou d'optimisation de paramètres nécessitent des modèles robustes et efficaces.

Dans le cadre de la thèse de F. Bussolati dirigée par O. Allix et en collaboration avec l'IFP Energies nouvelles, on s'intéresse à **la tenue en fatigue de lignes d'ancrage de structures éoliennes *offshore***.

➜ Points de blocage

Les câbles d'ancrage comportant plus d'une centaine de fils disposés en spirale sur plusieurs couches, un calcul de fatigue à l'échelle du fil décrivant l'ensemble des interfaces de contact frottant est hors de portée. Une structure off shore *est en principe dimensionnée en considérant plusieurs milliers d'état de mer représentant chacune des fenêtres stationnaires de 3 heures de hauteur de vague. Aussi, dans ce contexte, la proposition d'un* ***modèle simplifié de câble*** *est une nécessité.*

➜ Revue (non exhaustive) des modèles simplifiés de câbles multi-spiralés

Dans le cadre de l'élasticité linéaire, des méthodes d'homogénéisation pour déterminer les propriétés élastiques effectives de câbles d'acier composés de plusieurs fils ou torons élémentaires disposés en spirale ont été proposées (voir p. ex. la modélisation analytique du comportement axial en élasticité dans [Cartraud et Messager, 2006, Ghoreishi *et al.*, 2007a, Ghoreishi *et al.*, 2007b, Messager et Cartraud, 2008] et les améliorations proposées dans [Frikha *et al.*, 2013, Treyssède *et al.*, 2013]). L'extension à la prise en compte de frottements internes entre les fils ou torons ne semble cependant pas évidente. Aussi, afin de réduire le coût de calcul à l'échelle du fil, **un choix classique de modélisation des câbles multi-fils consiste à représenter chaque fil par un modèle poutre** en supposant que la déformation des sections de chaque fil est négligeable. Les résultats de ce type de modèle sont en bon accord avec ceux obtenus par des modèles volumiques ainsi qu'avec les résultats expérimentaux (voir p. ex. [Lalonde *et al.*, 2017]). Bien que le coût de calcul soit amélioré grâce à la diminution de la taille du problème par rapport à un modèle volumique, il reste néanmoins prohibitif pour mener des calculs de fatigue, les étapes de détection du contact en grands glissements prenant un temps très important.

Le traitement du contact poutre-poutre donne lieu à des algorithmes de contact très spécifiques. Les travaux se distinguent entre autres selon leur capacité à traiter le cas de contact ponctuel ou linéique (voire auto-contact) entre poutres, à prendre en compte des sections de poutre non-circulaires, à prendre en compte le frottement ou non, à détecter le contact sur la surface extérieure des poutres afin de rendre compte par exemple des effets de torsion ou de flexion dus au frottement, à obtenir une variation régulière de la normale de contact et, de façon générale, une certaine « régularité » de la détection du contact.

Le contact sans frottement en grands glissements entre poutres non-parallèles à section circulaire a été proposé à l'origine dans [Wriggers et Zavarise, 1997]. Dans ces travaux, la définition de la normale ne privilégie par une poutre par rapport à l'autre et leur accorde un rôle symétrique. Ces travaux sont étendus au contact frottant dans [Zavarise et Wriggers, 2000] et au contact de poutres à section carré dans [Litewka et Wriggers, 2002].
Dans [Durville, 2012], la détection du contact est réalisée par l'intermédiaire d'une géométrie intermédiaire (« médiane ») définie dans la zone potentielle de contact et construite sans privilégier une géométrie en contact par rapport à l'autre. Cette formulation permet le traitement robuste de problèmes complexes, comme celui de la simulation de la réalisation d'un nœud en calcul implicite.
Dans [Konyukhov et Schweizerhof, 2010], un système local de coordonnées basé sur la *Closest Point Projection* (CPP) permet de définir la cinématique de contact sous forme covariante. L'approche permet de prendre en compte les moments induits par les rotations relatives des poutres en contact frottant mais reste dédiée au cas particulier du contact ponctuel. Des améliorations sont proposées dans [Konyukhov *et al.*, 2018]. A ce sujet, une méthode unifiée pour traiter à la fois le contact ponctuel et le contact linéique est proposée dans [Meier *et al.*, 2017, Meier *et al.*, 2018]. La prise en compte de ces interactions de rotation des sections des poutres dues au frottement est également traitée pour des sections arbitraires dans [Neto *et al.*, 2016, Neto *et al.*, 2017], respectivement pour le contact frottant et non frottant, en s'appuyant sur une paramétrisation des surfaces des poutres par des coordonnées convectives.
Dans le but d'introduire une certaine « régularité » à la cinématique de contact, les travaux décrits dans [Weeger *et al.*, 2017] propose l'utilisation de l'IGA afin de décrire la géométrie des poutres en contact par des NURBS et s'appuie sur une méthode de collocation pour intégrer la formulation faible. L'approche permet de pallier aux difficultés induites par les méthodes de discrétisation non régulière (comme la méthode classique des éléments finis), et confère une certaine robustesse à la méthode de résolution.

Un point commun à ces approches est leur capacité à traiter les grands glissements entre poutres en contact. Cependant, l'étape de détection du contact dans ce cadre très général est extrêmement coûteuse. **Dans de nombreuses situations, la détection du contact en grands glissements n'est pas nécessaire même si des grands déplacements et grandes rotations à l'échelle de la structure doivent être pris en considération.** C'est le cas par exemple pour les matériaux textiles ou pour les câbles multi-fils lorsque le rapport du diamètre des fils par rapport au rayon de courbure reste faible au cours d'une sollicitation de flexion (voir p. ex. la détermination des glissements entre fils dans un câble de 15 mm par corrélation d'image dans [Jan *et al.*, 2014]).

Dans le cadre de la thèse de F. Bussolati dirigée par O. Allix et en collaboration avec l'IFP Energies nouvelles, **une formulation de contact frottant poutre-poutre en petits glissements mais grandes rotations** est proposée pour décrire le comportement des **contacts localisés entre fils non parallèles** au sein d'un câble multi-spiralé [Guidault *et al.*, 2019]. A partir d'un calcul global sous le logiciel DeepLines Wind™ s'appuyant sur une modélisation poutre des câbles, les historiques de courbure et

de tension sont alors utilisés comme conditions limites pour un calcul local sous Abaqus™ d'un tronçon de câble. Cette approche descendante a été validée et permet alors de vérifier la tenue en fatigue des tronçons de câble les plus sollicités. Le **PREPRINT 7** de l'article [Bussolati *et al.*, 2020] présente un modèle simplifié permettant de réduire le temps d'un calcul local. Il s'appuie sur le fait que bien que le tronçon de câble puisse subir des grands déplacements et grandes rotations, les niveaux de courbure rencontrés en pratique permettent de faire l'hypothèse de petits glissements entre les fils. Cette formulation de contact frottant poutre-poutre en petits glissements mais grandes rotations a ainsi été proposée pour décrire le comportement des contacts localisés entre fils non parallèles qui sont les plus critiques (près de 6000 contacts localisés pour une longueur de câble de 580 mm). **Implémenté sous la forme d'un élément utilisateur dans Abaqus™**, cet élément de contact localisé supprime les étapes coûteuses de recherche de contact permettant ainsi une réduction importante du coût de calcul.

La cinématique de contact et la paramétrisation utilisée dans cette formulation de contact poutre-poutre en petits glissements sont présentées ci-après. L'approche est illustrée dans le cas du contact non frottant sur des exemples académiques pour lesquels des résultats analytiques existent. Le cas du contact frottant incluant la prise en compte des moments induits par les rotations relatives des poutres en contact frottant est développé dans la thèse de F. Bussolati [Bussolati, 2019] et illustré dans le **PREPRINT 7** de l'article [Bussolati *et al.*, 2020].

➜ Illustration : Contact poutre-poutre en petits glissements et rotations finies

La localisation des points de contact dans une structure composée de fils ou de fibres est généralement connue au moins pour une configuration ou géométrie nominale ou de référence. Il est par exemple facile de définir le pattern de points de contact ponctuel dans un câble multi-spiralé à partir d'opérations géométriques triviales sur la géométrie nominale.

On suppose que les positions $\underline{X}_1$ et $\underline{X}_2$ des points qui minimisent la distance entre les axes des poutres sont connues pour une configuration initiale non déformée (voir **Figure 3.20**). Les maillages éléments finis des poutres peuvent être aisément définis de façon à avoir des nœuds en ces positions $\underline{X}_1$ et $\underline{X}_2$. Les positions courantes de ces points sont respectivement notées $\underline{x}_1$ et $\underline{x}_2$.

Sous l'hypothèse de petits glissements, même si les poutres peuvent être soumises à des grands déplacements ou grandes rotations, la courbure au point $\hat{\underline{x}}_1$ (resp. $\hat{\underline{x}}_2$) qui minimise la distance entre les deux poutres dans la configuration courante, est supposée être très proche de celle au point $\underline{x}_1$ (resp. $\underline{x}_2$). En d'autres termes, on suppose que *la courbure varie peu au voisinage des points* $\underline{x}_1$ *et* $\underline{x}_2$ *et que les poutres sont localement droites.* La normale de contact est ainsi définie par :

$$n \overset{def}{:=} \frac{\underline{t}_1(\underline{x}_1) \wedge \underline{t}_2(\underline{x}_2)}{\| \underline{t}_1(\underline{x}_1) \wedge \underline{t}_2(\underline{x}_2) \|} \tag{3.10}$$

Cette définition de la normale étant posée, on définit alors les points $\hat{\underline{x}}_1$ and $\hat{\underline{x}}_2$ minimisant la distance entre les deux poutres de la façon suivante :

$$\begin{cases} \hat{\underline{x}}_1 \overset{def}{:=} \underline{x}_1 + \xi^1 \underline{t}_1(\underline{x}_1) \\ \hat{\underline{x}}_2 \overset{def}{:=} \underline{x}_2 - \xi^2 \underline{t}_2(\underline{x}_2) \end{cases} \tag{3.11}$$

où ξ^1 et ξ^2 sont les composantes contravariantes du saut de déplacement tangentiel « apparent » entre

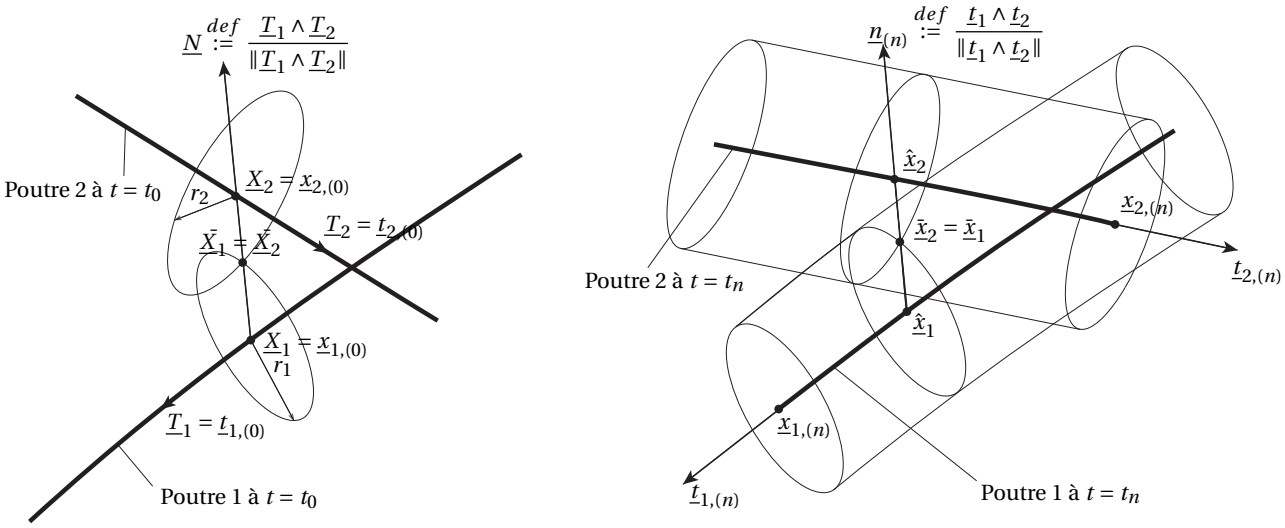


Figure 3.20 – Contact poutre-poutre en configuration initiale à $t = t_0$ (à gauche) et configuration à $t = t_n$ (à droite)

les nœuds $\underline{x}_1$ et $\underline{x}_2$ défini par :

$$\hat{\underline{g}}_T = \Pi\left(\underline{x}_2 - \underline{x}_1\right) = \xi^1 \underline{t}_1(\underline{x}_1) + \xi^2 \underline{t}_2(\underline{x}_2)$$

et où $\Pi(\cdot) = (\mathbf{I}_d - \underline{n} \otimes \underline{n})(\cdot)$ est l'opérateur de projection sur le plan « tangent » local de normale $\underline{n}$ (**Figure 3.21**). Le saut tangentiel « apparent » $\hat{\underline{g}}_T$ en configuration courante ne doit pas être confondu avec la fonction de saut de déplacement tangentiel « cumulé » qui évolue au fur et à mesure que le plan tangent change au cours du processus de déformation et qui décrit la trajectoire du point de contact. Les composantes covariantes et contravariantes sont reliées par le tenseur métrique $\boldsymbol{M}$ (avec

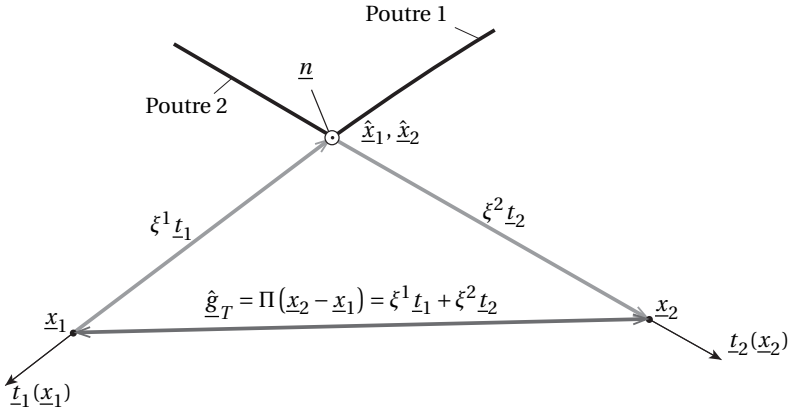


Figure 3.21 – Saut de déplacement tangentiel apparent $\hat{\underline{g}}_T$ en vue projetée dans le plan tangent de contact de normale $\underline{n}$

$M_{ij} = \underline{t}_i \cdot \underline{t}_j$) comme suit :

$$\begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{M}^{-1} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{M}^{-1} \begin{pmatrix} \left(\underline{x}_2 - \underline{x}_1\right)^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \left(\underline{x}_2 - \underline{x}_1\right)^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{t}_1 \\ \underline{t}_2 \end{pmatrix} \tag{3.12}$$

On notera que les composantes contravariantes ξ^1 et ξ^2 dépendent de $\underline{x}_1$, $\underline{x}_2$ et des vecteurs directeurs $\underline{t}_1$, $\underline{t}_2$. Le saut de déplacement peut ainsi être décomposé en une partie normale et une partie

tangentielle :

$$\underline{g} = \underline{x}_2 - \underline{x}_1 - (r_1 + r_2)\,\underline{n} = g_N\,\underline{n} + \underline{\hat{g}}_T \tag{3.13}$$

avec :

$$\begin{cases} g_N &= \left(\underline{x}_2 - \underline{x}_1\right)\cdot\underline{n} - (r_1 + r_2) = \left(\underline{\bar{x}}_2 - \underline{\bar{x}}_1\right)\cdot\underline{n} \\ \underline{\hat{g}}_T &= \Pi\left(\underline{x}_2 - \underline{x}_1\right) = \xi^1\,\underline{t}_1(\underline{x}_1) + \xi^2\,\underline{t}_2(\underline{x}_2) \end{cases}$$

Le vecteur directeur $\underline{t}$ d'une poutre au point $\underline{x}$ est défini explicitement en fonction de la rotation $\boldsymbol{R}(\underline{x})$ et du vecteur directeur $\underline{T}$ en configuration initiale. On notera que le vecteur directeur $\underline{t}$ ne reste pas nécessairement tangent à la fibre neutre de la poutre en configuration déformée due à la déformation de cisaillement. Pour l'application câble visée, les fils sont relativement élancés par rapport au niveau de courbure atteint et l'on peut raisonnablement négliger l'énergie de déformation de cisaillement. Différentes paramétrisations des rotations peuvent être choisies [Spring, 1986]. Dans ce travail, on retient le vecteur rotation (spatial) $\underline{\phi}$ comme utilisé dans Abaqus™, ainsi :

$$\underline{t}_1 = \underline{t}_1(\underline{x}_1) = \boldsymbol{R}(\underline{\phi}(\underline{x}_1))\,\underline{T}_1$$

La définition d'un vecteur directeur $\underline{t}$ d'une poutre à partir d'une rotation locale est cruciale dans l'application câble visée pour laquelle une variation régulière de celui-ci, et donc de la normale $\underline{n}$, est nécessaire. En effet, la définition de la normale (3.10) dépend ici uniquement des vecteurs directeurs $\underline{t}_1$ et $\underline{t}_2$ et donc des rotations finies aux points $\underline{x}_1$ et $\underline{x}_2$. Les points $\underline{\hat{x}}_1$ et $\underline{\hat{x}}_2$ minimisant la distance entre les poutres sont définis ensuite par (3.11). Cela constitue la différence principale par rapport aux formulations de contact en grands glissements pour lesquelles les nœuds $\underline{\hat{x}}_1$ et $\underline{\hat{x}}_2$ sont d'abord recherchés (en résolvant un problème non-linéaire) pour définir ensuite la normale de contact. Dans ces formulations, sans techniques de « lissage » particulières (voir p. ex. [Wriggers, 2006, Weeger *et al.*, 2017]), la normale de contact $\underline{n}$ dépend explicitement de l'interpolation éléments finis de la géométrie de la poutre et présente des changements discontinus lorsque l'appariement des éléments en contact change. Dans la formulation en petits glissements proposée ici, la normale de contact $\underline{n}$ varie de façon continue avec les vecteurs directeurs des poutres, $\underline{t}_1$ et $\underline{t}_2$, par définition, ce qui assure un suivi robuste de la normale tout au long du calcul.

Remarque 2 *Les vecteurs directeurs $\underline{t}_i = \boldsymbol{R}(\underline{\phi}(\underline{x}_i))\,\underline{T}_i$ et la normale $\underline{n}$ définissent une base mobile (champ de vecteur invariant à gauche) sur le groupe de Lie $SO(3)$ (groupe des rotations). Les vecteurs $\underline{T}_i$ et la normale $\underline{N}$ de la configuration initiale définissent une base de l'algèbre de Lie $SO(3)$, c'est-à-dire l'espace vectoriel $so(3)$ des matrices 3×3 anti-symétriques (rotations infinitésimales). Les composantes contravariantes ξ^i sont les composantes dans la base mobile du saut de déplacement apparent, $\underline{\hat{g}}_T = \Pi\left(\underline{x}_2 - \underline{x}_1\right) = \xi^i\,\underline{t}_i$, à savoir un champ de vecteur de $SO(3)$.*

Les points matériels $\underline{\bar{x}}_{1,(n)}$ et $\underline{\bar{x}}_{2,(n)}$ qui étaient en contact dans la configuration à t_n sont transportés dans la configuration à t_{n+1} (**Figure 3.22**). Ces nouvelles positions sont notées respectivement $\underline{\bar{x}}_{1,(n,n+1)}$ and $\underline{\bar{x}}_{2,(n,n+1)}$ où le premier indice n fait référence à la position du point matériel en configuration n et le second indice $n+1$ fait référence à la configuration dans laquelle le point matériel est transporté. Les points en contact de la configuration courante à t_{n+1} sont notés $\underline{\bar{x}}_{1,(n+1)}$ et $\underline{\bar{x}}_{2,(n+1)}$ ou simplement $\underline{\bar{x}}_1$ et $\underline{\bar{x}}_2$ en **Figure 3.22** pour alléger les notations.

Pour chaque poutre, pendant l'incrément de temps $\Delta t_{n+1} = t_{n+1} - t_n$, la distance entre le point matériel précédemment en contact à la configuration n et le point de contact courant à la configuration $n+1$ sont définis par :

$$\begin{cases} \underline{d}_1^{\Delta} &= \underline{\bar{x}}_{1,(n,n+1)} - \underline{\bar{x}}_{1,(n+1)} \\ \underline{d}_2^{\Delta} &= \underline{\bar{x}}_{2,(n,n+1)} - \underline{\bar{x}}_{2,(n+1)} \end{cases} \tag{3.14}$$

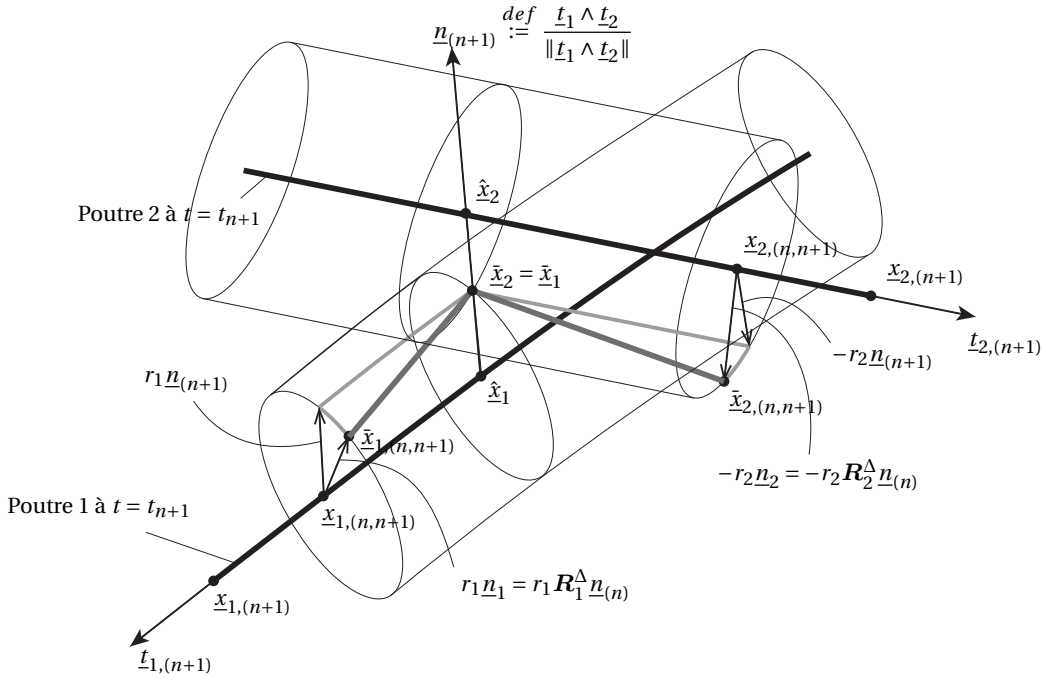


Figure 3.22 – Incrément de saut de déplacement tangentiel à $t = t_{(n+1)}$

Comme illustré en **Figure 3.22**, la normale de contact courante est définie par :

$$\underline{n}_{(n+1)} \overset{def}{:=} \frac{\underline{t}_{1,(n+1)} \wedge \underline{t}_{1,(n+1)}}{\|\underline{t}_{1,(n+1)} \wedge \underline{t}_{2,(n+1)}\|}$$

où $\underline{t}_{i,(n+1)} = \underline{t}_i(\underline{x}_{i,(n+1)})$ représente le vecteur directeur courant de la poutre i au point matériel $\underline{x}_{i,(n+1)}$.

L'incrément de saut de déplacement tangentiel $\underline{g}_T^{\Delta}$ est défini comme la projection de la différence entre $\underline{d}_2^{\Delta}$ et $\underline{d}_1^{\Delta}$ dans le plan tangent de contact courant à la configuration $n+1$ (**Figure 3.23**) :

$$\underline{g}_T^{\Delta} = \left(\mathbf{I}_d - \underline{n}_{(n+1)} \otimes \underline{n}_{(n+1)}\right)\left(\underline{d}_2^{\Delta} - \underline{d}_1^{\Delta}\right) = \left(\mathbf{I}_d - \underline{n}_{(n+1)} \otimes \underline{n}_{(n+1)}\right)\left(\bar{\underline{x}}_{2,(n,n+1)} - \bar{\underline{x}}_{1,(n,n+1)}\right)$$

La notation $\underline{g}_T^{\Delta}$ pour l'incrément est ici préférée à la notation $\Delta \boldsymbol{g}_T$ (or $\delta \underline{g}_T$) qui font référence habituellement à la linéarisation (ou variation) de la fonction saut.
Sous l'hypothèse de petits glissements et de petites rotations relatives des sections de poutres, on considère que le terme $r_1\underline{n}_1$ (resp. $r_2\underline{n}_2$) peut être approché en transportant la normale $\underline{n}_{(n)}$ de contact à t_n sur la configuration à t_{n+1} à l'aide de l'incrément de rotation $\underline{\Phi}_1^{\Delta}$ au noœud $\underline{x}_1$ (resp. $\underline{x}_2$) :

$$\underline{n}_1 = \boldsymbol{R}(\underline{\Phi}_1^{\Delta})\,\underline{n}_{(n)} = \boldsymbol{R}_1^{\Delta}\,\underline{n}_{(n)}$$

Avec les notations de la **Figure 3.22** et de la **Figure 3.23**, on en déduit que :

$$\begin{aligned} \underline{g}_T^{\Delta} &= \left(\mathbf{I}_d - \underline{n}_{(n+1)} \otimes \underline{n}_{(n+1)}\right)\left[\left(\xi^i_{(n+1)} - \xi^i_{(n)}\right)\underline{t}_{i,(n+1)} - r_i\,\underline{n}_i\right] \\ &= \left(\xi^i_{(n+1)} - \xi^i_{(n)}\right)\underline{t}_{i,(n+1)} - \left(\mathbf{I}_d - \underline{n}_{(n+1)} \otimes \underline{n}_{(n+1)}\right) r_i\,\underline{n}_i \end{aligned}$$

avec sommation sur les indices répétés i. Cette définition de $\underline{g}_T^{\Delta}$ revient à approcher l'évolution de la trajectoire du point de contact sur les surfaces extérieures des poutres en contact par des portions de

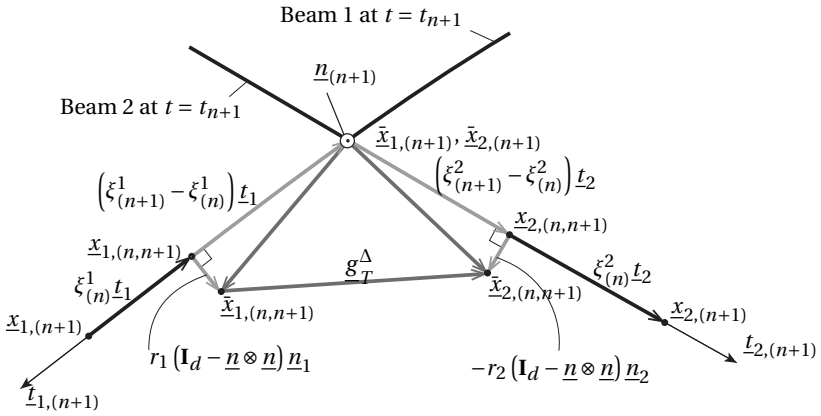


Figure 3.23 – Vue dans le plan tangent de contact à $t = t_{n+1}$ de l'incrément de saut de déplacement tangentiel $\underline{g}^{\Delta}_T$

lignes droites projetées dans le plan de contact courant $n+1$. Plus le pas de temps diminue, meilleure est l'approximation du trajet du point de contact sur chaque poutre.

Cette definition de $\underline{g}^{\Delta}_T$ prend donc en compte les rotations relatives (roulement) entre les poutres. Le premier terme $\left(\xi^i_{(n+1)} - \xi^i_{(n)}\right)\underline{t}_i$ correspond au glissement relatif entre les axes des poutres et le terme $\left(\mathbf{I}_d - \underline{n}\otimes\underline{n}\right) r_i \underline{n}_i$ caractérise le glissement dans la direction circonférentielle sur la surface extérieure de chacune des poutres dû au roulement. Ce dernier terme n'est pas pris en compte dans [Zavarise et Wriggers, 2000] mais considéré dans [Neto *et al.*, 2017]. Comme $\mathbf{I}_d - \underline{n}_{(n+1)} \otimes \underline{n}_{(n+1)} = \underline{t}_{i,(n+1)} \otimes \underline{t}^i_{(n+1)} = \underline{t}^i_{(n+1)} \otimes \underline{t}_{i,(n+1)}$, on montre aisément que l'on a :

$$\begin{aligned} \underline{g}^{\Delta}_T &= \left(\xi_j - \xi_{j,(n)} - r_i\, \underline{n}_i \cdot \underline{t}_j\right)\underline{t}^j = g^{\Delta}_{T,j}\,\underline{t}^j \\ &= \left[\xi^j - \xi^j_{(n)} - r_i\, \underline{n}_i \cdot \underline{t}^j\right]\underline{t}_j = g^{\Delta,j}_T\,\underline{t}_j \end{aligned}$$

où l'indice $n+1$ a été supprimé pour alléger les notations. La fonction saut de déplacement tangentiel en configuration $n+1$ est défini par :

$$\underline{g}_{T,(n+1)} = \underline{g}^{\Delta}_T + \underline{g}_{T,(n,n+1)} \tag{3.15}$$

La façon de transporter la quantité $\underline{g}_{T,(n)}$ dans la configuration $n+1$ (notée $\underline{g}_{T,(n,n+1)}$) est discutée dans [Neto *et al.*, 2017]. Ainsi, on peut proposer le transport suivant :

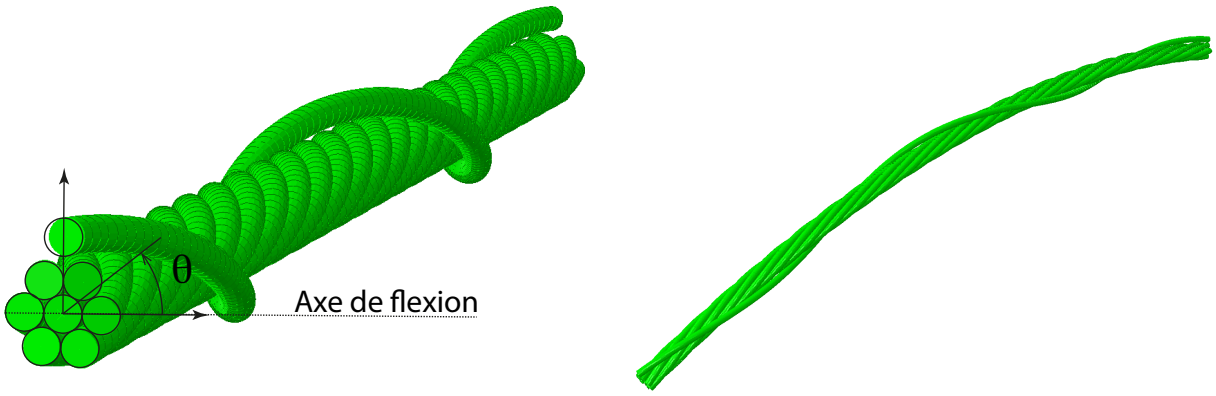
$$\underline{g}_{T,(n,n+1)} = \boldsymbol{R}^{\Delta}\underline{g}_{T,(n)}$$

où $\boldsymbol{R}^{\Delta}$ est le tenseur de rotation reliant la transformation de $\underline{n}_{(n)}$ à $\underline{n}_{(n+1)}$. En fait, la fonction saut (3.15) étant utilisée pour l'intégration du comportement de contact-frottant, on stocke pour des raisons pratiques dans $\underline{g}_{T,(n)}$ le glissement élastique cumulé (tendance au glissement au pas n précédent) et non le glissement cumulé total. On pourra se référer à [Neto *et al.*, 2017] pour plus de détails. Ce choix mérite cependant des investigations plus poussées.

La contribution à la formulation faible des conditions de contact ainsi que sa linéarisation sont détaillées dans [Bussolati, 2019]. L'intégration du comportement de frottement est prise en compte

classiquement par une analogie élasto-plastique de la loi de frottement avec un algorithme de retour radial et un schéma d'intégration d'Euler implicite de la loi d'évolution du glissement (plastique/anélastique) [Wriggers, 2006]. **Cet élément de contact à deux nœuds est intégré sous forme d'un élément utilisateur dans Abaqus™.**

Afin d'illustrer les performances de l'élément de contact proposé, on s'intéresse au cas test académique d'un câble composé d'un fil central, d'une couche de six fils en hélice et d'un unique fil externe enroulé en spirale autour de l'ensemble comme illustré en **Figure 3.24(a)**. Le cas test est similaire à celui décrit dans le PREPRINT 7 à l'exception du fait qu'ici les contacts sont sans frottement. Le fil extérieur est en contact ponctuel avec la couche de six fils. L'élément utilisateur (UELEM) de contact à deux nœuds est introduit pour chacun de ces contacts ponctuels. Les contacts linéiques entre la couche de 6 fils et le fil central sont également pris en compte de façon discrète à l'aide de l'UELEM de contact. En effet, la tangente aux fils de cette couche n'étant pas parallèle à l'axe du fil centrale la normale de contact selon (3.10) peut être définie et l'on peut ainsi utiliser la formulation de contact entre poutres non parallèles proposée. Les contacts linéiques internes à la couche de 6 fils ne sont pas pris en compte dans cette simulation car ils ont peu d'effets sur la solution. Toutes les propriétés



(a) Configuration non déformée

(b) Configuration déformée pour la courbure maximale (au pas 3 du calcul)

Figure 3.24 – Cas test de câble en tension-flexion

des fils sont similaires (voir **Tableau 3.2**).

Rayon des fils	$2.15\,mm$
Angle d'armage	$12°$
Module de Young	$70\,GPa$
Coefficient de Poisson	0.3

Tableau 3.2 – Propriétés des fils

La cinématique du fil central est imposée (par des MPC codés dans une routine Fortran) de façon à imposer une déformation axiale ε uniforme et une courbure κ constante au câble (voir **Tableau 3.3**).

Les sections extrêmes du câble sont contraintes à rester plane par un couplage cinématique aux nœuds « maître » des extrémités du fil central. Les composantes de déplacement et de rotation suivant

Pas de chargement	ε	κ (mm^{-1})
1	$1.e-3$	0.
2	$1.e-3$	$5.e-5$
3	$1.e-3$	$1e-3$
4	$1.e-3$	0.

Tableau 3.3 – Valeurs de déformation axiale ε et de courbure κ imposées au fil central du câble

la direction radiale des nœuds des extrémités des fils ne sont pas contraintes de façon à permettre à l'angle d'armage des fils de varier. On peut montrer qualitativement, à l'aide d'une solution simple analytique d'un fil enroulé autour d'un cylindre, qu'en faisant démarrer et finir le modèle du fil externe en $\theta = \pm\frac{\pi}{2}$ (voir **Figure 3.24(a)**, ces conditions limites ne génèrent pas ou peu d'effets de bord [Bussolati, 2019]. Il n'y a en effet pas de glissement en ces points, le glissement maximal étant sur l'axe de flexion, en $\theta = 0$ et π.

Un calcul de référence est obtenu par un modèle (suffisamment discrétisé) représentant les surfaces extérieures de chaque fil à l'aide d'éléments surfaciques permettant d'utiliser un algorithme de contact *surface-to-surface* dans Abaqus™. Ces éléments surfaciques sont reliés rigidement dans chaque section du fil par des MPC aux nœuds de l'axe du fil de façon à obtenir une cinématique poutre d'Euler-Bernoulli pour le fil (voir **Figure 3.25**). Pour comparaison, un modèle utilisant l'algorithme de contact *edge-to-edge* (contact poutre-poutre en grands glissements) d'Abaqus™ est également proposé.

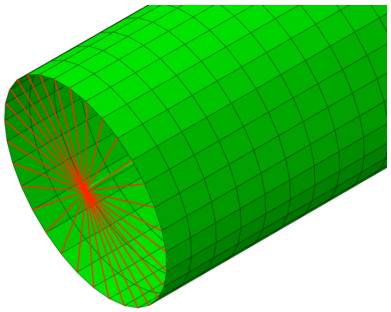
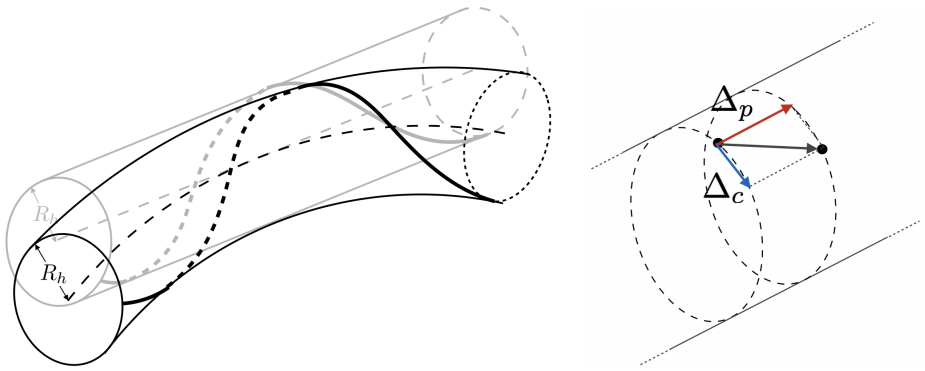


Figure 3.25 – Connexion rigide par MPC des nœuds de chaque section du fil au nœud correspondant de l'axe central du fil pour le modèle de référence modélisant explicitement la surface extérieure du fil par des éléments surfaciques

Afin d'analyser les résultats, on considère les déplacements relatifs du fil externe par rapport à un cylindre de référence dont le rayon R_h correspond au rayon de l'hélice définissant l'axe générateur du fil extérieur (voir **Figure 3.26(a)**). La cinématique de ce cylindre de référence est celle d'une poutre d'Euler-Bernoulli (énergie de déformation négligée, les sections droites rigides restent perpendiculaires à la fibre neutre du cylindre/poutre) dont on impose les valeurs de déformation axiale et de courbure comme données dans le **Tableau 3.3**. Le déplacement tangentiel relatif du fil extérieur par rapport à la déformée de ce cylindre de référence est décomposé en une composante axiale Δ_p et une composante circonférentielle Δ_c (voir **Figure 3.26(b)**). Les valeurs de coefficient de pénalisation pour le contact normal des trois modèles sont donnés en **Tableau 3.4** et choisies de façon à obtenir le même niveau d'interpénétration au contact à l'issue du premier pas de chargement de mise en tension.



(a) Cylindre de référence

(b) Décomposition du déplacement tangentiel relatif

Figure 3.26 – Cylindre de référence dont le rayon R_h correspond au rayon de l'hélice définissant l'axe générateur du fil extérieur et déplacement tangentiel relatif du fil extérieur par rapport à la déformée du cylindre de référence

Modèle avec l'UELEM proposé	$2.e+3\,N/mm$
Modèle *edge-to-edge*	$1.e+3\,N/mm$
Modèle *surface-to-surface* (référence)	$1.e+4\,N/mm^3$

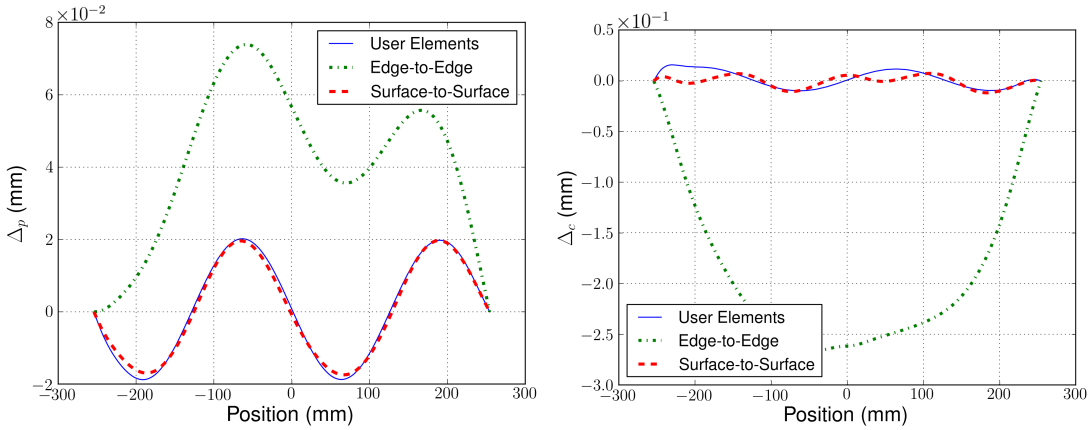
Tableau 3.4 – Valeurs des coefficients de pénalisation utilisées pour les trois modèles

Les évolutions des composantes de déplacement relatif Δ_p et Δ_c le long de l'abscisse curviligne du fil externe sont données en **Figure 3.27** pour le modèle avec l'élément de contact utilisateur proposé, le modèle de référence utilisant l'algorithme de contact *edge-to-edge* et le modèle de référence utilisant l'algorithme de contact *surface-to-surface*. Les déplacements relatifs obtenus par le modèle utilisant l'UELEM de contact sont globalement en meilleur accord avec le modèle de référence que ceux obtenus par le modèle *edge-to-edge*. En termes de temps CPU, le *speed-up* est d'environ 135 (18.4 *s* et 2481.9 *s* repectivement pour le modèle avec l'élément de contact utilisateur proposé et le modèle *edge-to-edge*). Comme attendu, la formulation de contact poutre-poutre en petits glissements proposée permet d'obtenir un gain en temps CPU significatif par rapport aux formulations de contact en grands déplacements.

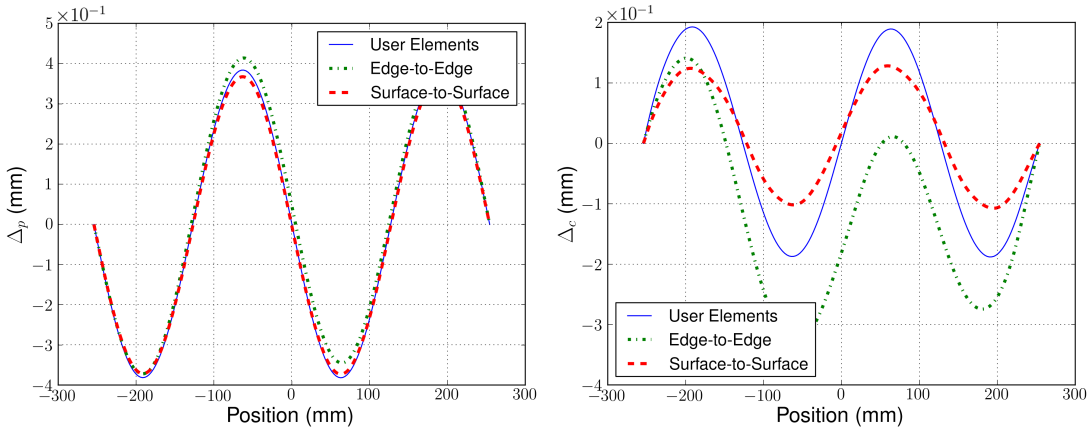
➜ Bilan et perspectives

La formulation proposée de contact entre poutres non parallèles en petits glissements permet une réduction significative des coûts de calcul par rapport à une formulation en grands glissements (gain observé en pratique de l'ordre d'un facteur 25 sur des cas simples). L'implémentation de cet élément de contact a été réalisée sous la forme d'un **élément utilisateur** dans Abaqus™ et peut être aisément déployée dans un autre code de calcul. Les résultats obtenus sur des applications de câbles multi-spiralés typiques de ceux utilisés pour les systèmes d'ancrage d'éolienne flottante *off shore* sont en très bon accord avec les résultats de modèles plus évolués utilisant une formulation de contact *surface-to-surface* en grands glissements. **Un autre point fort de la formulation est l'évolution régulière de la normale de contact**, variant « continûment » avec la rotation des nœuds de l'élément de contact, qui confère au calcul une **grande robustesse et une bonne définition des efforts de contact**.

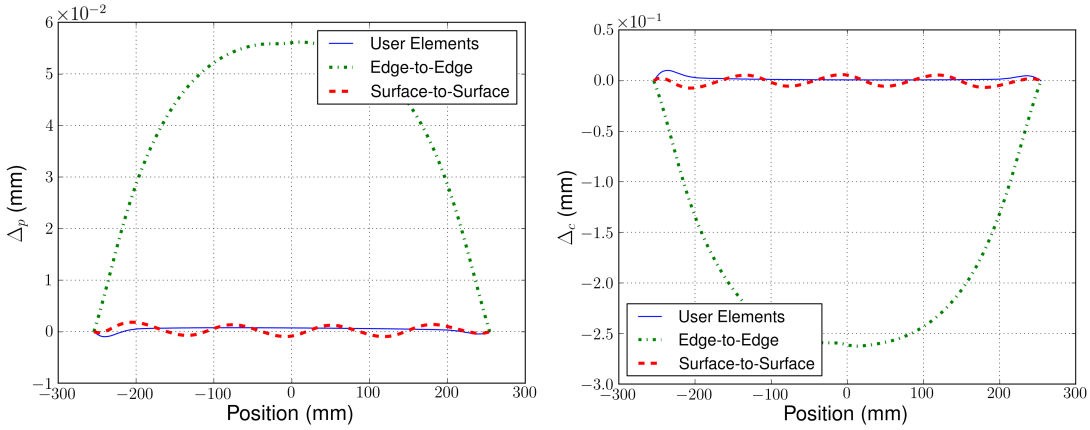
L'élément utilisateur de contact pourrait bien entendu être utilisé dans d'autres applications



(a) *Pas de chargement 2* - Δ_p (b) *Pas de chargement 2* - Δ_c



(c) *Pas de chargement 3* - Δ_p (d) *Pas de chargement 3* - Δ_c



(e) *Pas de chargement 4* - Δ_p (f) *Pas de chargement 4* - Δ_c

Figure 3.27 – Evolutions des composantes de glissement relatif Δ_p et Δ_c le long du fil externe pour les trois modèles aux différents pas de mise en flexion

portant sur la modélisation de structures élancées (de type poutre ou plaque), architecturées, composées de fils, de torons ou de fibres longues (câbles électriques, haubans, matériaux textiles...) pour

lesquelles la prise en compte des phénomènes de frottement à l'échelle des fils/fibres est cruciale et dans le cas pratique où l'hypothèse de petits glissements est raisonnable.

A court terme, plusieurs améliorations peuvent être apportées pour la simulation d'un tronçon de câble. La première concerne l'utilisation d'une **méthode de lagrangien ou de lagrangien augmenté afin d'améliorer la précision des conditions de contact**. S'agissant de structures préchargées en tension, une interpénétration des surfaces de contact autorisée par une méthode de pénalisation conduit en effet à de fortes variations de pression de contact. Il est donc important d'améliorer la formulation sur ce point. Le développement d'une méthode de lagrangien pour le contact normal peut se faire à travers l'élément utilisateur dans un code de calcul comme Abaqus™. En revanche, l'implémentation d'une méthode de lagrangien augmenté est moins évidente et peut nécessiter l'utilisation d'un code de calcul plus « ouvert », comme Code_Aster™ par exemple.
Un deuxième point d'amélioration abordé dans [Bussolati, 2019, Bussolati *et al.*, 2020] concerne **l'amélioration des conditions de « périodicité » à imposer sur un tronçon de câble**.
Enfin, il conviendrait de décliner une version valable pour le **cas du contact de poutres non parallèles**. En proposant une nouvelle définition de la normale (3.10) adaptée dans ce cas, les développements de ce nouveau modèle ne devrait pas poser de difficultés particulières.

A plus long terme, concernant la prédiction de la tenue en fatigue de ce type de structures soumises à des chargements complexes, **les temps de calcul doivent cependant encore être réduits par exemple en utilisant les outils de la réduction de modèle (ROM)**. Comme évoqué en fin de **Chapitre 2**, l'application de la réduction de modèle aux problèmes de contact frottant, qui plus est en présence de non-linéarités géométriques, reste une question largement ouverte. De façon générale, **l'application de la ROM aux problèmes d'interfaces mobiles** (front de propagation d'onde en dynamique, front de propagation de fissure, front d'endommagement, front de propagation de zones adhérentes en contact frottement) constitue **un véritable enjeu scientifique**. Dans ce type de cas, la représentation de la solution sous forme de variables séparées temps-espace n'est pas toujours adaptée.
Dans le cas spécifique du contact frottant, des applications de la PGD temps-espace mettent cependant en évidence le contenu multiéchelle de la base réduite spatiale (modes « globaux » de structure et modes « locaux » sur les interfaces de contact) [Giacoma *et al.*, 2015, Giacoma *et al.*, 2016]. Aussi, comme proposé dans [Giacoma *et al.*, 2014], l'utilisation d'**une stratégie de calcul multiéchelle en espace (et pourquoi pas en temps) est cruciale** dans ce type d'application. Le traitement de problèmes de structures en présence d'interfaces multiples de contact frottant a par exemple été traitée de façon robuste et efficace par la méthode de décomposition de domaine mixte multiéchelle basée sur la LATIN, présentée dans le **Chapitre 2** et illustrée dans [Ladevèze *et al.*, 2002, Passieux *et al.*, 2010, Ladevèze *et al.*, 2010, Caignot *et al.*, 2010]. Aussi, **l'application de cette méthode multiéchelle DDM-LATIN combinée à la PGD devrait permettre de traiter efficacement les problèmes de ces milieux fibrés en présence de contact frottant.** On soulignera à ce titre le lien fort de cette méthode avec les méthodes de lagrangien augmenté particulièrement robustes pour traiter les problèmes de contact. Pour la modélisation du contact-frottant avec la X-FEM par exemple, on pourra se référer à [Geniaut *et al.*, 2007, Siavelis *et al.*, 2010] avec une formulation de type lagrangien augmenté ou à [Dolbow *et al.*, 2001, Ribeaucourt *et al.*, 2007] avec la méthode LATIN. S'agissant de milieux architecturés, pour lesquels une décomposition en sous-domaine s'appuyant sur les constituants s'impose, un gain significatif en temps de calcul grâce à la ROM est à attendre. On pourra citer à ce sujet les travaux de [Otaño Aramendi, 2016] qui ont montré l'intérêt des méthodes de ROM pour la simulation de tronçons de câble multi-fils avec conditions de périodicité.

5 Orientations futures

Dans ce chapitre, **des exemples de modèles simplifiés d'interfaces/liaisons localisées** dans les assemblages ont été proposées afin de **prédire en tout premier lieu la réponse globale de la liaison à l'échelle de la structure.** De façon générale, injecter de la connaissance « métier » sur le comportement de la liaison dans les modèles est généralement gage de robustesse et d'efficacité. Le chapitre a permis de montrer que **les outils de réduction de modèle pouvaient également aider l'ingénieur** à faire émerger les « bons mécanismes » dans les cas plus complexes et éventuellement à bâtir des méthodologies permettant de faire évoluer son modèle de liaison. Les modèles proposés ont tous été développés **sous la forme d'éléments utilisateurs facilitant ainsi leur implémentation dans n'importe quel code de calcul commercial** comme Abaqus™, Samcef™ ou MSC Nastran™. Bien que les modèles simplifiés présentés permettent des gains significatifs en temps de calcul (parfois d'un ordre de grandeur), la prise en compte d'un nombre important de chargements complexes sur des temps longs et de sources d'incertitude ou encore l'optimisation de structures nécessitent de développer des solutions de calcul alternatives.

Dans la continuité des travaux de thèse de F. Bussolati, **une premier axe de développement concerne l'application à la simulation de la prédiction de la tenue à la fatigue des câbles d'ancrage d'éolienne flottante dans un contexte industriel**. On notera que dans ce cas d'application, le chargement en tension et courbure du câble est issu de calculs hydrodynamiques en houle irrégulière, et se traduit donc par des séries temporelles non périodiques (voir **PREPRINT 7**). Il s'agirait de **tirer parti des outils de la réduction de modèle** afin de réduire davantage le temps de calcul des simulations sur tronçon métrique de câble à l'échelle du fil sous sollicitations de tension et flexion. Par ailleurs, la **méthode de décomposition de domaine mixte mutliéchelle basée sur la LATIN**, qui exploite naturellement la PGD, devrait permettre de traiter efficacement le contenu « multiéchelle » en espace de ce type de problème mettant en jeu des contacts frottants multiples.
Un deuxième axe concerne l'exploitation et la représentation adaptée de la base de chargement. Une structure *off shore* est en principe dimensionnée en considérant un très grand nombre (plusieurs milliers) de cas de chargement représentant les conditions de vent et de mer pendant une vingtaine d'années. Là encore, les techniques de réduction de modèle doivent permettre d'investiguer le contenu spectral de ces types de chargement et le cas échéant de les représenter sous une forme « adaptée ».
Des discussions sont en cours avec Martin Guiton et Guillaume Enchery de la Direction Physico-chimie et Mécanique appliquées d'IFP Energies nouvelles afin de proposer un sujet de thèse sur ces deux axes de recherche. Le développement des outils de réduction de modèle et de DDM est généralement très intrusif et nécessite l'utilisation d'un code de calcul relativement « ouvert ». Pour ce faire, il est prévu de réaliser une partie de ces développements dans Code_Aster™. Au cours des dernières années, plusieurs thèses au LMT ont été réalisées en collaboration avec EDF R&D, comme par exemple l'implémentation « non-intrusive » d'une méthode locale-globale [Guguin *et al.*, 2016] ou de la DDM mixte basée sur la LATIN [Oumaziz, 2017]. Un autre projet de thèse au LMT est également prévu autour du développement d'outils de réduction de modèle dans Code_Aster™. Aussi, ce nouveau projet de thèse entre le LMT et IFP Energies nouvelles est l'occasion de **renforcer les liens avec l'équipe d'EDF R&D du logiciel Code_Aster™** afin de tirer parti et de mutualiser l'ensemble des développements déjà réalisés ou prévus au sein du LMT.

Enfin, **un autre axe de recherche qui fait l'objet de la thèse en cours de M. Harnafi sous la direction de P.A. Boucard, en collaboration avec Safran Aircraft Engines concerne la prédiction de**

l'usure de douilles d'un système de calage variable d'aubes de redresseur de moteur aéronautique. Une usure excessive des douilles peut en effet conduire à des risques de contact entre rotor et stator à cause du déversement des redresseurs ou provoquer des surcontraintes sur les redresseurs conduisant à des fissures dans la pale ou conduire à des phénomènes de pompage. Avec l'augmentation des intervalles d'inspection, la criticité de l'usure des douilles devient plus importante. L'objectif de la thèse concerne la mise en place d'une méthodologie de modélisation et de simulation permettant de prédire l'état d'usure des douilles en fonction des conditions de chargements et des propriétés (géométries, jeux, matériaux, etc.). Plusieurs objectifs intermédiaires sont visés comme l'identification et la quantification des sources d'usure et l'influence de l'environnement, l'identification des cinétiques d'usure à partir d'essai sur banc et le recalage des modèles et enfin la mise en place de règles de conception permettant de définir les matériaux, les propriétés géométriques et les jeux les plus adaptés à un assemblage défini. Dans ce cas d'application, les paramètres influents et les cycles de chargements étant relativement complexes, il convient de mettre en place dans un premier temps un modèle robuste et efficace des douilles et de l'assemblage du système de calage variable qui soit suffisamment prédictif et améliore les modèles actuels.

Bien qu'un guidage par douille se fasse par contact conforme, **la zone de contact avec l'aube et d'usure dans le cas présent est relativement peu étendue**. En effet, cette usure survient principalement lors de petites corrections de déplacement angulaire (mouvements oscillants de faible amplitude) de l'aube autour d'une position de croisière par le système asservi de calage variable. Aussi, il doit être possible de **proposer un modèle simplifié de douille et de sa cinétique d'usure** à partir d'un modèle plus fin, volumique. Là encore, cette simplification pourra **s'appuyer sur les outils de réduction de modèle**.

Une fois recalé par rapport aux résultats sur banc d'essai, il s'agira de valider le modèle simplifié à partir de données issues des retours d'expérience de la flotte en service et des mesures en vol des commandes des actionneurs du dispositif d'inclinaison des aubes.

4 Conclusions et perspectives

A TRAVERS CE MÉMOIRE, des **méthodes de couplage de modèles, de décomposition de domaine et de modélisation de liaisons localisées au sein des assemblages** ont été présentées pour le calcul de structures à grand nombre d'inconnues ou l'analyse de l'influence de phénomènes localisés sur le comportement global d'une structure. Dans ces approches, la notion d'« interface » au sens large est omniprésente : interface entre sous-domaines, interface de couplage, interface en tant qu'élément de jonction, de liaison ou d'interaction dans les assemblages. La majorité des travaux présentés ont été menés dans **un contexte industriel et un environnement logiciel très cadrés**, dans le souci de **fournir à l'ingénieur des outils de simulation et des démarches d'aide à la modélisation** s'intégrant au mieux dans ses processus de dimensionnement et dans les codes éléments finis commerciaux (Abaqus™, Samcef™, MSC Nastran™, Code_Aster™...) couramment employés en calcul des structures.

Face à la complexité croissante des modèles, afin de décrire des phénomènes toujours plus élaborés (couplages entre physiques, sollicitations complexes, mécanismes multi-échelles), **des techniques de calcul innovantes sont toujours nécessaires** afin de traiter les problèmes de grande taille ou de les simplifier judicieusement en tout ou partie. De façon générale (et peut-être évidente), le document s'est attaché à montrer qu'**injecter autant que possible de la connaissance *a priori* sur la physique du problème** (torseurs d'effort à transmettre en couplage de modèles, décomposition de domaine respectant la technologie, identification et séparation des mécanismes...) dans ces approches permet de mettre en place des stratégies de calcul et de modélisation robustes et efficaces. **Des techniques de réduction de modèle ont aussi été proposées** afin de (i) construire à moindre coût des modèles réduits de problèmes de grande dimension sans en perdre la précision (ii) d'aider le modélisateur à exhiber des mécanismes (cinématiques) utiles pour l'élaboration de modèles simplifiés dans les situations complexes et notamment en non-linéaire. A travers ces deux objectifs, modèle réduit et modèle simplifié ne doivent pas être confondus.

Sur le volet de la simulation, un premier axe de développement évoqué plusieurs fois dans ce manuscrit concerne le **traitement efficace des non-linéarités de contact en grands déplacements**. L'application de la réduction de modèle dans cette situation est une question largement ouverte. La prédiction de la tenue en fatigue de câbles monotorons d'ancrage de structures *off-shore* constitue une application dans le domaine des énergies renouvelables très intéressante. D'autres applications au-

tour des structures élancées, architecturées, à renforts fibrés peuvent être adressées comme les câbles caténaires ou électriques dans le domaine des transports et de l'énergie, les haubans en construction génie civil, les matériaux tissés en industrie textile ou pour l'élaboration des matériaux composites... La prise en compte de nombreuses interactions de contact entre les fils et torons, et le fait qu'il s'agissent de structures élancées de type poutre ou plaque susceptibles de subir des grands déplacements constitue un champ d'investigation formidable pour le mécanicien. S'agissant de milieux architecturés, composés de fils ou torons élémentaires assemblés de façon ordonnée, une approche multiéchelle pour les modéliser et les simuler s'impose. **Combiner une stratégie de calcul multiéchelle par décomposition de domaine avec la réduction de modèle devrait permettre de capturer efficacement le contenu multiéchelle en espace et en temps des phénomènes de frottement de ce type de problème.** A ce titre, la méthode de décomposition de domaine mixte basée sur la méthode LATIN est un cadre de travail très intéressant pour traiter de façon robuste ces problèmes de contact, de par ses similitudes avec les approches de lagrangien augmenté, et pour utiliser la réduction de modèle par PGD de par sa formulation globale sur le domaine spatial et temporel.
La réduction de modèle pour le non-linéaire géométrique est également un enjeu en soit. Dans les applications visées de structures élancées, les déplacements peuvent être grands mais les déformations (et les glissements) petits. Cette classe bien spécifique de problème non-linéaire géométrique peut être traitée efficacement par des formulations de type corotationnelle. Là encore, les travaux réalisés par le passé autour de l'application de la méthode LATIN à une formulation « matérielle » en taux de déformation et contrainte tournés peuvent être revisités et étendus à la lueur des progrès réalisés ces dernières années en réduction de modèle.
Des discussions sont en cours avec Martin Guiton et Guillaume Enchery de la Direction Physico-chimie et Mécanique appliquées d'IFP Energies nouvelles afin de proposer un sujet de thèse sur cet axe de recherche dans la continuité des travaux de thèse de F. Bussolati. Les développements des outils de réduction de modèle et de DDM étant généralement très intrusifs, il est prévu de les réaliser dans un code reconnu et relativement « ouvert », Code_Aster™. Ce projet sera l'occasion de renforcer les liens avec l'équipe d'EDF R&D du logiciel. La diffusion de ces méthodes numériques dans le milieu industriel a en effet tout à gagner si elle se fait autant que possible en collaboration étroite avec les éditeurs de logiciel.

Dans le domaine de la modélisation, un deuxième axe de recherche porte sur l'utilisation plus poussée de la **réduction de modèle afin de bâtir des modèles simplifiés dans des cas plus complexes**. **Concernant l'élaboration de modèle simplifié de liaison localisée**, un exemple de construction de base réduite pour modéliser le comportement d'un point de soudure électrique a été proposé dans ce mémoire. Bien que les sollicitations à l'échelle de la structure peuvent être complexes, celles à l'échelle de la liaison sont généralement localement simples. Aussi, **étendre la démarche proposée**, notamment pour la modélisation des PSE, **au cas non-linéaire pour des trajets de chargements locaux donnés** mérite d'être investigué. De nombreuses questions émergent comme par exemple la manière d'enrichir et d'adapter le modèle simplifié en fonction des situations rencontrées en pratique ou pourquoi pas en fonction de mesures. La **thèse en cours de M. Harnafi sous la direction de P.A. Boucard, en collaboration avec Safran Aircraft Engines** qui s'intéresse à la prédiction de l'usure de douilles d'un système de calage variable d'aubes de redresseur de moteur aéronautique devrait permettre de **proposer un modèle simplifié de douille et de sa cinétique d'usure** à partir de la « réduction » d'un modèle plus fin, volumique. Dans cette chaîne cinématique complexe, les douilles assurant le guidage entre les aubes et le carter moteur sont actuellement responsables d'un nombre significatif de pannes nécessitant une maintenance moteur conséquente. L'état d'usure des douilles conditionne actuellement beaucoup trop la définition des intervalles d'inspection des moteurs. S'agissant d'une pièce dite consommable ou d'usure, cela est difficilement acceptable par le

client. Aussi, les modèles actuels étant trop peu prédictifs, il convient de les enrichir pour permettre le dimensionnement et l'optimisation de ce système complexe de régulation. Ce modèle simplifié de douille étant établi, il peut bien entendu être utilisé dans une phase de prédimensionnement mais pourrait être également embarqué dans un avion afin de permettre de mieux maîtriser l'état d'usure des douilles à travers la commande et de mieux définir les intervalles d'inspection (contrôle santé intégré).

A plus long terme, les modèles simplifiés ou réduits et stratégies proposés dans ce mémoire, tous issus d'applications industrielles, permettent de bâtir des simulateurs robustes qui peuvent s'avérer utiles pour conduire des analyses d'optimisation ou des simulations en temps réel.
La simulation basée sur la physique, augmentée par les données, et intégrée au réel est un enjeu d'actualité. On parle aujourd'hui de jumeau numérique et d'intelligence artificielle (IA) et les applications passionnantes sont légions : DDDAS (*Dynamic Data Driven Application Systems*), contrôle santé intégré, matériaux et structures intelligentes, objets connectés... D'un côté, le succès de ce paradigme réside avant tout et en grande partie dans la robustesse et l'efficacité du modèle simulé permettant de prédire l'état du système afin d'agir en conséquence pour atteindre un objectif fixé. De l'autre, il est crucial d'intégrer systématiquement les contraintes liées à l'environnement de développement (matériel et humain) afin de susciter l'intérêt du monde industriel. Le champ de compétences mobilisées est vaste et dépasse largement celui du mécanicien. Aussi, **les projets de recherche de demain pour répondre à cet enjeu, doivent nécessairement se faire en collaboration avec des chercheurs et ingénieurs issus de divers domaines de recherche** (IA, simulation, expérimentale, informatique...). La tendance est forte pour le scientifique mais aussi l'enseignant de vouloir embrasser toutes les facettes du problème dans une approche globale consistant de façon caricaturale à assembler des « boîtes noires ». Cependant, cela ne doit pas se faire au détriment de la maitrise des compétences et savoirs acquis dans chaque domaine de spécialité.

Depuis l'époque de Galilée, le métier de mécanicien a beaucoup évolué et est en pleine mutation. Le mécanicien de demain doit bien entendu veiller à conserver un haut niveau d'expertise dans son domaine mais doit pouvoir identifier et intégrer de façon pragmatique les connaissances et compétences qui lui permettront de dialoguer et de collaborer efficacement avec l'ensemble des chercheurs de tout horizon et répondre de façon adaptée aux besoins des ingénieurs de demain.

Bibliographie

[Ainsworth, 2001] AINSWORTH, M. (2001). Essential boundary conditions and multi-point constraints in finite element analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(48):6323 – 6339.

[Allix et Corigliano, 1999] ALLIX, O. et CORIGLIANO, A. (1999). Geometrical and interfacial non-linearities in the analysis of delamination in composites. *International Journal of Solids and Structures*, 36(15):2189 – 2216.

[Allix *et al.*, 2011] ALLIX, O., GENDRE, L., GOSSELET, P. et GUGUIN, G. (2011). *Non-intrusive Coupling : An Attempt to Merge Industrial and Research Software Capabilities*, pages 125–133. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.

[Allix et Gosselet, 2020] ALLIX, O. et GOSSELET, P. (2020). *Non Intrusive Global/Local Coupling Techniques in Solid Mechanics : An Introduction to Different Coupling Strategies and Acceleration Techniques*, pages 203–220. Springer International Publishing, Cham.

[Allix *et al.*, 1995] ALLIX, O., LADEVÈZE, P. et CORIGLIANO, A. (1995). Damage analysis of interlaminar fracture specimens. *Composite Structures*, 31(1):61 – 74.

[Amini *et al.*, 2009a] AMINI, A., DUREISSEIX, D., CARTRAUD, P. et BUANNIC, N. (2009a). A domain decomposition method for problems with structural heterogeneities on the interface : Application to a passenger ship. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(41):3452 – 3463.

[Amini *et al.*, 2009b] AMINI, A. M., DUREISSEIX, D. et CARTRAUD, P. (2009b). Multi-scale domain decomposition method for large-scale structural analysis with a zooming technique : Application to plate assembly. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79(4):417–443.

[Annavarapu *et al.*, 2012] ANNAVARAPU, C., HAUTEFEUILLE, M. et DOLBOW, J. E. (2012). A robust nitsche's formulation for interface problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 225-228:44 – 54.

[Askri *et al.*, 2016] ASKRI, R., BOIS, C., WARGNIER, H. et LECOMTE, J. (2016). A reduced fastener model using multi-connected rigid surfaces for the prediction of both local stress field and load distribution between fasteners. *Finite Elements in Analysis and Design*, 110:32 – 42.

[Astrid *et al.*, 2008] ASTRID, P., WEILAND, S., WILLCOX, K. et BACKX, T. (2008). Missing point estimation in models described by proper orthogonal decomposition. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 53(10):2237–2251.

[Babuška, 1973] BABUŠKA, I. (1973). The finite element method with lagrangian multipliers. *Numerische Mathematik*, 20(3):179–192.

[Babuska et Andersson, 2005] BABUSKA, I. et ANDERSSON, B. (2005). The splitting method as a tool for multiple damage analysis. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 26(4):1114–1145.

[Baranger, 2013] BARANGER, E. (2013). Building of a reduced constitutive law for ceramic matrix composites. *International Journal of Damage Mechanics*, 22(8):1222–1238.

[Baranger *et al.*, 2010a] BARANGER, E., CLUZEL, C. et GUIDAULT, P.-A. (2010a). Prediction of the crushing behaviour of a folded core sandwich structure. *In ICSS9 - 9th International conference on sandwich structures*, page CDROM, Pasadena, United States.

[Baranger *et al.*, 2011a] BARANGER, E., CLUZEL, C. et GUIDAULT, P.-A. (2011a). Modelling of the behaviour of aramid folded cores up to global crushing. *Strain*, 47:170–178.

[Baranger *et al.*, 2009] BARANGER, E., CLUZEL, C., GUIDAULT, P.-A. et ALLIX, O. (2009). Modelling of the behaviour of aramid folded cores up to global crushing. *In ICCM17 - 17th International Conference on Composite Materials*, page B6 :5, Edinburgh, United Kingdom.

[Baranger *et al.*, 2010b] BARANGER, E., GUIDAULT, P.-A. et CLUZEL, C. (2010b). Generation of physical defects for the prediction of the behavior of folded cores. *In IV European Congress on Computational Mechanics (ECCM IV)*, Paris, France.

[Baranger *et al.*, 2011b] BARANGER, E., GUIDAULT, P.-A. et CLUZEL, C. (2011b). Numerical modeling of the geometrical defects of an origami-like sandwich core. *Composite Structures*, 93(10):2504 – 2510.

[Barrault *et al.*, 2004] BARRAULT, M., MADAY, Y., NGUYEN, N. C. et PATERA, A. T. (2004). An 'empirical interpolation' method : application to efficient reduced-basis discretization of partial differential equations. *Comptes Rendus Mathematique*, 339(9):667 – 672.

[Bauman *et al.*, 2008] BAUMAN, P. T., DHIA, H. B., ELKHODJA, N., ODEN, J. T. et PRUDHOMME, S. (2008). On the application of the arlequin method to the coupling of particle and continuum models. *Computational Mechanics*, 42(4):511–530.

[Béchet *et al.*, 2009] BÉCHET, É., MOËS, N. et WOHLMUTH, B. (2009). A stable lagrange multiplier space for stiff interface conditions within the extended finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 78(8):931–954.

[Bègue *et al.*, 1989] BÈGUE, C., BERNARDI, C., DEBIT, N., MADAY, Y., KARIADAKIS, G., MAVRIPLIS, C. et PATERA, A. (1989). Non-conforming spectral element-finite element approximations for partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 75(1):109 – 125.

[Belgacem, 1999] BELGACEM, F. B. (1999). The mortar finite element method with lagrange multipliers. *Numerische Mathematik*, 84(2):173–197.

[Belytschko et Black, 1999] BELYTSCHKO, T. et BLACK, T. (1999). Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45(5):601–620.

[Belytschko *et al.*, 1994] BELYTSCHKO, T., LU, Y. Y. et GU, L. (1994). Element-free galerkin methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37(2):229–256.

[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.

[Ben Dhia et Rateau, 2001] BEN DHIA, H. et RATEAU, G. (2001). Analyse mathématique de la méthode arlequin mixte. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series I - Mathematics*, 332(7):649 – 654.

[Ben Dhia et Rateau, 2002] BEN DHIA, H. et RATEAU, G. (2002). Application of the arlequin method to some structures with defects. *Revue Européenne des Éléments*, 11(2-4):291–304.

[Ben Dhia et Rateau, 2005] BEN DHIA, H. et RATEAU, G. (2005). The arlequin method as a flexible engineering design tool. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 62(11):1442–1462.

[Bensoussan *et al.*, 1978] BENSOUSSAN, A., LIONS, J.-L. et PAPANICOLAOU, G. (1978). *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*, volume 5 de *Studies in Mathematics and Its Applications*. Elsevier.

[Bernardi *et al.*, 1993] BERNARDI, C., MADAY, Y. et PATERA, A. T. (1993). *Domain Decomposition by the Mortar Element Method*, pages 269–286. Springer Netherlands, Dordrecht.

[Bernardi *et al.*, 2008] BERNARDI, C., REBOLLO, T. C. et VERA, E. C. (2008). A FETI method with a mesh independent condition number for the iteration matrix. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(13):1410 – 1429.

[Bettinotti *et al.*, 2014a] BETTINOTTI, O., ALLIX, O. et MALHERBE, B. (2014a). A coupling strategy for adaptive local refinement in space and time with a fixed global model in explicit dynamics. *Computational Mechanics*, 53(4):561–574.

[Bettinotti *et al.*, 2014b] BETTINOTTI, O., ALLIX, O., PEREGO, U., OANCEA, V. et MALHERBE, B. (2014b). A fast weakly intrusive multiscale method in explicit dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 100(8):577–595.

[Bettinotti *et al.*, 2017] BETTINOTTI, O., ALLIX, O., PEREGO, U., OANCEA, V. et MALHERBE, B. (2017). Simulation of delamination under impact using a global–local method in explicit dynamics. *Finite Elements in Analysis and Design*, 125:1 – 13.

[Blanchard *et al.*, 2019] BLANCHARD, M., ALLIX, O., GOSSELET, P. et DESMEURE, G. (2019). Space/time global/local noninvasive coupling strategy : Application to viscoplastic structures. *Finite Elements in Analysis and Design*, 156:1 – 12.

[Boffi *et al.*, 2013] BOFFI, D., BREZZI, F., FORTIN, M. *et al.* (2013). *Mixed finite element methods and applications*, volume 44. Springer.

[Boggs *et al.*, 2005] BOGGS, P. T., ALTHSULER, A., LARZELERE, A. R., WALSH, E. J., CLAY, R. L. et HARDWICK, M. F. (2005). Dart system analysis. Rapport technique SAND2005-4647, SANDIA.

[Bognet *et al.*, 2012] BOGNET, B., BORDEU, F., CHINESTA, F., LEYGUE, A. et POITOU, A. (2012). Advanced simulation of models defined in plate geometries : 3d solutions with 2d computational complexity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 201-204:1 – 12.

[Bonithon et Nouy, 2012] BONITHON, G. et NOUY, A. (2012). A priori tensor approximations for the numerical solution of high dimensional problems : alternative definitions. *In 28th GAMM-Seminar Leipzig on Analysis and Numerical Methods in Higher Dimensions*, Leipzig, Allemagne.

[Boucard, 1996] BOUCARD, P.-A. (1996). *Approche à grand incrément de temps en grandes transformations*. Thèse de doctorat, ENS Cachan.

[Boucard *et al.*, 2007] BOUCARD, P.-A., BUYTET, S. et GUIDAULT, P.-A. (2007). Une stratégie multiéchelle pour l'étude paramétrique de détails géométriques au sein de structures en contacts multiples. *European Journal of Computational Mechanics*, 16(8):1011–1036.

[Boucard *et al.*, 2009] BOUCARD, P. A., BUYTET, S. et GUIDAULT, P. A. (2009). A multiscale strategy for structural optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 78(1):101–126.

[Bouclier et Passieux, 2018] BOUCLIER, R. et PASSIEUX, J.-C. (2018). A nitsche-based non-intrusive coupling strategy for global/local isogeometric structural analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 340:253 – 277.

[Bouclier *et al.*, 2016] BOUCLIER, R., PASSIEUX, J.-C. et SALAÜN, M. (2016). Local enrichment of nurbs patches using a non-intrusive coupling strategy : Geometric details, local refinement, inclusion, fracture. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 300:1 – 26.

[Bouterf *et al.*, 2014] BOUTERF, A., ROUX, S., HILD, F., ADRIEN, J., MAIRE, E. et MEILLE, S. (2014). Digital volume correlation applied to x-ray tomography images from spherical indentation tests on lightweight gypsum. *Strain*, 50(5):444–453.

[Bovet *et al.*, 2017] BOVET, C., PARRET-FRÉAUD, A., SPILLANE, N. et GOSSELET, P. (2017). Adaptive multipreconditioned FETI : Scalability results and robustness assessment. *Computers and Structures*, 193:1 – 20.

[Brezzi, 1974] BREZZI, F. (1974). On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrangian multipliers. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis - Modélisation Mathématique et Analyse Numérique*, 8(R2):129–151.

[Brezzi *et al.*, 2001] BREZZI, F., LIONS, J.-L. et PIRONNEAU, O. (2001). Analysis of a chimera method. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series I - Mathematics*, 332(7):655 – 660.

[Brezzi et Marini, 2005] BREZZI, F. et MARINI, L. D. (2005). The three-field formulation for elasticity problems. *GAMM-Mitteilungen*, 28(2):124–153.

[Burry *et al.*, 2008] BURRY, P., MAITOURNAM, H. et BILLOTEY, G. (2008). Éléments-finis étendus pour la modélisation des structures soudées par points. *Mechanics and Industry*, 9(2):103–108.

[Bussolati, 2019] BUSSOLATI, F. (2019). *Modèle multi-échelle de la fatigue des lignes d'ancrage câblées pour l'éolien offshore flottant*. Thèse de doctorat, ENS Paris-Saclay. 2019SACLN041.

[Bussolati *et al.*, 2020] BUSSOLATI, F., GUIDAULT, P.-A., GUITON, M., ALLIX, O. et WRIGGERS, P. (2020). *Robust contact and friction model for the fatigue estimate of a wire rope in the mooring line of a Floating Offshore Wind Turbine*, volume 93 de *Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics*, chapitre Fracture and Fatigue, pages 249–270. Springer, Cham.

[Caignot *et al.*, 2010] CAIGNOT, A., LADEVÈZE, P., NÉRON, D. et DURAND, J. (2010). Virtual testing for the prediction of damping in joints. *Engineering Computations*, 27(5):621–644.

[Capaldo *et al.*, 2017] CAPALDO, M., GUIDAULT, P.-A., NÉRON, D. et LADEVÈZE, P. (2017). The reference point method, a "hyperreduction" technique : Application to pgd-based nonlinear model reduction. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 322:483 – 514.

[Carlberg *et al.*, 2013] CARLBERG, K., FARHAT, C., CORTIAL, J. et AMSALLEM, D. (2013). The gnat method for nonlinear model reduction : Effective implementation and application to computational fluid dynamics and turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 242:623 – 647.

[Cartraud et Messager, 2006] CARTRAUD, P. et MESSAGER, T. (2006). Computational homogenization of periodic beam-like structures. *International Journal of Solids and Structures*, 43(3-4):686 – 696.

[Chaboche *et al.*, 2001] CHABOCHE, J., KRUCH, S., MAIRE, J. et POTTIER, T. (2001). Towards a micromechanics based inelastic and damage modeling of composites. *International Journal of Plasticity*, 17(4):411–439.

[Champaney *et al.*, 1999] CHAMPANEY, L., COGNARD, J. et LADEVEZE, P. (1999). Modular analysis of assemblages of three-dimensional structures with unilateral contact conditions. *Computers and Structures*, 73(1):249–266.

[Chantrait *et al.*, 2014] CHANTRAIT, T., RANNOU, J. et GRAVOUIL, A. (2014). Low intrusive coupling of implicit and explicit time integration schemes for structural dynamics : Application to low energy impacts on composite structures. *Finite Elements in Analysis and Design*, 86:23 – 33.

[Chaturantabut et Sorensen, 2010] CHATURANTABUT, S. et SORENSEN, D. C. (2010). Nonlinear model reduction via discrete empirical interpolation. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 32(5):2737–2764.

[Chen *et al.*, 1997] CHEN, J. S., PAN, C. et WU, C. T. (1997). Large deformation analysis of rubber based on a reproducing kernel particle method. *Computational Mechanics*, 19(3):211–227.

[Chevreuil *et al.*, 2013] CHEVREUIL, M., NOUY, A. et SAFATLY, E. (2013). A multiscale method with patch for the solution of stochastic partial differential equations with localized uncertainties. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 255:255 – 274.

[Chinesta *et al.*, 2011] CHINESTA, F., LADEVEZE, P. et CUETO, E. (2011). A short review on model order reduction based on proper generalized decomposition. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 18(4):395.

[Christman *et al.*, 1989] CHRISTMAN, T., NEEDLEMAN, A. et SURESH, S. (1989). An experimental and numerical study of deformation in metal-ceramic composites. *Acta Metallurgica*, 37(11):3029 – 3050.

[Clough et Wilson, 1979] CLOUGH, R. W. et WILSON, E. L. (1979). Dynamic analysis of large structural systems with local nonlinearities. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 17-18:107 – 129.

[Cockburn, 2003] COCKBURN, B. (2003). Discontinuous galerkin methods. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 83(11):731–754.

[Cockburn *et al.*, 2000] COCKBURN, B., KARNIADAKIS, G. E. et SHU, C.-W., éditeurs (2000). *Discontinuous Galerkin Methods - Theory, Computation and Applications*, volume 11 de *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.

[Confalonieri *et al.*, 2013] CONFALONIERI, F., CORIGLIANO, A., DOSSI, M. et GORNATI, M. (2013). A domain decomposition technique applied to the solution of the coupled electro-mechanical problem. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 93(2):137–159.

[Corigliano, 1993] CORIGLIANO, A. (1993). Formulation, identification and use of interface models in the numerical analysis of composite delamination. *International Journal of Solids and Structures*, 30(20):2779 – 2811.

[Corigliano *et al.*, 2016] CORIGLIANO, A., CONFALONIERI, F., DOSSI, M. et MARIANI, S. (2016). Coupled domain decomposition–proper orthogonal decomposition methods for the simulation of quasi-brittle fracture processes. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, 3(1).

[Corigliano *et al.*, 2013] CORIGLIANO, A., DOSSI, M. et MARIANI, S. (2013). Domain decomposition and model order reduction methods applied to the simulation of multi-physics problems in mems. *Computers and Structures*, 122:113–127.

[Corigliano *et al.*, 2015] CORIGLIANO, A., DOSSI, M. et MARIANI, S. (2015). Model order reduction and domain decomposition strategies for the solution of the dynamic elastic–plastic structural problem. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 290:127 – 155.

[Cosserat et Cosserat, 1909] COSSERAT, E. et COSSERAT, F. (1909). *Théorie des corps déformables*. Cornell University Library historical math monographs. A. Hermann et fils.

[Cottrell *et al.*, 2009] COTTRELL, J.A., H., T.J.R. et BAZILEVS, Y. (2009). *From CAD and FEA to Isogeometric Analysis : An Historical Perspective*, chapitre 1, pages 1–18. John Wiley & Sons, Ltd.

[Cremonesi *et al.*, 2013] CREMONESI, M., NÉRON, D., GUIDAULT, P.-A. et LADEVÈZE, P. (2013). A pgd-based homogenization technique for the resolution of nonlinear multiscale problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 267:275 – 292.

[Cresta *et al.*, 2007] CRESTA, P., ALLIX, O., REY, C. et GUINARD, S. (2007). Nonlinear localization strategies for domain decomposition methods : Application to post-buckling analyses. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(8):1436 – 1446.

[Crisfield, 1981] CRISFIELD, M. (1981). A fast incremental/iterative solution procedure that handles "snap-through". *Computers and Structures*, 13(1):55 – 62.

[Cros, 2003] CROS, J. (2003). A preconditioner for the schur complement domain decomposition method. *In* HERRERA, I., KEYES, D., WIDLUND, O. et YATES, R., éditeurs : *Proceedings of the Fourteenth International Conference on Domain Decomposition Methods*, pages 373–380.

[Dang Van, 1999] DANG VAN, K. (1999). Introduction to fatigue analysis in mechanical design by the multiscale approach. *In* DANG VAN, K. et PAPADOPOULOS, I. V., éditeurs : *High-Cycle Metal Fatigue*, volume 392 de *International Centre for Mechanical Sciences (Courses and Lectures)*, pages 57–88. Springer, Vienna.

[Dang Van *et al.*, 1989] DANG VAN, K., GRIVEAU, B. et MESSAGE, O. (1989). On a new multiaxial fatigue limit criterion : theory and application. *In* BROWN, M. W. et MILLER, K. J., éditeurs : *Biaxial and Multiaxial Fatigue (EGF 3)*, Proceedings of the second international conference on biaxial/multiaxial fatigue (University of Sheffield, 1985), pages 479–496. Mechanical Engineering Publication, London.

[Dartois *et al.*, 2009] DARTOIS, S., POMMIER, S. et GUIDAULT, P.-A. (2009). Contribution to a multiscale crack growth modelling accounting for plastic behaviour at crack tip. implementation in an x-fem code and illustration under mixed mode cyclic loadings. *In 7th EUROMECH Solid Mechanics Conference (ESMC2009)*.

[Das, 1978] DAS, P. (1978). Reanalysing structures with small modifications. *Computer-Aided Design*, 10(6):371 – 379.

[De Crevoisier *et al.*, 2012] DE CREVOISIER, J., SWIERGIEL, N., CHAMPANEY, L. et HILD, F. (2012). Identification of in situ frictional properties of bolted assemblies with digital image correlation. *Experimental Mechanics*, 52(6):561–572.

[De Lorenzis *et al.*, 2012] DE LORENZIS, L., WRIGGERS, P. et ZAVARISE, G. (2012). A mortar formulation for 3d large deformation contact using nurbs-based isogeometric analysis and the augmented lagrangian method. *Computational Mechanics*, 49(1):1–20.

[De Roeck *et al.*, 1992] DE ROECK, Y.-H., LE TALLEC, P. et VIDRASCU, M. (1992). A domain-decomposed solver for nonlinear elasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 99(2):187 – 207.

[Dembo *et al.*, 1982] DEMBO, R. S., EISENSTAT, S. C. et STEIHAUG, T. (1982). Inexact newton methods. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 19(2):400–408.

[Desmeure, 2016] DESMEURE, G. (2016). *A mixed multiscale domain decomposition method for structural assemblies design*. Theses, Université Paris-Saclay.

[Ding et Gallagher, 1985] DING, H. et GALLAGHER, R. H. (1985). Approximate force method reanalysis techniques in structural optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 21(7):1253–1267.

[Dohrmann, 2003] DOHRMANN, C. R. (2003). A preconditioner for substructuring based on constrained energy minimization. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 25(1):246–258.

[Dolbow *et al.*, 2001] DOLBOW, J., MOËS, N. et BELYTSCHKO, T. (2001). An extended finite element method for modeling crack growth with frictional contact. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(51):6825 – 6846.

[Durville, 2012] DURVILLE, D. (2012). Contact-friction modeling within elastic beam assemblies : an application to knot tightening. *Computational Mechanics*, 49(6):687–707.

[Duval *et al.*, 2016] DUVAL, M., PASSIEUX, J.-C., SALAÜN, M. et GUINARD, S. (2016). Non-intrusive coupling : Recent advances and scalable nonlinear domain decomposition. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 23(1):17–38.

[Dvorak *et al.*, 1994] DVORAK, G., BAHEI-EL-DIN, Y. et WAFA, A. (1994). The modeling of inelastic composite materials with the transformation field analysis. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2(3 A):571–586.

[Eisenstat et Walker, 1996] EISENSTAT, S. C. et WALKER, H. F. (1996). Choosing the forcing terms in an inexact newton method. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 17(1):16–32.

[El Halabi *et al.*, 2013] EL HALABI, F., GONZÁLEZ, D., CHICO, A. et DOBLARÉ, M. (2013). FE2 multiscale in linear elasticity based on parametrized microscale models using proper generalized decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 257:183 – 202.

[Falcó *et al.*, 2018] FALCÓ, A., HACKBUSCH, W. et NOUY, A. (2018). Tree-based tensor formats. *SeMA Journal*.

[Farhat *et al.*, 2014] FARHAT, C., AVERY, P., CHAPMAN, T. et CORTIAL, J. (2014). Dimensional reduction of nonlinear finite element dynamic models with finite rotations and energy-based mesh sampling and weighting for computational efficiency. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 98(9):625–662.

[Farhat *et al.*, 1993] FARHAT, C., CHEN, P.-S. et ROUX, F.-X. (1993). The dual schur complement method with well-posed local neumann problems : Regularization with a perturbed lagrangian formulation. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 14(3):752–759.

[Farhat *et al.*, 2001] FARHAT, C., LESOINNE, M., LE TALLEC, P., PIERSON, K. et RIXEN, D. (2001). FETI-DP : a dual–primal unified FETI method—part i : A faster alternative to the two-level FETI method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50(7):1523–1544.

[Farhat et Mandel, 1998] FARHAT, C. et MANDEL, J. (1998). The two-level FETI method for static and dynamic plate problems part i : An optimal iterative solver for biharmonic systems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 155(1):129 – 151.

[Farhat *et al.*, 2000] FARHAT, C., PIERSON, K. et LESOINNE, M. (2000). The second generation FETI methods and their application to the parallel solution of large-scale linear and geometrically nonlinear structural analysis problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 184(2):333 – 374.

[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.

[Felippa et Haugen, 2005] FELIPPA, C. A. et HAUGEN, B. (2005). A unified formulation of small-strain corotational finite elements : I. theory. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(21):2285 – 2335. Computational Methods for Shells.

[Feyel et Chaboche, 2000] FEYEL, F. et CHABOCHE, J.-L. (2000). FE2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre sic/ti composite materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 183(3):309 – 330.

[Fish, 1992] FISH, J. (1992). The s-version of the finite element method. *Computers and Structures*, 43(3):539 – 547.

[Fish *et al.*, 1997] FISH, J., SHEK, K., PANDHEERADI, M. et SHEPHARD, M. (1997). Computational plasticity for composite structures based on mathematical homogenization : Theory and practice. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 148(1-2):53–73.

[Forest et Sab, 1998] FOREST, S. et SAB, K. (1998). Cosserat overall modeling of heterogeneous materials. *Mechanics Research Communications*, 25(4):449 – 454.

[Friderikos et Baranger, 2016] FRIDERIKOS, O. et BARANGER, E. (2016). Automatic building of a numerical simplified constitutive law for ceramic matrix composites using singular value decomposition. *International Journal of Damage Mechanics*, 25(4):506–537.

[Frikha *et al.*, 2013] FRIKHA, A., CARTRAUD, P. et TREYSSEDE, F. (2013). Mechanical modeling of helical structures accounting for translational invariance. part 1 : Static behavior. *International Journal of Solids and Structures*, 50(9):1373 – 1382.

[Gendre, 2009] GENDRE, L. (2009). *Non-intrusive global/local analysis : application to structures with localized plasticity*. Theses, École normale supérieure de Cachan - ENS Cachan.

[Gendre *et al.*, 2011] GENDRE, L., ALLIX, O. et GOSSELET, P. (2011). A two-scale approximation of the schur complement and its use for non-intrusive coupling. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 87(9):889–905.

[Gendre *et al.*, 2009] GENDRE, L., ALLIX, O., GOSSELET, P. et COMTE, F. (2009). Non-intrusive and exact global/local techniques for structural problems with local plasticity. *Computational Mechanics*, 44(2 1432-0924):233–245.

[Geniaut *et al.*, 2007] GENIAUT, S., MASSIN, P. et MOËS, N. (2007). A stable 3d contact formulation using x-fem. *European Journal of Computational Mechanics*, 16(2):259–275.

[Gerasimov *et al.*, 2018] GERASIMOV, T., NOII, N., ALLIX, O. et DE LORENZIS, L. (2018). A non-intrusive global/local approach applied to phase-field modeling of brittle fracture. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, 5(1):14.

[Germain *et al.*, 2007] GERMAIN, N., BESSON, J., FEYEL, F. et GOSSELET, P. (2007). High-performance parallel simulation of structure degradation using non-local damage models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 71(3):253–276.

[Ghoreishi *et al.*, 2007a] GHOREISHI, S. R., CARTRAUD, P., DAVIES, P. et MESSAGER, T. (2007a). Analytical modeling of synthetic fiber ropes subjected to axial loads. part i : A new continuum model for multilayered fibrous structures. *International Journal of Solids and Structures*, 44(9):2924 – 2942.

[Ghoreishi *et al.*, 2007b] GHOREISHI, S. R., DAVIES, P., CARTRAUD, P. et MESSAGER, T. (2007b). Analytical modeling of synthetic fiber ropes. part ii : A linear elastic model for 1 + 6 fibrous structures. *International Journal of Solids and Structures*, 44(9):2943 – 2960.

[Giacoma *et al.*, 2016] GIACOMA, A., DUREISSEIX, D. et GRAVOUIL, A. (2016). An efficient quasi-optimal space-time pgd application to frictional contact mechanics. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, 3(1):12.

[Giacoma *et al.*, 2014] GIACOMA, A., DUREISSEIX, D., GRAVOUIL, A. et ROCHETTE, M. (2014). A multiscale large time increment/fas algorithm with time-space model reduction for frictional contact problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 97(3):207–230.

[Giacoma *et al.*, 2015] GIACOMA, A., DUREISSEIX, D., GRAVOUIL, A. et ROCHETTE, M. (2015). Toward an optimal a priori reduced basis strategy for frictional contact problems with latin solver. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 283:1357 – 1381.

[Giraldi et Nouy, 2019] GIRALDI, L. et NOUY, A. (2019). Weakly intrusive low-rank approximation method for nonlinear parameter-dependent equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 41(3):A1777–A1792.

[Glowinski, 2015] GLOWINSKI, R. (2015). *Augmented Lagrangians and Alternating Direction Methods of Multipliers*, chapitre 4, pages 157–202. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA.

[Glowinski et Le Tallec, 1989] GLOWINSKI, R. et LE TALLEC, P. (1989). *Augmented Lagrangian and Operator-splitting Methods in Nonlinear Mechanics*. Studies in Applied Mathematics. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM, 3600 Market Street, Floor 6, Philadelphia, PA 19104).

[Glowinski et Le Tallec, 1990] GLOWINSKI, R. et LE TALLEC, P. (1990). Augmented lagrangian interpretation of the nonoverlapping schwarz alternating method. *In third international symposium on domain decomposition methods for partial differential equations*, numéro 43 de Domain decomposition methods - international symposium, page 224. SIAM, Society for Industrial and Applied Mathematics.

[Gomez et De Lorenzis, 2016] GOMEZ, H. et DE LORENZIS, L. (2016). The variational collocation method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 309:152 – 181.

[Gosselet *et al.*, 2018] GOSSELET, P., BLANCHARD, M., ALLIX, O. et GUGUIN, G. (2018). Non-invasive global–local coupling as a schwarz domain decomposition method : acceleration and generalization. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, 5(4).

[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.

[Gosselet *et al.*, 2003] GOSSELET, P., REY, C. et RIXEN, D. J. (2003). On the initial estimate of interface forces in FETI methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(25):2749 – 2764.

[Gravouil et Combescure, 2001] GRAVOUIL, A. et COMBESCURE, A. (2001). Multi-time-step explicit - implicit method for non-linear structural dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50(1):199–225.

[Gravouil *et al.*, 2002] GRAVOUIL, A., MOËS, N. et BELYTSCHKO, T. (2002). Non-planar 3d crack growth by the extended finite element and level sets—part ii : Level set update. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 53(11):2569–2586.

[Gray et McCarthy, 2010] GRAY, P. et MCCARTHY, C. (2010). A global bolted joint model for finite element analysis of load distributions in multi-bolt composite joints. *Composites Part B : Engineering*, 41(4):317 – 325.

[Grepl *et al.*, 2007] GREPL, M. A., MADAY, Y., NGUYEN, N. C. et PATERA, A. T. (2007). Efficient reduced-basis treatment of nonaffine and nonlinear partial differential equations. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 41(3):575–605.

[Grisvard, 1992] GRISVARD, P. (1992). *Singularities in boundary value problems*, volume 22 de *Recherches en mathématiques appliquées*. Masson, Springer, Paris ; Berlin.

[Guguin, 2014] GUGUIN, G. (2014). *A nonintrusive plate/3D coupling strategy for the simulation of laminated plates assemblies*. Theses, École normale supérieure de Cachan - ENS Cachan.

[Guguin *et al.*, 2014] GUGUIN, G., ALLIX, O., GOSSELET, P. et GUINARD, S. (2014). Nonintrusive coupling of 3d and 2d laminated composite models based on finite element 3d recovery. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 98(5):324–343.

[Guguin *et al.*, 2016] GUGUIN, G., ALLIX, O., GOSSELET, P. et GUINARD, S. (2016). On the computation of plate assemblies using realistic 3d joint model : a non-intrusive approach. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, 3(1):16.

[Guidault *et al.*, 2007] GUIDAULT, P., ALLIX, O., CHAMPANEY, L. et NAVARRO, J. (2007). A two-scale approach with homogenization for the computation of cracked structures. *Computers and Structures*, 85(17-18):1360 – 1371. Computational Structures Technology.

[Guidault, 2005] GUIDAULT, P.-A. (2005). *Une stratégie de calcul pour les structures fissurées : Analyse locale-globale et approche multiéchelle pour la fissuration*. Theses, École normale supérieure de Cachan - ENS Cachan.

[Guidault, 2017] GUIDAULT, P.-A. (2017). Sur la réduction de modèle en non-linéaire : modèle simplifié ou modèle réduit ? *In Séminaire du LMT*, Cachan, France.

[Guidault *et al.*, 2008] GUIDAULT, P.-A., ALLIX, O., CHAMPANEY, L. et CORNUAULT, C. (2008). A multiscale extended finite element method for crack propagation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(5):381 – 399.

[Guidault *et al.*, 2005] GUIDAULT, P.-A., ALLIX, O., CHAMPANEY, L. et NAVARRO, J. (2005). A multiscale computational strategy for crack propagation with local enrichment. *In USNCCM 8 - 8th US National Congress on Computational Mechanics*, Austin, United States.

[Guidault et Belytschko, 2007] GUIDAULT, P.-A. et BELYTSCHKO, T. (2007). On the L2 and the H1 couplings for an overlapping domain decomposition method using lagrange multipliers. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 70(3):322–350.

[Guidault et Belytschko, 2009] GUIDAULT, P.-A. et BELYTSCHKO, T. (2009). Bridging domain methods for coupled atomistic-continuum models with L2 or H1 couplings. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 77(11):1566–1592.

[Guidault *et al.*, 2019] GUIDAULT, P.-A., BUSSOLATI, F., GUITON, M. L., ALLIX, O. et WRIGGERS, P. (2019). A small-sliding node-to-node formulation for beam-to-beam frictional contact with large displacements. *In VI. International Conference on Computational Contact Mechanics*, Hannover, Germany.

[Guidault *et al.*, 2015] GUIDAULT, P.-A., SOULÉ DE LAFONT, M.-F. et BOUCARD, P.-A. (2015). Modélisation et identification d'un connecteur élément fini non- linéaire pour la simulation d'assemblages boulonnés. *In 12e colloque national en calcul des structures*, Giens, France. CSMA.

[Hackbusch, 2012] HACKBUSCH, W. (2012). *Tensor Spaces and Numerical Tensor Calculus*, volume 42 de *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.

[Hansbo et Hansbo, 2002] HANSBO, A. et HANSBO, P. (2002). An unfitted finite element method, based on nitsche's method, for elliptic interface problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191(47):5537 – 5552.

[Hernández *et al.*, 2014] HERNÁNDEZ, J., OLIVER, J., HUESPE, A., CAICEDO, M. et CANTE, J. (2014). High-performance model reduction techniques in computational multiscale homogenization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 276:149 – 189.

[Hild *et al.*, 2020] HILD, F., MISRA, A. et DELL'ISOLA, F. (2020). Multiscale DIC applied to Pantographic Structures. *Experimental Mechanics*, (to appear).

[Hinojosa *et al.*, 2014] HINOJOSA, J., ALLIX, O., GUIDAULT, P.-A. et CRESTA, P. (2014). Domain decomposition methods with nonlinear localization for the buckling and post-buckling analyses of large structures. *Advances in Engineering Software*, 70:13 – 24.

[Hinojosa *et al.*, 2017] HINOJOSA, J., ALLIX, O., GUIDAULT, P. A., CRESTA, P. et SAAVEDRA, K. (2017). Mixed nonlinear localization strategy for the buckling and post-buckling analyses of structures : parameter optimization and path following implementation. *Engineering Optimization*, 49(2): 269–289.

[Hinojosa Rehbein, 2012] HINOJOSA REHBEIN, J. A. (2012). *Sur la robustesse d'une méthode de décomposition de domaine mixte avec relocalisation non linéaire pour le traitement des instabilités géométriques dans les grandes structures raidies*. Thèse de doctorat, ENS Cachan. 2012DENS0010.

[Hirai *et al.*, 1985] HIRAI, I., UCHIYAMA, Y., MIZUTA, Y. et PILKEY, W. D. (1985). An exact zooming method. *Finite Elements in Analysis and Design*, 1(1):61 – 69.

[Hirai *et al.*, 1984] HIRAI, I., WANG, B. P. et PILKEY, W. D. (1984). An efficient zooming method for finite element analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 20(9):1671–1683.

[Holzapfel, 2000] HOLZAPFEL, G. A. (2000). *Nonlinear Solid Mechanics : A Continuum Approach for Engineering*. John Wiley & Sons, Ltd.

[Hughes, 1995] HUGHES, T. J. (1995). Multiscale phenomena : Green's functions, the dirichlet-to-neumann formulation, subgrid scale models, bubbles and the origins of stabilized methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 127(1):387 – 401.

[Hussein *et al.*, 2019] HUSSEIN, A., ALDAKHEEL, F., HUDOBIVNIK, B., WRIGGERS, P., GUIDAULT, P.-A. et ALLIX, O. (2019). A computational framework for brittle crack-propagation based on efficient virtual element method. *Finite Elements in Analysis and Design*, 159:15 – 32.

[Jan *et al.*, 2014] JAN, W., GREGOR, F. et CHRISTOS T., G. (2014). Measurement of local deformations in steel monostrands using digital image correlation. *Journal of Bridge Engineering*, 19(10):04014042.

[Jara-Almonte et Knight, 1988] JARA-ALMONTE, C. C. et KNIGHT, C. E. (1988). The specified boundary stiffness/force sbsf method for finite element subregion analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 26(7):1567–1578.

[Kaczmarczyk *et al.*, 2008] KACZMARCZYK, $\mathbf{L}_F$., PEARCE, C. J. et BIĆANIĆ, N. (2008). Scale transition and enforcement of rve boundary conditions in second-order computational homogenization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 74(3):506–522.

[Kang *et al.*, 2007] KANG, H. T., DONG, P. et HONG, J. (2007). Fatigue analysis of spot welds using a mesh-insensitive structural stress approach. *International Journal of Fatigue*, 29(8):1546 – 1553.

[Kerfriden *et al.*, 2009] KERFRIDEN, P., ALLIX, O. et GOSSELET, P. (2009). A three-scale domain decomposition method for the 3d analysis of debonding in laminates. *Computational Mechanics*, 44(3):343–362.

[Kim *et al.*, 2007] KIM, J., YOON, J.-C. et KANG, B.-S. (2007). Finite element analysis and modeling of structure with bolted joints. *Applied Mathematical Modelling*, 31(5):895 – 911.

[Kirsch, 1981] KIRSCH, U. (1981). Approximate structural reanalysis based on series expansion. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 26(2):205 – 223.

[Kirsch, 2008] KIRSCH, U. (2008). *Reanalysis of Structures - A Unified Approach for Linear, Nonlinear, Static and Dynamic Systems*, volume 151 de *Solid Mechanics And Its Applications*. Springer, Dordrecht.

[Kitamura et Gu, 2001] KITAMURA, M. et GU, H. (2001). Submodeling analysis using recovered stresses by superconvergent patch recovery method as driven variables : Application in large deformation problems. *Journal of the Society of Naval Architects of Japan*, 2001(190):663–670.

[Klawonn *et al.*, 2014] KLAWONN, A., LANSER, M. et RHEINBACH, O. (2014). Nonlinear FETI-DP and BDDC methods. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 36(2):A737–A765.

[Konyukhov *et al.*, 2018] KONYUKHOV, A., MRENES, O. et SCHWEIZERHOF, K. (2018). Consistent development of a beam-to-beam contact algorithm via the curve-to-solid beam contact : Analysis for the nonfrictional case. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 113(7):1108–1144.

[Konyukhov et Schweizerhof, 2010] KONYUKHOV, A. et SCHWEIZERHOF, K. (2010). Geometrically exact covariant approach for contact between curves. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(37):2510 – 2531.

[Kouznetsova *et al.*, 2002] KOUZNETSOVA, V., GEERS, M. G. et BREKELMANS, W. M. (2002). Multi-scale constitutive modelling of heterogeneous materials with a gradient-enhanced computational homogenization scheme. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 54(8):1235–1260.

[Kouznetsova *et al.*, 2004] KOUZNETSOVA, V. G., GEERS, M. et BREKELMANS, W. A. M. (2004). Size of a representative volume element in a second-order computational homogenization framework. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 2(4):575–598.

[Kruse *et al.*, 2018] KRUSE, R., NGUYEN-THANH, N., WRIGGERS, P. et DE LORENZIS, L. (2018). Isogeometric frictionless contact analysis with the third medium method. *Computational Mechanics*, 62(5):1009–1021.

[Kuratani *et al.*, 2011] KURATANI, F., MATSUBARA, K. et YAMAUCHI, T. (2011). Finite element model for spot welds using multi-point constraints and its dynamic characteristics.

[Ladevèze, 1985] LADEVÈZE, P. (1985). Sur une famille d'algorithmes en mécanique des structures. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series II*, 300(2):41–44.

[Ladevèze, 1999] LADEVÈZE, P. (1999). *Nonlinear Computational Structural Mechanics - new approaches and non-incremental methods of calculation*. Mechanical Engineering Series. Springer New York.

[Ladevèze *et al.*, 2001] LADEVÈZE, P., LOISEAU, O. et DUREISSEIX, D. (2001). A micro–macro and parallel computational strategy for highly heterogeneous structures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 52(1–2):121–138.

[Ladevèze *et al.*, 2007] LADEVÈZE, P., NÉRON, D. et GOSSELET, P. (2007). On a mixed and multiscale domain decomposition method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196: 1526–1540.

[Ladevèze et Nouy, 2002] LADEVÈZE, P. et NOUY, A. (2002). Une stratégie de calcul multiéchelle avec homogénéisation en espace et en temps. *Comptes Rendus Mécanique*, 330(10):683 – 689.

[Ladevèze *et al.*, 2002] LADEVÈZE, P., NOUY, A. et LOISEAU, O. (2002). A multiscale computational approach for contact problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191(43):4869 – 4891.

[Ladevèze *et al.*, 2010] LADEVÈZE, P., PASSIEUX, J.-C. et NÉRON, D. (2010). The latin multiscale computational method and the proper generalized decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(21):1287 – 1296. Multiscale Models and Mathematical Aspects in Solid and Fluid Mechanics.

[Ladyzhenskaya, 1969] LADYZHENSKAYA, O. A. (1969). *The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow*, volume 2 de *Mathematics and Its Applications*. Gordon and Breach science publishers.

[Lalonde *et al.*, 2017] LALONDE, S., GUILBAULT, R. et LÉGERON, F. (2017). Modeling multilayered wire strands, a strategy based on 3d finite element beam-to-beam contacts - part i : Model formulation and validation. *International Journal of Mechanical Sciences*, 126:281 – 296.

[Lamari *et al.*, 2010] LAMARI, H., AMMAR, A., CARTRAUD, P., LEGRAIN, G., CHINESTA, F. et JACQUEMIN, F. (2010). Routes for efficient computational homogenization of nonlinear materials using the proper generalized decompositions. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 17(4):373–391.

[Le Tallec *et al.*, 1998] LE TALLEC, P., MANDEL, J. et VIDRASCU, M. (1998). A neumann–neumann domain decomposition algorithm for solving plate and shell problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 35(2):836–867.

[Le Tallec et Sassi, 1995] LE TALLEC, P. et SASSI, T. (1995). Domain decomposition with nonmatching grids : Augmented lagrangian approach. *Mathematics of Computation*, 64(212):1367–1396.

[Lions et Magenes, 1968] LIONS, J. L. et MAGENES, E. (1968). *Problèmes aux limites non homogènes et applications.*, volume 1 de *Travaux et recherches mathématiques*. Dunod, Paris.

[Litewka et Wriggers, 2002] LITEWKA, P. et WRIGGERS, P. (2002). Frictional contact between 3d beams. *Computational Mechanics*, 28(1):26–39.

[Loiseau, 2001] LOISEAU, O. (2001). *Une stratégie de calcul multiéchelle pour les structures hétérogènes*. Thèse de doctorat, ENS Cachan.

[Lu *et al.*, 2018a] LU, Y., BLAL, N. et GRAVOUIL, A. (2018a). Adaptive sparse grid based hopgd : Toward a nonintrusive strategy for constructing space-time welding computational vademecum. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 114(13):1438–1461.

[Lu *et al.*, 2018b] LU, Y., BLAL, N. et GRAVOUIL, A. (2018b). Space–time pod based computational vademecums for parametric studies : application to thermo-mechanical problems. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, 5(1).

[Lu *et al.*, 2019] LU, Y., BLAL, N. et GRAVOUIL, A. (2019). Datadriven hopgd based computational vademecum for welding parameter identification. *Computational Mechanics*, 64(1):47–62.

[Mahjoubi *et al.*, 2009] MAHJOUBI, N., GRAVOUIL, A. et COMBESCURE, A. (2009). Coupling subdomains with heterogeneous time integrators and incompatible time steps. *Computational Mechanics*, 44(6):825–843.

[Mainnemare *et al.*, 2018] MAINNEMARE, F., DELATTRE, B., RAOULT, I., VILLARS, O., BOUCARD, P.-A. et GUIDAULT, P.-A. (2018). A numerical analysis to investigate the spot weld local influence. *In Fatigue 2018 - The 12th International Fatigue Congress*, Poitiers, France.

[Mainnemare *et al.*, 2019] MAINNEMARE, F., DELATTRE, B., RAOULT, I., VILLARS, O., BOUCARD, P.-A. et GUIDAULT, P.-A. (2019). Éléments préalables à l'élaboration d'un modèle de connecteur pour le Point de Soudure Électrique. *In CSMA 2019 - 14ème colloque national en calcul de structures*, Giens, France.

[Mandel, 1993] MANDEL, J. (1993). Balancing domain decomposition. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 9(3):233–241.

[Mandel et Brezina, 1996] MANDEL, J. et BREZINA, M. (1996). Balancing domain decomposition for problems with large jumps in coefficients. *Mathematics of Computation*, 65(216):1387–1401.

[Mandel et Dohrmann, 2003] MANDEL, J. et DOHRMANN, C. R. (2003). Convergence of a balancing domain decomposition by constraints and energy minimization. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 10(7):639–659.

[Mao et Sun, 1991] MAO, K. M. et SUN, C. T. (1991). A refined global-local finite element analysis method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 32(1):29–43.

[Marchais *et al.*, 2017] MARCHAIS, J., CHAMOIN, L. et REY, C. (2017). Wave filtering through a selective perfectly matched layer in multiscale couplings with dynamically incompatible models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 110(8):745–775.

[Marchais *et al.*, 2014] MARCHAIS, J., REY, C. et CHAMOIN, L. (2014). Geometrically consistent approximations of the energy for the transition between nonlocal and local discrete models. *Computational Materials Science*, 85:280 – 294.

[Marenić *et al.*, 2013] MARENIĆ, E., IBRAHIMBEGOVIC, A., SORIĆ, J. et GUIDAULT, P.-A. (2013). Homogenized elastic properties of graphene for small deformations. *Materials*, 6(9):3764–3782.

[Meier *et al.*, 2018] MEIER, C., GRILL, M. J., WALL, W. A. et POPP, A. (2018). Geometrically exact beam elements and smooth contact schemes for the modeling of fiber-based materials and structures. *International Journal of Solids and Structures*, 154:124 – 146. Multiscale Modelling of Fibrous and Textile Materials.

[Meier *et al.*, 2017] MEIER, C., WALL, W. A. et POPP, A. (2017). A unified approach for beam-to-beam contact. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 315:972 – 1010.

[Messager et Cartraud, 2008] MESSAGER, T. et CARTRAUD, P. (2008). Homogenization of helical beam-like structures : application to single-walled carbon nanotubes. *Computational Mechanics*, 41(2): 335–346.

[Michel et Suquet, 2003] MICHEL, J. et SUQUET, P. (2003). Nonuniform transformation field analysis. *International Journal of Solids and Structures*, 40(25):6937 – 6955. Special issue in Honor of George J. Dvorak.

[Michel et Suquet, 2004] MICHEL, J. et SUQUET, P. (2004). Computational analysis of nonlinear composite structures using the nonuniform transformation field analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(48-51):5477 – 5502. Advances in Computational Plasticity.

[Michel et Suquet, 2009] MICHEL, J.-C. et SUQUET, P. (2009). Nonuniform transformation field analysis : a reduced model for multiscale nonlinear problems in solid mechanics. *In* GALVANETTO, U. et ALIABADI, F., éditeurs : *Multiscale Modelling in Solid Mechanics - Computational Approaches*, Imperial College Press, pages 159–206. Imperial College Press, London. ISBN : 978-1-84816-307-2.

[Michel-Ponnelle, 2001] MICHEL-PONNELLE, S. (2001). *Modélisation et simulation de structures élastomères endommageables en grandes transformations*. Thèse de doctorat, ENS Cachan. 2001DENS0004.

[Moës *et al.*, 1999] MOËS, N., DOLBOW, J. et BELYTSCHKO, T. (1999). A finite element method for crack growth without remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46(1):131–150.

[Moës *et al.*, 2002] MOËS, N., GRAVOUIL, A. et BELYTSCHKO, T. (2002). Non-planar 3d crack growth by the extended finite element and level sets—part i : Mechanical model. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 53(11):2549–2568.

[Moës *et al.*, 1998] MOËS, N., ODEN, J. et ZOHDI, T. I. (1998). Investigation of the interactions between the numerical and the modeling errors in the homogenized dirichlet projection method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 159(1):79 – 101.

[Negrello *et al.*, 2018] NEGRELLO, C., GOSSELET, P. et REY, C. (2018). A new impedance accounting for short- and long-range effects in mixed substructured formulations of nonlinear problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 114(7):675–693.

[Negrello *et al.*, 2016] NEGRELLO, C., GOSSELET, P., REY, C. et PEBREL, J. (2016). Substructured formulations of nonlinear structure problems –influence of the interface condition. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 107(13):1083–1105.

[Nemat-Nasser et Hori, 1993] NEMAT-NASSER, S. et HORI, M. (1993). *Micromechanics : Overall Properties of Heterogeneous Materials*, volume 37 de *North-Holland Series in Applied Mathematics and Mechanics*. Elsevier.

[Neto *et al.*, 2016] NETO, A. G., PIMENTA, P. M. et WRIGGERS, P. (2016). A master-surface to master-surface formulation for beam to beam contact. part i : frictionless interaction. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 303:400 – 429.

[Neto *et al.*, 2017] NETO, A. G., PIMENTA, P. M. et WRIGGERS, P. (2017). A master-surface to master-surface formulation for beam to beam contact. part ii : Frictional interaction. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 319:146 – 174.

[Nguyen et Peraire, 2008] NGUYEN, N. C. et PERAIRE, J. (2008). An efficient reduced-order modeling approach for non-linear parametrized partial differential equations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 76(1):27–55.

[Nouy, 2003] NOUY, A. (2003). *Une stratégie de calcul multiéchelle avec homogénéisation en temps et en espace pour le calcul de structures fortement hétérogènes*. Theses, École normale supérieure de Cachan - ENS Cachan.

[Nouy, 2010] NOUY, A. (2010). A priori model reduction through proper generalized decomposition for solving time-dependent partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(23):1603 – 1626.

[Nouy et Ladeveze, 2004] NOUY, A. et LADEVEZE, P. (2004). Multiscale computational strategy with time and space homogenization : A radial-type approximation technique for solving microproblems. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 2(4):1543–1649.

[Oden *et al.*, 1998] ODEN, J., BABUŜKA, I. et BAUMANN, C. E. (1998). A discontinuoushpfinite element method for diffusion problems. *Journal of Computational Physics*, 146(2):491 – 519.

[Oden et Zohdi, 1997] ODEN, J. et ZOHDI, T. I. (1997). Analysis and adaptive modeling of highly heterogeneous elastic structures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 148(3):367 – 391.

[Oden *et al.*, 1999] ODEN, J. T., VEMAGANTI, K. et MOËS, N. (1999). Hierarchical modeling of heterogeneous solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 172(1):3 – 25.

[Otaño Aramendi, 2016] OTAÑO ARAMENDI, N. (2016). *Réduction du coût de calcul pour la simulation du comportement mécanique de câbles*. Thèse de doctorat, CentraleSupélec.

[Otero *et al.*, 2018] OTERO, F., OLLER, S. et MARTINEZ, X. (2018). Multiscale computational homogenization : Review and proposal of a new enhanced-first-order method. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 25(2):479–505.

[Oumaziz, 2017] OUMAZIZ, P. (2017). *Une méthode de décomposition de domaine mixte non-intrusive pour le calcul parallèle d'assemblages*. Thèse de doctorat, ENS Cachan.

[Paleczny *et al.*, 2019] PALECZNY, C., CAUVILLE, B., GUIDAULT, P.-A. et BOUCARD, P.-A. (2019). Développement et validation d'un connecteur pour les assemblages boulonnés. *In 3e Colloque Supméca Alumni, Les assemblages mécaniques, évolutions récentes et perspectives*, Saint-Ouen, France.

[Palmonella *et al.*, 2004] PALMONELLA, M., FRISWELL, M. I., MOTTERSHEAD, J. E. et LEES, A. W. (2004). Guidelines for the implementation of the cweld and acm2 spot weld models in structural dynamics. *Finite Elements in Analysis and Design*, 41(2):193 – 210.

[Palmonella *et al.*, 2005] PALMONELLA, M., FRISWELL, M. I., MOTTERSHEAD, J. E. et LEES, A. W. (2005). Finite element models of spot welds in structural dynamics : review and updating. *Computers and Structures*, 83(8):648 – 661.

[Passieux, 2008] PASSIEUX, J.-C. (2008). *Approximation radiale et méthode LATIN multiéchelle en temps et espace*. Thèse de doctorat, ENS Cachan. 2008DENS0040.

[Passieux *et al.*, 2010] PASSIEUX, J. C., LADEVÈZE, P. et NÉRON, D. (2010). A scalable time–space multiscale domain decomposition method : adaptive time scale separation. *Computational Mechanics*, 46(4):621–633.

[Passieux *et al.*, 2013] PASSIEUX, J.-C., RÉTHORÉ, J., GRAVOUIL, A. et BAIETTO, M.-C. (2013). Local/global non-intrusive crack propagation simulation using a multigrid x-fem solver. *Computational Mechanics*, 52(6):1381–1393.

[Pebrel, 2009] PEBREL, J. (2009). *Décomposition de domaine et accélération Krylov pour la mécanique non linéaire*. Thèse de doctorat, ENS Cachan.

[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.

[Pezeshki *et al.*, 2018] PEZESHKI, M., LOEHNERT, S., WRIGGERS, P., GUIDAULT, P. A. et BARANGER, E. (2018). *3D Dynamic Crack Propagation by the Extended Finite Element Method and a Gradient-Enhanced Damage Model*, pages 277–299. Springer International Publishing, Cham.

[Quarteroni et Sacchi-Landriani, 1988] QUARTERONI, A. et SACCHI-LANDRIANI, G. (1988). Domain decomposition preconditioners for the spectral collocation method. *Journal of Scientific Computing*, 3(1):45–76.

[Radermacher et Reese, 2014] RADERMACHER, A. et REESE, S. (2014). Model reduction in elastoplasticity : Proper orthogonal decomposition combined with adaptive sub-structuring. *Computational Mechanics*, 54(3):677–687.

[Raviart et Thomas, 1977] RAVIART, P. A. et THOMAS, J. M. (1977). Primal hybrid finite element methods for 2nd order elliptic equations. *Mathematics of Computation*, 31(138):391–413.

[Rey *et al.*, 2016] REY, V., GOSSELET, P. et REY, C. (2016). Strict lower bounds with separation of sources of error in non-overlapping domain decomposition methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 108(9):1007–1029.

[Ribeaucourt *et al.*, 2007] RIBEAUCOURT, R., BAIETTO-DUBOURG, M.-C. et GRAVOUIL, A. (2007). A new fatigue frictional contact crack propagation model with the coupled x-fem/latin method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(33):3230 – 3247.

[Rixen et Farhat, 1999] RIXEN, D. et FARHAT, C. (1999). A simple and efficient extension of a class of substructure based preconditioners to heterogeneous structural mechanics problems. *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 44:489–516.

[Roussette *et al.*, 2009] ROUSSETTE, S., MICHEL, J. et SUQUET, P. (2009). Nonuniform transformation field analysis of elastic-viscoplastic composites. *Composites Science and Technology*, 69(1):22 – 27. Mechanical Response of Fibre Reinforced Composites.

[Roux, 2009] ROUX, F.-X. (2009). A FETI-2LM method for non-matching grids. *In* BERCOVIER, M., GANDER, M. J., KORNHUBER, R. et WIDLUND, O., éditeurs : *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XVIII*, pages 121–128, Berlin, Heidelberg. Springer Berlin Heidelberg.

[Roux *et al.*, 2003] ROUX, F.-X., MAGOULÈS, F., SALMON, S. et SERIES, L. (2003). Optimization of interface operator based on algebraic approach. *In* KEYES, D. E., WIDLUND, O. B. et AND, R. Y., éditeurs : *Fourteenth International Conference on Domain Decomposition Methods*.

[Roux *et al.*, 2005] ROUX, F.-X., MAGOULÈS, F., SERIES, L. et BOUBENDIR, Y. (2005). Approximation of optimal interface boundary conditions for two-lagrange multiplier FETI method. *In* BARTH, T. J., GRIEBEL, M., KEYES, D. E., NIEMINEN, R. M., ROOSE, D., SCHLICK, T., KORNHUBER, R., HOPPE, R., PÉRIAUX, J., PIRONNEAU, O., WIDLUND, O. et XU, J., éditeurs : *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering*, pages 283–290, Berlin, Heidelberg. Springer Berlin Heidelberg.

[Ryckelynck, 2005] RYCKELYNCK, D. (2005). A priori hyperreduction method : an adaptive approach. *Journal of Computational Physics*, 202(1):346 – 366.

[Saad et Schultz, 1986] SAAD, Y. et SCHULTZ, M. H. (1986). Gmres : A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 7(3):856–869.

[Saavedra *et al.*, 2012] SAAVEDRA, K., ALLIX, O. et GOSSELET, P. (2012). On a multiscale strategy and its optimization for the simulation of combined delamination and buckling. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 91(7):772–798.

[Salvini *et al.*, 2000] SALVINI, P., VIVIO, F. et VULLO, V. (2000). A spot weld finite element for structural modelling. *International Journal of Fatigue*, 22(8):645 – 656.

[Sanchez-Palencia, 1974] SANCHEZ-PALENCIA, E. (1974). Comportements local et macroscopique d'un type de milieux physiques heterogenes. *International Journal of Engineering Science*, 12(4): 331 – 351.

[Sanchez-Palencia, 1980] SANCHEZ-PALENCIA, E. (1980). *Non-Homogeneous Media and Vibration Theory*, volume 127 de *Lecture Notes in Physics*. Springer, Berlin, Heidelberg.

[Sauer et De Lorenzis, 2015] SAUER, R. et DE LORENZIS, L. (2015). An unbiased computational contact formulation for 3d friction. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 101(4):251–280.

[Shakoor *et al.*, 2017] SHAKOOR, M., BULJAC, A., NEGGERS, J., HILD, F., MORGENEYER, T. F., HELFEN, L., BERNACKI, M. et BOUCHARD, P.-O. (2017). On the choice of boundary conditions for micromechanical simulations based on 3d imaging. *International Journal of Solids and Structures*, 112:83 – 96.

[Siavelis *et al.*, 2010] SIAVELIS, M., MASSIN, P., GUITON, M. L., MAZET, S. et MOËS, N. (2010). Robust implementation of contact under friction and large sliding with the extended finite element method. *European Journal of Computational Mechanics*, 19(1-3):189–203.

[Soulé De Lafont *et al.*, 2014] SOULÉ DE LAFONT, M.-F., BOUCARD, P.-A. et GUIDAULT, P.-A. (2014). A finite element connector based on design parameters for the simulation of bolted assemblies. *In* B.H.V. TOPPING, P. I., éditeur : *Proceedings of the Twelfth International Conference on Computational Structures Technology*. Civil-Comp Press, Stirlingshire, UK.

[Spillane et Rixen, 2013] SPILLANE, N. et RIXEN, D. (2013). Automatic spectral coarse spaces for robust finite element tearing and interconnecting and balanced domain decomposition algorithms. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 95(11):953–990.

[Spring, 1986] SPRING, K. W. (1986). Euler parameters and the use of quaternion algebra in the manipulation of finite rotations : A review. *Mechanism and Machine Theory*, 21(5):365 – 373.

[Tannous *et al.*, 2014] TANNOUS, M., CARTRAUD, P., DUREISSEIX, D. et TORKHANI, M. (2014). A beam to 3d model switch in transient dynamic analysis. *Finite Elements in Analysis and Design*, 91:95 – 107.

[Tannous *et al.*, 2015] TANNOUS, M., CARTRAUD, P., DUREISSEIX, D. et TORKHANI, M. (2015). A beam to 3d model switch for rotor dynamics applications. *Engineering Structures*, 84:54 – 66.

[Tao-Yang et Abel, 1985] TAO-YANG, H. et ABEL, J. F. (1985). Adaptive substructuring techniques in elasto-plastic finite element analysis. *Computers and Structures*, 20(1):181 – 192. Special Issue : Advances and Trends in Structures and Dynamics.

[Tiirats *et al.*, 2020] TIIRATS, T., CHEVAUGEON, N., MOËS, N., STOLZ, C., MAROUF, N. et DESDOIT, E. (2020). How to efficiently apply soft thin coating to existing finite element contact model. *Finite Elements in Analysis and Design*, 177:103420.

[Toselli et Widlund, 2005] TOSELLI, A. et WIDLUND, O. B. (2005). *Domain Decomposition Methods — Algorithms and Theory*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.

[Treyssède *et al.*, 2013] TREYSSÈDE, F., FRIKHA, A. et CARTRAUD, P. (2013). Mechanical modeling of helical structures accounting for translational invariance. part 2 : Guided wave propagation under axial loads. *International Journal of Solids and Structures*, 50(9):1383 – 1393.

[Tvergaard, 1990] TVERGAARD, V. (1990). Analysis of tensile properties for a whisker-reinforced metal-matrix composite. *Acta Metallurgica et Materialia*, 38(2):185 – 194.

[van der Sluis *et al.*, 1999] VAN DER SLUIS, O., SCHREURS, P. et MEIJER, H. (1999). Effective properties of a viscoplastic constitutive model obtained by homogenisation. *Mechanics of Materials*, 31(11): 743 – 759.

[Vandoren *et al.*, 2013] VANDOREN, B., PROFT, K. D., SIMONE, A. et SLUYS, L. (2013). A novel constrained large time increment method for modelling quasi-brittle failure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 265:148 – 162.

[Verwaerde *et al.*, 2020] VERWAERDE, R., GUIDAULT, P.-A. et BOUCARD, P.-A. (2020). A nonlinear finite element connector for the simulation of bolted assemblies. *Computational Mechanics*, 65:1531–1548.

[Violeau, 2007] VIOLEAU, D. (2007). *Une stratégie de calcul pour l'analyse à l'échelle micro des endommagements jusqu'à rupture des composites stratifiés*. Thèse de doctorat, ENS Cachan. 2007DENS0012.

[Vivio, 2009] VIVIO, F. (2009). A new theoretical approach for structural modelling of riveted and spot welded multi-spot structures. *International Journal of Solids and Structures*, 46(22):4006 – 4024.

[Vivio *et al.*, 2002] VIVIO, F., FERRARI, G., SALVINI, P. et VULLO, V. (2002). Enforcing of an analytical solution of spot welds into finite element analysis for fatigue-life estimation. *International Journal of Computer Applications in Technology*, 15(4-5):218–229.

[Wangermez, 2020] WANGERMEZ, M. (2020). *Méthode de couplage surfacique pour modèles non-compatibles de matériaux hétérogènes : approche micro-macro et implémentation non-intrusive*. Thèse de doctorat, ENS Paris-Saclay.

[Wangermez *et al.*, 2020] WANGERMEZ, M., ALLIX, O., GUIDAULT, P.-A., CIOBANU, O. et REY, C. (2020). Interface coupling method for the global–local analysis of heterogeneous models : A second-order homogenization-based strategy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 365: 113032.

[Weeger *et al.*, 2017] WEEGER, O., NARAYANAN, B., LORENZIS, L. D., KIENDL, J. et DUNN, M. L. (2017). An isogeometric collocation method for frictionless contact of cosserat rods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 321:361 – 382.

[Whitcomb, 1991] WHITCOMB, J. (1991). Iterative global/local finite element analysis. *Computers and Structures*, 40(4):1027 – 1031.

[Whitcomb et Woo, 1993a] WHITCOMB, J. D. et WOO, K. (1993a). Application of iterative global/local finite-element analysis. part 1 : Linear analysis. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 9(9):745–756.

[Whitcomb et Woo, 1993b] WHITCOMB, J. D. et WOO, K. (1993b). Application of iterative global/local finite-element analysis. part 2 : Geometrically non-linear analysis. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 9(9):757–766.

[Wriggers, 2006] WRIGGERS, P. (2006). *Computational Contact Mechanics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2d édition.

[Wriggers et Zavarise, 1997] WRIGGERS, P. et ZAVARISE, G. (1997). On contact between three-dimensional beams undergoing large deflections. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 13(6):429–438.

[Yvonnet et He, 2007] YVONNET, J. et HE, Q.-C. (2007). The reduced model multiscale method (r3m) for the non-linear homogenization of hyperelastic media at finite strains. *Journal of Computational Physics*, 223(1):341 – 368.

[Zavarise et De Lorenzis, 2012] ZAVARISE, G. et DE LORENZIS, L. (2012). An augmented lagrangian algorithm for contact mechanics based on linear regression. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 91(8):825–842.

[Zavarise et Wriggers, 1999] ZAVARISE, G. et WRIGGERS, P. (1999). A superlinear convergent augmented lagrangian procedure for contact problems. *Engineering Computations*, 16(1):88–119.

[Zavarise et Wriggers, 2000] ZAVARISE, G. et WRIGGERS, P. (2000). Contact with friction between beams in 3-D space. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 49(8):977–1006.

[Zhang et Taylor, 2001] ZHANG, Y. et TAYLOR, D. (2001). Optimization of spot-welded structures. *Finite Elements in Analysis and Design*, 37(12):1013 – 1022.

[Zohdi *et al.*, 1996] ZOHDI, T. I., ODEN, J. et RODIN, G. J. (1996). Hierarchical modeling of heterogeneous bodies. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 138(1):273 – 298.

5 Preprints

Les pages suivantes regroupent les preprints des articles suivants :

PREPRINT 1 P.-A. Guidault and T. Belytschko. Bridging domain methods for coupled atomistic–continuum models with L^2 or H^1 couplings. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 77(11) :1566–1532, 2009.

PREPRINT 2 W. Wangermez, O. Allix, P.-A. Guidault, O. Ciobanu and C. Rey. Interface coupling method for the global-local analysis of heterogeneous models : a second-order homogenization-based strategy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 365, 2020.

PREPRINT 3 J. Hinojosa, O. Allix, P.-A. Guidault and Ph. Cresta. Domain decomposition methods with nonlinear localization for the buckling and post-buckling analyses of large structures. *Advances in Engineering Software*, 70 :13–24, 2014.

PREPRINT 4 M. Cremonesi, D. Néron, P.-A. Guidault and P. Ladevèze. A PGD-based homogenization technique for solving nonlinear multiscale problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 267 :275–292, 2013.

PREPRINT 5 M. Capaldo, P.-A. Guidault, D. Néron and P. Ladevèze. The Reference Point Method, a "hyperreduction" technique : Application to PGD-based nonlinear model reduction. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 322 :483–514, 2017.

PREPRINT 6 R. Verwaerde, P.-A. Guidault, P.-A. Boucard. A nonlinear finite element connector for the simulation of bolted assemblies. *Computational Mechanics*, 63 :1531–1548, 2020.

PREPRINT 7 F. Bussolati, P.-A. Guidault, M.L.E. Guiton, O. Allix and P. Wriggers. Robust contact and friction model for the fatigue estimate of a wire rope in the mooring line of a Floating Offshore Wind Turbine. *Lecture Notes in Application and Computational Mechanics*, 93 :249–270, 2020.

PREPRINT 1

P.-A. Guidault and T. Belytschko. Bridging domain methods for coupled atomistic-continuum models with L^2 or H^1 couplings. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 77(11):1566–1532, 2009.

Bridging domain methods for coupled atomistic-continuum models with L^2 or H^1 couplings

P.-A. Guidault[a], T. Belytschko[b]

[a] *LMT-Cachan (ENS de Cachan/CNRS/Université Paris 6/PRES UniverSud Paris)*
61, avenue du Président Wilson, 94235 Cachan CEDEX, France
[b] *Department of Mechanical Engineering, Northwestern University*
2145 Sheridan Road, Evanston, IL 60208-3111, USA

Abstract

A bridging domain method for coupled atomistic-continuum models is proposed that enables to compare various coupling terms. The approach does not require the finite element mesh to match the lattice spacing of the atomic model. It is based on an overlapping domain decomposition method that makes use of Lagrange multipliers and weight functions in the coupling zone in order to distribute the energy between the two competing models. Two couplings are investigated. The L^2 coupling enforces the continuity of displacements between the two models directly. The H^1 coupling involves the definition of a strain measure. For this purpose, a Moving Least-Square interpolant of the atomic displacement is defined. The choice of the weight functions is studied. Patch tests and a graphene sheet with a crack are studied. It is shown that both continous and discontinuous weight functions can be used with the H^1 coupling whereas the L^2 coupling requires continuous weight functions. For the examples developed herein, the L^2 coupling produces less error in the zone of interest. The flexibility of the H^1 coupling with constant weight function may be beneficial but the results may be affected depending on the topology of the bridging zone.

Keywords: Bridging-domain method, atomistic-continuum coupling, Lagrange multipliers, moving least-square interpolant

1. INTRODUCTION

We consider the coupling of atomistic methods with continuum mechanics. Such models are useful in the study of phenomena such as fracture and dislocations where molecular mechanics and/or quantum mechanics models are needed to model bond breaking. Generally, the quantum/atomistic model is limited to a small cluster about the interesting domain for computational tractability, see e.g. Khare et al. [1, 2], Wagner and Liu [3], Karpov et al. [4], Tang et al. [5], and molecular mechanics and/or continuum models are used for the rest of the domain. It is useful to use continuum mechanics far from the fracture since it is much faster than molecular or quantum mechanics.

Among the first atomistic/continuum models can be found the works of Baskes et al. [6] and Mullins and Dokainish [7]. The latter studied a plane crack in alpha iron. In their model, the finite

element mesh was coarser than the lattice constant. The displacements of atoms not coincident with finite element nodes were prescribed by using the finite element interpolation. This procedure is often called a master-slave approach [8]: the atoms were slaved to the finite element mesh.

Kohlhoff et al [9] similarly coupled finite elements with atomistics in a method called FEAt but they used a nonlocal elasticity theory for the continuum. The model was applied to the cleavage fracture of two b.c.c. crystalline materials, tungsten and iron. The FEAt method introduced a "pad", which overlaps the finite element model. However, the energy of the underlying finite element model is not included – its purpose is to provide the displacements of the pad atoms. At the atomistic/finite element interface, the nodes and atoms are coincident.

The quasicontinuum (QC) method [10] is aimed at making the transition to atomistics more seamless. Although the entire model is viewed as a finite element model, an accurate computation of the energy in the "atomistic" subdomain requires that the atoms be coincident with the finite element nodes. Knap and Ortiz [11] have developed a form of the QC method based on the concept of rep-atoms that bypass the distinction between atomistic and continuum domains. Several special purpose variants of the method have been developed. For example, Shilkrot et al. [12, 13] added the capability to pass dislocations to the continuum. Closed form solutions and superposition methods were used for this purpose. The specificities of some of those strategies are extensively reviewed in [14, 15].

Considerable interest in such multiscale methods has been aroused by Abraham et al [16] and Broughton et al [17, 18]. These works made the significant step of including quantum methods around the defect. Furthermore, in their atomistic/continuum coupling, the two models were overlapped and the contribution of each model to the total Hamiltonian was taken to be the average of the Hamiltonians (i.e. the energies) in the overlapping domain. The coupling procedure is only described briefly and appears to be rather *ad hoc*. They called the overlapping domain the "handshake" domain. In their models, the finite element size at the atomistic/continuum interface was the same as the lattice constant.

Recently, several methods have been developed for equilibrium solutions that do not require coincident nodes and atoms. Belytschko and Xiao [19] have developed an overlapping domain decomposition approach called the bridging domain method in which the energies of the atomistic and continuum models are scaled in the overlapping domain. Compatibility between the two models was enforced by Lagrange mutlipliers. Similar methods have been developed for molecular dynamics in Xiao and Belytschko [20]. Fish et al. [21] have developed a similar method in which the forces instead of the energies are scaled.

The evolution of the aforementioned methods parallels recent works in the finite element community on the "gluing" of disjoint meshes in an overlapping subdomain. Ben Dhia and Rateau [23, 24, 25, 26, 27] pioneered the Arlequin method. They also showed that for a constant scaling in the overlapping domain, such as in the original handshake methods of Abraham et al. [16], instabilities appear in the Lagrange multiplier problem according to the chosen coupling. In [28], a comparison of two coupling methods was made. To be more specific, in terms of an atomistic/continuum coupling, the total energy E_{tot} of the coupled model is given by:

$$E_{tot} = E_A + E_C - E_{ext} + \left(\boldsymbol{\lambda}\,,\,\delta\boldsymbol{u}\right)$$

where E_A is the atomistic energy, E_C the continuum energy, E_{ext} is the external work and $(\boldsymbol{\lambda}\,,\,\delta\boldsymbol{u})$ is a scalar product of the Lagrange multiplier field $\boldsymbol{\lambda}$ and the difference in displacements $\delta\boldsymbol{u}$. In [28], the two types of coupling $\left(\boldsymbol{\lambda}\,,\,\delta\boldsymbol{u}\right)$ proposed by Ben Dhia [27] were called L^2 and H^1 couplings,

and are given by:

$$\begin{aligned}\left(\boldsymbol{\lambda}\,,\,\delta\boldsymbol{u}\right)_{L^2(\Omega^B)} &= \int_{\Omega^B} \boldsymbol{\lambda}\cdot\delta\boldsymbol{u}\,\mathrm{d}\Omega = \int_{\Omega^B} \lambda_i\delta u_i\,\mathrm{d}\Omega \\ \left(\boldsymbol{\lambda}\,,\,\delta\boldsymbol{u}\right)_{H^1(\Omega^B)} &= \int_{\Omega^B} \boldsymbol{\lambda}\cdot\delta\boldsymbol{u} + l^2\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\lambda}):\boldsymbol{\varepsilon}(\delta\boldsymbol{u})\,\mathrm{d}\Omega = \int_{\Omega^B} \lambda_i\delta u_i + l^2\lambda_{i,j}\delta u_{i,j}\,\mathrm{d}\Omega\end{aligned}$$

In the above, the coupling expressions in both vector and indicial notation are given; in the latter, repeated indices are summed over their range. The energy scaling is obtained through the use of weight functions that distribute the energy between the models within the coupling zone. Ben Dhia showed that H^1 coupling was stable whatever the choice of the weight functions. In [28], we showed by numerical examples that both L^2 and H^1 coupling can be stable. More precisely, through an analysis of the local equations, it was shown that continuous weight functions are required for the L^2 coupling to be stable whereas both discontinuous or continuous weight functions can be used for the H^1 coupling. Since the construction of continuous weight functions can be cumbersome, the possibility to use the H^1 coupling is appealing because it allows constant weight functions. In addition, it was shown that the H^1 coupling can be benefical for coupling a very coarse mesh with a very fine one. However, it requires the computation of displacement derivatives which is not obvious for the coupling of a continuum model and an atomistic one.

The purpose of this paper is to develop a H^1 coupling for atomistic/continuum models and to compare the behavior of both L^2 and H^1 bridging domain couplings, which fall broadly in the framework of the Arlequin method. In [29, 30], Arlequin couplings of particle and continuum models were previously proposed, and they showed that the method is well-posed, although principally in the context of coincident nodes and atoms. In this paper, as in [20] and [28], the coupling method does not require the finite element mesh to match the lattice spacing of the atomic model. The bridging domain method using Lagrange multipliers is described in Section 2. The basics of the coupling methods are first presented. For the H^1 coupling, a continuous Moving Least-Square (MLS) interpolant [31, 32] of the displacement of atoms located within the coupling zone is defined. The numerical implementation is presented in Section 3. The discretization of the problem as well as the numerical integration of the coupling terms are detailed. The paper ends with some numerical examples in Section 4 to show the performance of the two couplings and some conclusions in Section 5.

2. THE BRIDGING DOMAIN METHOD WITH L^2 OR H^1 COUPLINGS

2.1. Reference problem and notations

Let us consider, an equilibrium state of a solid body on the domain Ω_0 in the initial configuration, which occupies the domain $\Omega(t)$ at instant t. The index 0 refers to quantities defined at $t = 0$. The index t is omitted in the following when no confusion is possible. The body is subjected to a body force $\bar{\boldsymbol{b}}_0$ and a prescribed traction $\bar{\boldsymbol{t}}_0$ on the undeformed portion $\partial_t\Omega_0$ of the boundary $\partial\Omega_0$. On the complementary part of the boundary, $\partial_u\Omega_0$, the displacement $\bar{\boldsymbol{u}}_0$ is prescribed (Figure 1).

The domain Ω_0 is partitioned into three subdomains: an atomistic subdomain, Ω_0^A, a continuum subdomain, Ω_0^C and an overlapping subdomain, $\Omega_0^B = \Omega_0^A \cap \Omega_0^C$, where the atomistic and the continuum models overlap. The latter is often called the bridging or handshake domain. The superscripts "C" (continuum), "A" (atomistic) and "B" (bridging) identify the associated variables.

Material points are denoted by $\boldsymbol{X} \in \Omega_0^C$ in the initial configuration and the deformation mapping by $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{X}, t)$. The initial position of atom α is denoted by $\boldsymbol{X}_\alpha$ and its current position is denoted by $\boldsymbol{x}_\alpha$.

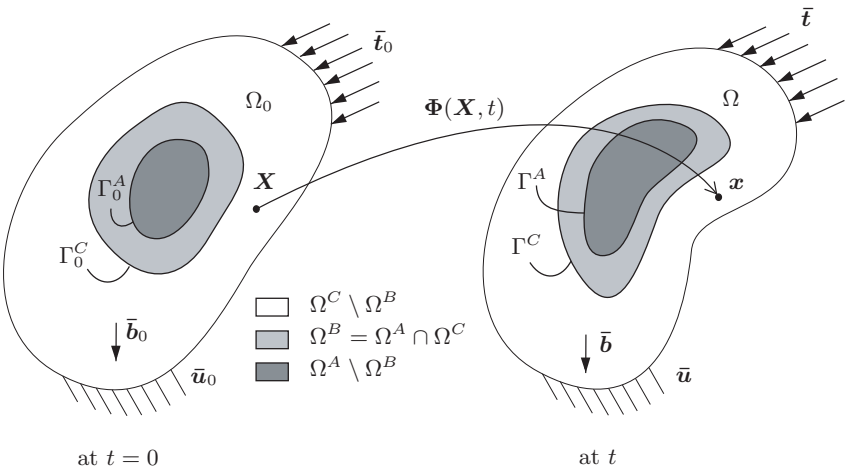


Figure 1: Overlapping domains Ω^C and Ω^A and bridging domain Ω^B such that $meas(\Omega^B) \neq 0$ in the current configuration and at instant t

2.2. The coupling method: basics

The coupling of the atomistic and continuum models is achieved by introducing a Lagrange multiplier field, $\boldsymbol{\lambda}$, to enforce the continuity of displacement in the coupling zone $\Omega^B = \Omega^A \cap \Omega^C$ in a weak sense. Weight functions are used to distribute the energy between the two models in Ω^B so that the global energy of the domain is not counted twice in the bridging domain.

The total free energy E_{tot} is defined as the sum of the strain energy of the continuum subdomain, denoted E_C, and the potential energy of the atomistic subdomain, denoted E_A, minus the external work E_{ext} on both subdomains:

$$E_{tot} = E_C + E_A - E_{ext} \tag{1}$$

Assuming that a strain-energy density function $W(\boldsymbol{F})$ exists for the continuum model where $\boldsymbol{F}$ is the deformation tensor given by:

$$\boldsymbol{F} = \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{I} + \frac{\partial \boldsymbol{u}^C}{\partial \boldsymbol{X}}$$

where $\boldsymbol{u}^C = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{X}$ is the displacement vector, and by denoting $V_{\alpha\beta}$ the atomistic interaction potential between atoms α and β, E_C and E_A are defined as follows:

$$E_C = \int_{\Omega_0^C} w^C(\boldsymbol{X})\, W\big(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}^C)\big)\, \mathrm{d}\Omega_0 \tag{2}$$

$$E_A = \sum_{\alpha \in \Omega_0^A} \left[\sum_{\beta > \alpha} w^A\left(\frac{1}{2}(\boldsymbol{X}_\alpha + \boldsymbol{X}_\beta)\right) V_{\alpha\beta} \right] \tag{3}$$

where the weight functions w^C and w^A define a *partition of unity* of the energy:

$$\begin{cases} w^C(\boldsymbol{X}) = 1 & \text{for } \boldsymbol{X} \in \Omega_0^C \setminus \Omega_0^B \\ w^A(\boldsymbol{X}) = 1 & \text{for } \boldsymbol{X} \in \Omega_0^A \setminus \Omega_0^B \\ w^C(\boldsymbol{X}) + w^A(\boldsymbol{X}) = 1 & \text{for } \boldsymbol{X} \in \Omega_0^B \end{cases} \tag{4}$$

The weight functions w^C and w^A are assumed to be positive and piecewise continuous respectively in Ω_0^C and Ω_0^A. We assume that they are also continuous within the coupling zone Ω_0^B. Thus, they may be discontinuous at the interfaces Γ_0^C and Γ_0^A (Figure 1). Specific expressions for the weight functions will be given later.

The expression of the external work E_{ext} is:

$$E_{ext} = \int\limits_{\partial_t\Omega_0^C} w^C(\boldsymbol{X})\,\bar{\boldsymbol{t}}_0 \cdot \boldsymbol{u}^C \,\mathrm{d}\Gamma_0 + \int\limits_{\Omega_0^C} w^C(\boldsymbol{X})\,\bar{\boldsymbol{b}}_0 \cdot \boldsymbol{u}^C \,\mathrm{d}\Omega_0 + \int\limits_{\Omega_0^A} w^A(\boldsymbol{X})\,\bar{\boldsymbol{b}}_0 \cdot \boldsymbol{u}^A \,\mathrm{d}\Omega_0 \tag{5}$$

where the traction $\bar{\boldsymbol{t}}_0$ is applied only on the portion $\partial_t\Omega_0^C$ of the boundary of Ω_0^C for sake of simplicity. In the following, body forces $\bar{\boldsymbol{b}}_0$ will be set to zero to simplify the description of the coupling strategy.

In [20] and [33], the coupling of the atomistic and the continuum models is achieved by enforcing the displacement compatibility in the bridging domain in a weak sense:

$$\boldsymbol{u}^C(\boldsymbol{X}_\alpha) = \boldsymbol{u}^A_\alpha \quad \text{for all atoms } \alpha \in \Omega_0^B \tag{6}$$

where $\boldsymbol{u}^A_\alpha = \boldsymbol{x}_\alpha - \boldsymbol{X}_\alpha$ is the displacement vector of atom α. These compatibility conditions are imposed by Lagrange multipliers so the resulting energy functional is:

$$J = E_{tot} + \sum_{\alpha\in\Omega_0^B} \int\limits_{\Omega_0^B} \boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{X}) \cdot \left[\boldsymbol{u}^C(\boldsymbol{X}) - \boldsymbol{u}^A_\alpha\right] \delta(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}_\alpha)\,\mathrm{d}\Omega_0 \tag{7}$$

where $\delta(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}_\alpha)$ is the Dirac delta function and $\boldsymbol{X}_\alpha$ is the original position of atom α. In the above expression, the coupling term is left in an integral form since the Lagrange multiplier is approximated by fields. This approach differs from a collocation method and enables one to use a mesh for the continuum model which does not necessarily conform to the crystal lattice.

In this paper, an intermediate field $\boldsymbol{u}^B$ is introduced in the bridging domain. The way to define $\boldsymbol{u}^B$ as an interpolant function of the position of each atom located in the coupling zone is described in subsection 2.3. It is based on a Moving Least-Square (MLS) approximation. The displacement compatibility (6) becomes:

$$\boldsymbol{u}^C(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{u}^B(\boldsymbol{X}), \quad \forall\, \boldsymbol{X} \in \Omega_0^B \tag{8}$$

Contrary to the compatibility conditions (6) which is defined discretely for each atom within the coupling zone, (8) is defined continuously for all $\boldsymbol{X}$ in Ω_0^B. As previously done, a Lagrange multiplier field $\boldsymbol{\lambda}$ is used to enforce the displacement continuity (8) in a weak sense and, more precisely, in the sense of the scalar product $\left(\boldsymbol{\lambda}\,,\,\boldsymbol{u}^C - \boldsymbol{u}^B\right)$. Herein, two scalar products are studied:

$$\left(\boldsymbol{\lambda}\,,\,\boldsymbol{u}^C - \boldsymbol{u}^B\right)_{L^2(\Omega_0^B)} = \int\limits_{\Omega_0^B} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\boldsymbol{u}^C - \boldsymbol{u}^B)\,\mathrm{d}\Omega_0 = \int\limits_{\Omega_0^B} \lambda_i (u_i^C - u_i^B)\,\mathrm{d}\Omega_0 \tag{9}$$

$$\begin{aligned}\left(\boldsymbol{\lambda}\,,\,\boldsymbol{u}^C - \boldsymbol{u}^B\right)_{H^1(\Omega_0^B)} &= \int\limits_{\Omega_0^B} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\boldsymbol{u}^C - \boldsymbol{u}^B) + l^2 \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\lambda}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}^C - \boldsymbol{u}^B)\,\mathrm{d}\Omega_0 \\ &= \int\limits_{\Omega_0^B} \lambda_i\,(u_i^C - u_i^B) + l^2 \lambda_{i,j}\,(u^C_{i,j} - u^B_{i,j})\,\mathrm{d}\Omega_0 \end{aligned} \tag{10}$$

where l corresponds to a characteristic dimension of the coupling zone Ω_0^B. This parameter has the unit of length. It is introduced so that the two terms of the H^1 coupling (10) have the same units and provides a useful scaling between the coupling terms. The L^2 coupling (9) only enforces the displacement continuity in a weak sense.

The H^1 coupling proposed in [23, 24], involves both the displacements and the strains. Its name originates from the fact that it defines a natural scalar product on the Sobolev space $H^1(\Omega_0^B)$ [35]. In the same manner, the L^2 coupling defines a scalar product on the Lebesgue space $L^2(\Omega_0^B)$, the class of all measurable functions ($\int_{\Omega_0^B} |\boldsymbol{u}|^2 \mathrm{d}\Omega_0 < \infty$) defined in Ω_0^B. The functional (7) becomes:

$$J = E_{tot} + \left(\boldsymbol{\lambda}\,,\,\boldsymbol{u}^C - \boldsymbol{u}^B\right)_{L^2(\Omega_0^B)\,or\,H^1(\Omega_0^B)} \tag{11}$$

The stationarity of this functional J gives rise to a saddle-point problem which is detailed in subsection 2.4. Prior to that, the definition of the interpolant $\boldsymbol{u}^B$ is clarified.

2.3. MLS-based interpolant of the atomistic displacement on Ω^B

In order to test and to compare the behavior of the L^2 and the H^1 couplings for continuum and atomistic models, the intermediate field $\boldsymbol{u}^B$ is introduced. Here it is uniquely defined by a MLS interpolant [31, 32] of the atomistic displacement within the coupling zone Ω_0^B. It is developed so that it is a continuously differentiable function that conforms to the atomistic displacements.

2.3.1. Moving least-square approximation of the bridging field $\boldsymbol{u}^B$

A MLS approximation is used in the following form for the vector field $\boldsymbol{u}^B$ defined in the coupling zone Ω_0^B. Thus,

$$\boldsymbol{u}^B(\boldsymbol{X}) = \sum_{\alpha=1}^{n_a^B} N_\alpha^{mls}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{u}_\alpha^B = \boldsymbol{N}^{mls}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{h}^B \tag{12}$$

where $\boldsymbol{u}_\alpha^B$ is the vectorial degree of freedom associated with the atom/particle α and $\boldsymbol{h}^B$ is the vector of unknowns (note it is not the displacement of atom α because MLS is not an interpolant) ; see [32] on how to construct the MLS approximation. The sum in (12) is done over the n_a^B atoms located in Ω_0^B. In two dimensions, $\boldsymbol{u}_\alpha^B = \{u_{x\alpha}^B, u_{y\alpha}^B\}^T$ and $\boldsymbol{N}^{mls}(\boldsymbol{X})$ is given by:

$$\boldsymbol{N}^{mls}(\boldsymbol{X}) = \begin{bmatrix} N_1^{mls}(\boldsymbol{X}) & 0 & N_2^{mls}(\boldsymbol{X}) & 0 & \dots & N_{n_a^B}^{mls}(\boldsymbol{X}) & 0 \\ 0 & N_1^{mls}(\boldsymbol{X}) & 0 & N_2^{mls}(\boldsymbol{X}) & \dots & 0 & N_{n_a^B}^{mls}(\boldsymbol{X}) \end{bmatrix}$$

where the MLS shape functions are given by:

$$[N_1^{mls}(\boldsymbol{X}), N_2^{mls}(\boldsymbol{X}), \dots, N_{n_a^B}^{mls}(\boldsymbol{X})] = \boldsymbol{p}^T(\boldsymbol{X})\boldsymbol{M}^{-1}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{B}(\boldsymbol{X}) \tag{13}$$

where $\boldsymbol{M}$ is the moment matrix. See [32] for the definitions of $\boldsymbol{M}$ and $\boldsymbol{B}$. In the following, a linear basis is used:

$$\boldsymbol{p}(\boldsymbol{X})^T = [1, X, Y] \quad \text{with } \boldsymbol{X} = (X, Y) \tag{14}$$

A fourth order spline [36] is chosen as the weight function for the MLS approximation:

$$w^{mls}(r) = \begin{cases} 1 - 6r^2 + 8r^3 - 3r^4 & \text{for } r \leq 1 \\ 0 & \text{for } r > 1 \end{cases}$$

where $r = \frac{\|\boldsymbol{X} - \boldsymbol{X}_\alpha\|}{\rho}$. ρ is the dilation parameter. ρ depends on the lattice constant between two atoms. The choice of ρ will be discussed later.

2.3.2. Transformation method

In order to define a continuous interpolant of the atomistic displacements, the transformation method [37, 38, 39] is used to define the relation between the displacement field $\boldsymbol{u}^B$ and the displacements of the atoms, $\{\boldsymbol{u}_\alpha^A\}_{\alpha=1,n_a^H}$, within the coupling zone Ω_0^B. More precisely, we want to enforce in a strong sense the following displacement compatibility:

$$\boldsymbol{u}^B(\boldsymbol{X}_\alpha) = \boldsymbol{u}_\alpha^A \quad \text{for all atoms } \alpha \in \Omega_0^B \tag{15}$$

The basic idea of the transformation method is to define a relation between the function values $\{\boldsymbol{u}^B(\boldsymbol{X}_\alpha)\}_{\alpha=1,n_a^B}$ and the nodal values $\{\boldsymbol{u}_\alpha^B\}_{\alpha=1,n_a^B}$. Due to the lack of Kronecker delta property ($N_\alpha^{mls}(\boldsymbol{X}_\beta) \neq \delta_{\alpha\beta}$) of the MLS shape functions, one has $\boldsymbol{u}^B(\boldsymbol{X}_\alpha) \neq \boldsymbol{u}_\alpha^B$. However, according to (12):

$$\boldsymbol{u}^B(\boldsymbol{X}_\alpha) = \boldsymbol{N}^{mls}(\boldsymbol{X}_\alpha)\boldsymbol{h}^B \quad \text{for all atoms } \alpha \in \Omega_0^B \tag{16}$$

By combining (15) and (16), we can find an invertible $n_a^B \times n_a^B$ matrix $\boldsymbol{D}$ such that:

$$\boldsymbol{a}^B = \boldsymbol{D}\boldsymbol{h}^B \quad \text{and} \quad \boldsymbol{h}^B = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{a}^B \tag{17}$$

where

$$\boldsymbol{D} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{N}^{mls}(\boldsymbol{X}_1) \\ \boldsymbol{N}^{mls}(\boldsymbol{X}_2) \\ \vdots \\ \boldsymbol{N}^{mls}(\boldsymbol{X}_{n_a^B}) \end{bmatrix}.$$

and $\boldsymbol{a}^B$ is the vector of unknowns which contains the displacements of the atoms, $\{\boldsymbol{u}_\alpha^A\}_{\alpha=1,n_a^B}$, located inside the bridging domain Ω_0^B. Substituting (17) in (12) leads to the relation:

$$\boldsymbol{u}^B(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{N}^{mls}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{a}^B \tag{18}$$

Equation (18) enables to define an interpolant operator Π of the displacements of the atoms, $\{\boldsymbol{u}_\alpha^A\}_{\alpha=1,n_a^B}$, such that :

$$\boldsymbol{u}^B(\boldsymbol{X}) = \Pi\big(\{\boldsymbol{u}_\alpha^A\}_{\alpha=1,n_a^B}\big) \tag{19}$$

Remark 1. *The transformation method requires the triangulation and the storage of a $n_a^B \times n_a^B$ full matrix $\boldsymbol{D}^{-1}$. To reduce this computational effort, it is possible to define a decomposition of the bridging domain Ω_0^B in n subdomains and to repeat the process for each subdomain. This would lead to n displacement fields $\boldsymbol{u}_i^B$, n matrices $\boldsymbol{D}_i$ and n relations: $\boldsymbol{u}_i^B(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{N}_i^{mls}(\boldsymbol{X})\boldsymbol{D}_i^{-1}\boldsymbol{a}_i^B$ for $i = 1, ..., n$.*

Remark 2. *The transformation is used in conjonction with a Lagrangian description. Thus, the triangulation of $\boldsymbol{D}$ has to be performed only once at the beginning of the computation since it is expressed in terms of Lagrangian coordinates.*

Remark 3. *The interpolant operator Π can be built through others techniques. In particular, it is possible to use a classical finite element interpolant through a Delaunay triangulation [40] based on the atom locations. In this case, since finite element shape functions satisfy the Kronecker delta property, enforcing the kinematic relation (15) is straightforward. There is no need to invert the $\boldsymbol{D}$ matrix that would be the identity matrix.*

2.4. Problem formulation

The saddle-point problem corresponding to the stationarity of the functional (11) can be written in the initial, undeformed configuration as follows:

Problem 1. *Find $(\boldsymbol{u}^C, \{\boldsymbol{u}_\alpha^A\}_{\alpha=1,n_a}, \boldsymbol{\lambda}) \in \mathcal{U}_C \times \mathcal{U}_A \times \mathcal{M}$ such that:*

$$\forall\, \delta\boldsymbol{u}^C \in \mathcal{U}_C^0, \qquad \int_{\Omega_0^C} w^C\, \boldsymbol{P} : \frac{\partial \delta\boldsymbol{u}^C}{\partial \boldsymbol{X}} \mathrm{d}\Omega_0 + \big(\boldsymbol{\lambda}\,,\, \delta\boldsymbol{u}^C\big) = \int_{\partial_t\Omega_0^C} w^C\, \bar{\boldsymbol{t}} \cdot \delta\boldsymbol{u}^C \frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}\Gamma_0}\, \mathrm{d}\Gamma_0 \tag{20}$$

$$\forall\, \{\delta\boldsymbol{u}_\alpha^A\}_{\alpha=1,n_a} \in \mathcal{U}_A^0, \qquad \sum_{\alpha\in\Omega_0^A} \left[\sum_{\beta>\alpha} w^A \frac{\partial V_{\alpha\beta}}{\partial \boldsymbol{u}_\alpha^A} \delta\boldsymbol{u}_\alpha^A \right] - \Big(\boldsymbol{\lambda}\,,\, \Pi\big(\{\delta\boldsymbol{u}_\alpha^A\}_{\alpha=1,n_a^B}\big)\Big) = 0 \tag{21}$$

$$\forall\, \delta\boldsymbol{\lambda} \in \mathcal{M}, \qquad \Big(\delta\boldsymbol{\lambda}\,,\, \boldsymbol{u}^C - \Pi\big(\{\boldsymbol{u}_\alpha^A\}_{\alpha=1,n_a^B}\big)\Big) = 0 \tag{22}$$

where $\mathcal{U}_C = [H^1(\Omega_0^C]^d$, $\mathcal{U}_C^0 = \big\{\boldsymbol{u}^C \in \mathcal{U}_C \,|\, \boldsymbol{u}^C = 0$ on $\partial_u\Omega_0^C\big\}$, $\mathcal{U}_A = \mathcal{U}_A^0 = [\mathbb{R}^d]^{n_a}$ and $\mathcal{M} = [H^1(\Omega_0^B)]^d$ in dimension d. n_a is the number of atoms in Ω_0^A. n_a^B is the number of atoms in Ω_0^B. $\boldsymbol{P}$ is the first Piola-Kirchhoff stress tensor associated with the continuum model. The coupling term $\big(\boldsymbol{\lambda}\,,\, \boldsymbol{u}\big)$ refers to the L^2 coupling (9) or the H^1 coupling (10).

Note that if $\boldsymbol{u}^B$ was defined over the whole atomistic domain nothing would prevent us to use this interpolant function to express the atomistic energy. In this case, the stationarity of the functional would be expressed in terms of $\boldsymbol{u}^C$ and $\boldsymbol{u}^B$ only. However, it would prevent the atomistic model to "express itself" since it would inherit the smoothness and the regularity of the MLS approximation space. Even though this can be acceptable in the bridging domain, it may not be relevant in the vicinity of defects or crack tips where bond breaking may occur. Moreover, defining $\boldsymbol{u}^B$ with the MLS approximation over the whole atomistic domain would be expensive. Thus, we prefered to define the interpolant $\boldsymbol{u}^B$ only in the bridging zone and to set the problem in terms of $\boldsymbol{u}^C$ and $\boldsymbol{u}^A$.

In the following, the domain $\Omega = \Omega^B \cup \Omega^A$ is assumed to satisfy the assumption of small displacements. The current configuration Ω is similar to the initial configuration Ω_0. No distinction is made between $\boldsymbol{x}$ and $\boldsymbol{X}$. The behavior of the continuum model is also assumed to remain linear elastic. Thus:

$$\boldsymbol{\sigma}^C = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^C \quad \text{on } \Omega^C \text{ with } \boldsymbol{\varepsilon}^C_{ij} = \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}(\boldsymbol{u}^C) \stackrel{def}{=} \frac{1}{2}(\boldsymbol{u}^C_{i,j} + \boldsymbol{u}^C_{j,i}) \tag{23}$$

where $\boldsymbol{\sigma}^C$ is the Cauchy stress tensor associated with the continuum model and $\mathbf{C}$ is the Hookean tensor.

3. NUMERICAL IMPLEMENTATION

3.1. Discretization of the problem

In this section, the assumption of small displacements is made (see Section 2.4). The displacement field $\boldsymbol{u}^C$ and the Lagrange multiplier field $\boldsymbol{\lambda}$ are approximated by classical finite element shape functions, as follows:

$$\boldsymbol{u}^C(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n_c} N_i^C(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{u}_i^C \tag{24}$$

$$\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n_\lambda} N_i^\lambda(\boldsymbol{x}) \tilde{\boldsymbol{\lambda}}_i \tag{25}$$

where n_c and n_λ are respectively the number of nodes for the continuum mesh and for the Lagrange multiplier mesh. The displacement $\boldsymbol{u}^B$ is defined by (18).

Let $\boldsymbol{d}$ be the vector of unknows for the continuum model and $\boldsymbol{a}$ the vector of unknowns for the atomistic model. $\boldsymbol{d}$ is split into two sets of unknowns. $\boldsymbol{d}_C$ contains the displacements of the nodes located in the continuum subdomain exclusive of the bridging domain Ω^B. $\boldsymbol{d}_B$ contains the displacements of the nodes located in Ω^B. The same partitioning is done for $\boldsymbol{a}$. Thus, $\boldsymbol{d} = \{\boldsymbol{d}_C, \boldsymbol{d}_B\}^T$ and $\boldsymbol{a} = \{\boldsymbol{a}_A, \boldsymbol{a}_B\}^T$. The vector of unknows for the Lagrange multiplier $\boldsymbol{\lambda}$ is denoted by $\tilde{\boldsymbol{\lambda}} = \{\tilde{\boldsymbol{\lambda}}_i\}$. The discretization of Problem 1 leads to the following system of equations:

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{K}_{CC} & \boldsymbol{K}_{CB} & 0 & 0 & 0 \\ \boldsymbol{K}_{CB}^T & \boldsymbol{K}_{BB} & 0 & 0 & \boldsymbol{G}^T \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\boldsymbol{D}^{-T}\boldsymbol{H}^T \\ 0 & \boldsymbol{G} & 0 & -\boldsymbol{H}\boldsymbol{D}^{-1} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{d}_C \\ \boldsymbol{d}_B \\ \boldsymbol{a}_A \\ \boldsymbol{a}_B \\ \tilde{\boldsymbol{\lambda}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{F}_C^{ext} \\ 0 \\ -\boldsymbol{f}_A^{int} \\ -\boldsymbol{f}_B^{int} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{26}$$

where $\boldsymbol{K}_{CC}$, $\boldsymbol{K}_{CB}$ and $\boldsymbol{K}_{BB}$ are submatrices of the "weighted" stiffness matrice $\boldsymbol{K}$. On an element e of the mesh associated with the continuum model, the stiffness matrix $\boldsymbol{K}^e$ is given by:

$$K^e_{ij} = \int_{\Omega_e} w^C \boldsymbol{B}^{C^T}_i \boldsymbol{C} \boldsymbol{B}^C_j \, \mathrm{d}\Omega_e \quad \text{with} \quad \boldsymbol{B}^C_i = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial N_i^C}{\partial x} & 0 \\ 0 & \dfrac{\partial N_i^C}{\partial y} \\ \dfrac{\partial N_i^C}{\partial x} & \dfrac{\partial N_i^C}{\partial x} \end{bmatrix} \quad \text{in two dimensions}$$

On an element e of the Lagrange multiplier mesh, the coupling terms $\boldsymbol{G}^e$ and $\boldsymbol{H}^e$ can be written for two dimensions as:

$$G_{ij}^e = \int_{\Omega_e} \begin{bmatrix} N_i^\lambda & 0 \\ 0 & N_i^\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_j^C & 0 \\ 0 & N_j^C \end{bmatrix} + l^2 \boldsymbol{B}_i^{\lambda T} \boldsymbol{B}_j^C \, \mathrm{d}\Omega_e \tag{27}$$

$$H_{ij}^e = \int_{\Omega_e} \begin{bmatrix} N_i^\lambda & 0 \\ 0 & N_i^\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_j^{mls} & 0 \\ 0 & N_j^{mls} \end{bmatrix} + l^2 \boldsymbol{B}_i^{\lambda T} \boldsymbol{B}_j^{mls} \, \mathrm{d}\Omega_e \tag{28}$$

where $\boldsymbol{B}_i^\lambda$ and $\boldsymbol{B}_i^{mls}$ are defined similarly to $\boldsymbol{B}_i^C$. The internal forces $\boldsymbol{f}^{int} = \{\boldsymbol{f}_A^{int}, \boldsymbol{f}_B^{int}\}^T$ for the atomistic model are defined by:

$$\boldsymbol{f}^{int} = \sum_{\alpha \in \Omega^A} \left[\sum_{\beta > \alpha} w^A \left(\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}_\alpha + \boldsymbol{x}_\beta) \right) \frac{\partial V_{\alpha\beta}}{\partial \boldsymbol{u}_\alpha^A} \right] \tag{29}$$

Note that the weight function w^A is computed at the midpoint between atoms α and β ; this midpoint form was proposed in Zhang et al. [34]. Badia et al. [22] have shown that the midpoint form is crucial for passing the patch test.

A full-Newton method is used to directly solve the whole system (26). Here, we are mainly concerned with the comparison of the different couplings. Consequently, the study does not focus on the choice of a particular solver. A more efficient computational strategy is described in [33].

3.2. Numerical integration of the coupling terms

The numerical integration of the coupling terms (27) and (28) requires some explanation. The mesh of the continuum model, denoted by M_C and the mesh of the Lagrange multipliers, denoted by M_λ, are generally nonconforming. Moreover, the support of the MLS shape functions and the support of the shape functions of M_λ are different. For the coupling term (27) between the two finite element meshes M_C and M_λ, one could use the hierarchical or adaptive integration techniques described in the Arlequin method [25, 26, 27]. Furthermore, according to [28], the mesh M_λ can be chosen to conform to the mesh M_C on the coupling zone Ω^B. Thus, $N_i^\lambda(\boldsymbol{x}) = N_i^C(\boldsymbol{x})$ on Ω^B. Consequently, only the computation of the coupling term (28) will be explained here.

The numerical integration of (28) can be written as follows:

$$H_{ij}^e = \sum_{e \in M_\lambda} \sum_{\boldsymbol{x}_g \in e} \rho_g \begin{bmatrix} N_i^\lambda(\boldsymbol{x}_g) & 0 \\ 0 & N_i^\lambda(\boldsymbol{x}_g) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_j^{mls}(\boldsymbol{x}_g) & 0 \\ 0 & N_j^{mls}(\boldsymbol{x}_g) \end{bmatrix} + l^2 \boldsymbol{B}_i^\lambda(\boldsymbol{x}_g)^T \boldsymbol{B}_j^{mls}(\boldsymbol{x}_g)$$

where $\boldsymbol{x}_g$ and ρ_g are respectively the coordinates and the integration weight of an integration point on the element e of the Lagrange multiplier mesh M_λ. The same integration points are used to compute (27).

The choice of the integration rule depends on the interatomic distance of the atomistic model. The mesh M_λ is chosen as being the support of a hierarchical integration rule for each of its elements (Figure 2). The hierarchical level is defined so that the characteristic dimension of an integration sub-cell is equivalent to the interatomic distance r_0. This integration technique based on M_λ is similar to the one used in some of the meshless methods called pseudo-meshless [42]. Since the integration mesh defined by M_λ is not "aligned" with the support of the MLS shape functions, the accuracy of the computation of (28) is definitely affected. In this work, a 5×5 Gauss point rule was used and gave good results.

Remark 4. *The computation of* (27) *requires the evaluation of the shape functions N_i^C of the mesh M_C (continuum model). These finite element shape functions being defined in a reference (local) coordinate system with a particular mapping for each element, a non-linear problem (inverse*

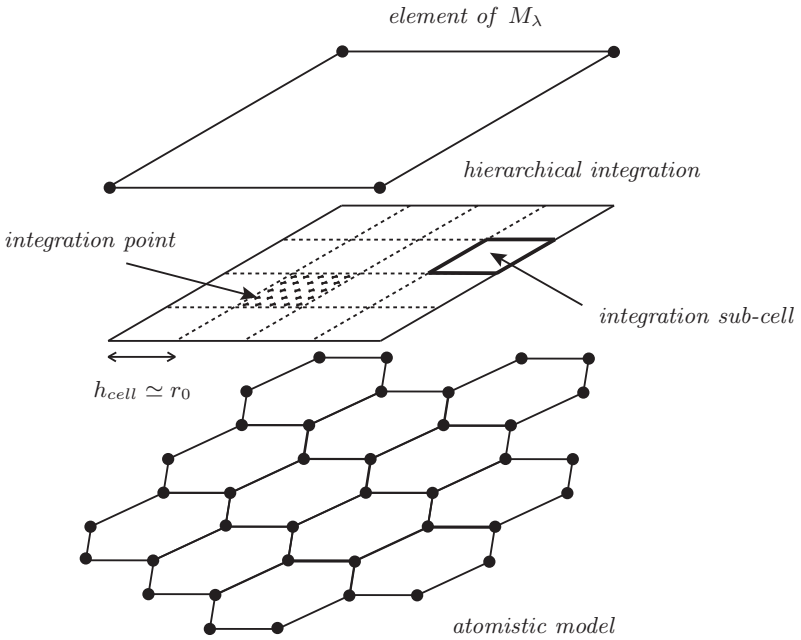


Figure 2: Integration rule for the coupling terms on an element of M_λ. Hierarchical integration with a 5×5 Gauss points rule in each integration sub-cell the characteristic size of which is $h_{cell} \simeq r_0$.

mapping technique) has to be solved at each integration point $\boldsymbol{x}_g$ of M_λ in order to determine its reference (local) coordinates from its real (global) coordinates. Note that the MLS shape functions are expressed in terms of the physical coordinate system. Thus, this problem does not occur for the evaluation of the shape functions N_i^{mls} in (28).

4. COMPARISON OF THE H^1 AND THE L^2 COUPLINGS

In this section, three numerical examples are presented to study the two different couplings. One-dimensional and two-dimensional patch tests whose boundary conditions lead to a homogeneous strain state are first studied. Note that the definition of strain for the atomistic model has to be specified. This issue is not addressed here. The reader could refer to [33] where an atomistic strain is post-processed from a MLS approximation of the displacement of the atoms. A graphene sheet with a crack subjected to a K_I-field is also studied.

4.1. Matching atomistic and continuum models

In order to avoid the difficulties in matching a nonlinear atomistic model and a continuum model, a harmonic potential is used for our patch test studies. To lighten the notations, only a pair-body potential $V_{\alpha\beta}$ was introduced in (3). To stabilize the atomistic structure, an angle-bending term $V_{\theta_{\alpha\beta\gamma}}$ between each group of three neighboring atoms α, β and γ is required. The atomistic potential (3) is rewritten as follows:

$$E_A = \sum_{\alpha\in\Omega^A} \left[\sum_{\beta>\alpha} w^A\left(\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}_\alpha + \boldsymbol{x}_\beta)\right) V_{\alpha\beta}(r_{\alpha\beta}) + \sum_{\beta\neq\gamma\neq\alpha} w^A(\boldsymbol{x}_\alpha)\, V_{\theta_{\alpha\beta\gamma}}(\theta_{\alpha\beta\gamma}) \right] \tag{30}$$

where $r_{\alpha\beta} = |\boldsymbol{x}_\beta - \boldsymbol{x}_\alpha|$ is the interatomic distance between atoms α and β. $\theta_{\alpha\beta\gamma}$ is the angle between the bond $\alpha\beta$ and the bond $\alpha\gamma$ (Figure 3). Note that for the angle-bending potential $V_{\theta_{\alpha\beta\gamma}}$ contribution in (30), the weight function w^A is computed at the location of atom α (Figure 3) as opposed to some combination of all the atoms involved, this requires further investigation as to

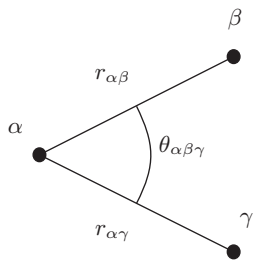


Figure 3: Group of three atoms α, β and γ defining two bonds and one bond angle

optimality. The weight function has to be selected so that all atoms involved are in equilibrium [22].

The harmonic potential is defined by the following expressions:

$$V_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}k_p(r - r_0)^2 \tag{31}$$

$$V_{\theta_{\alpha\beta\gamma}} = \frac{1}{2}k_\theta(\theta_{\alpha\beta\gamma} - \theta_0)^2 \tag{32}$$

where r_0 and θ_0 are the initial values of the bond length and the bond angle. k_p and k_θ are constant parameters for the studied lattice structure.

For the fracture computation of a graphene sheet, a modified Morse potential [43] is used.

$$V_{\alpha\beta} = D_e\big[(1 - e^{-\beta(r-r_0)})^2 - 1\big] \tag{33}$$

$$V_{\theta_{\alpha\beta\gamma}} = \frac{1}{2}k_\theta(\theta_{\alpha\beta\gamma} - \theta_0)^2\big[1 + k_{sext}(\theta_{\alpha\beta\gamma} - \theta_0)^4\big] \tag{34}$$

The following parameters are used:

$$\begin{aligned} r_0 &= 1.39 \times 10^{-10} \text{ m} \quad \text{and} \quad \theta_0 = 2.094 \text{ rad} \\ D_e &= 6.03105 \times 10^{-19} \text{ N.m} \\ \beta &= 2.625 \times 10^{10} \text{ m}^{-1} \\ k_\theta &= 0.9 \times 10^{-18} \text{ N.m.rad}^{-2} \quad \text{and} \quad k_{sext} = 0.754 \text{ rad}^{-4} \end{aligned}$$

Note that to be consistent with the modified Morse potential, the parameter k_p of the harmonic potential is chosen such that $k_p = 2D_e\beta^2 = 8.312 \times 10^2$ N.m^{-1}.

The definition of a continuum model that is consistent with the atomistic potential is not obvious. Indeed, the atomistic model is non-local since the atomistic potential involves two or several atoms, whereas the continuum model is local. Consequently, even if every node represents an atom in the bridging domain Ω^B, some spurious gradients in deformation, caused by ghost-forces [14], may appear in Ω^B with some coupling strategies. To control the local/non-local mismatch in the coupling zone, some solutions are described in [14]. In the Quasi-Continuum method (QC) or in the Concurrent Lenght Scale method (CLS) [18], an approximate total energy expression is constructed by using pad atoms with suitable weighted energy contributions. The Quasi-Continuum method with Ghost Force Corrected (QC-GFC) proposes an iterative algorithm which does not make use of a unified functional for the entire coupled system but rather effects the coupling through the boundary conditions between the atomistic and continuum domains. In our approach, it is possible to test within the same framework different energy distributions by choosing the proper weight functions, or different transmission conditions between domains by choosing a suitable coupling term. This flexibility may be beneficial to control the ghost forces and the coupling effects so that the solution is correct away from the bridging domain.

4.2. One-dimensional example

Let us consider the academic example of a chain of atoms that is clamped on one side and subjected to a small prescribed displacement $\bar{u}$ on the other side as depicted in Figure 4. A

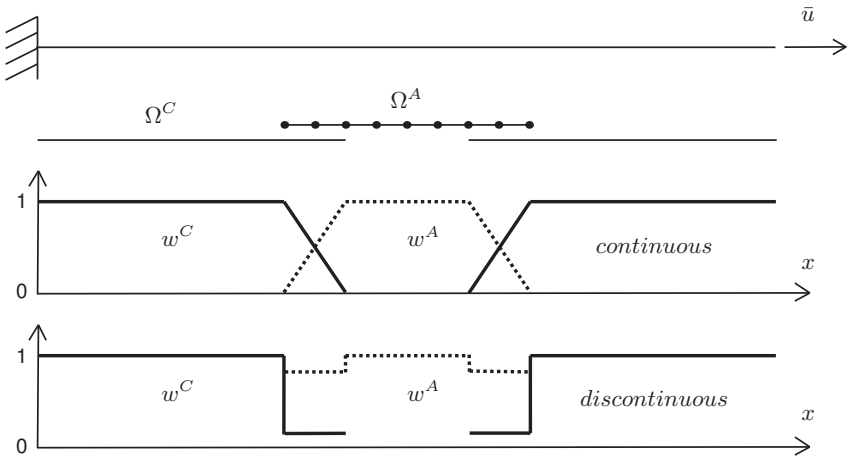


Figure 4: One-dimensional problem: cantilevered chain of atoms under tensile. Atomistic model Ω^A and continuum model Ω^C and their respective weight functions w^A and w^C.

continuum model is defined on the part of the domain Ω^C whereas an atomistic model is used in the central part Ω^A. Only the pair-body potential $V_{\alpha\beta}$ (31) is used. For the continuum model, Young's modulus is given by $E = k_p\, r_0$ so that it is coherent with the atomistic model. Linear elements are chosen for the displacement approximation of $\boldsymbol{u}^C$.

As in [28], two types of weight functions (energy scalings) are tested: continuous weight functions and discontinuous ones (Figure 4). Let us recall that it is shown in [28] that continuous weight functions are required with the L^2 coupling (9) whereas either continuous or discontinuous weight functions can be used with the H^1 coupling (10). Even though, this work dealt with the coupling of continuum models and not with the continuum/atomistic coupling, the H^1 coupling developed herein uses the same continuous coupling terms (9) and (10). In addition, as in [28], the Lagrange multiplier mesh M_C is chosen to conform to the nodes of the mesh M_C on Ω^B. Formally, one has $M_\lambda = M_{C|\Omega^B}$.

A chain of 121 atoms is considered (Figure 5). The dilation parameter for the MLS approximation is set to $\rho = 1.3\, r_0$ in order to ensure that at least two atoms are involved in the computation of the moment matrix $\boldsymbol{M}$ (13) and that $\boldsymbol{M}$ is invertible. Two types of M_C meshes are tested: in one, nodes conform to the atom positions (Figure 5(b)) and one is nonconforming (Figure 5(a)). For the nonconforming mesh, one element of M_λ contains 11 atoms in the bridging domain, and the end atoms in the bridging domain are coincident with the nodes of the finite element mesh M_C. The scaling paramater l defined in (10) is set to $10\, r_0$. It corresponds to a characteristic dimension of the coupling zone Ω^B (Figure 5(a)).

In the situation of conforming meshes, the displacement u is shown in Figure 6 for the two couplings and continuous weight functions w^A and w^C (ramp functions) or discontinuous weight functions (Figure 4). Both couplings lead to a perfect linkage between the nodal displacements of M_C and the atom displacements in the coupling zone. The deformed shape shows good agreement with the solution produced by a fully atomistic model. These results are similar to those obtained for the coupling of continuum models [28].

The Lagrange multiplier field on the coupling zone Ω^B (in two parts) is shown in Figure 7. The discrete values of the Lagrange multipliers at the nodes of M_λ are shown in empty squares. The H^1 coupling leads to a smooth field λ with both continuous weight functions and discontinuous ones. However the L^2 coupling gives a Lagrange multiplier field that is irregular at the boundaries

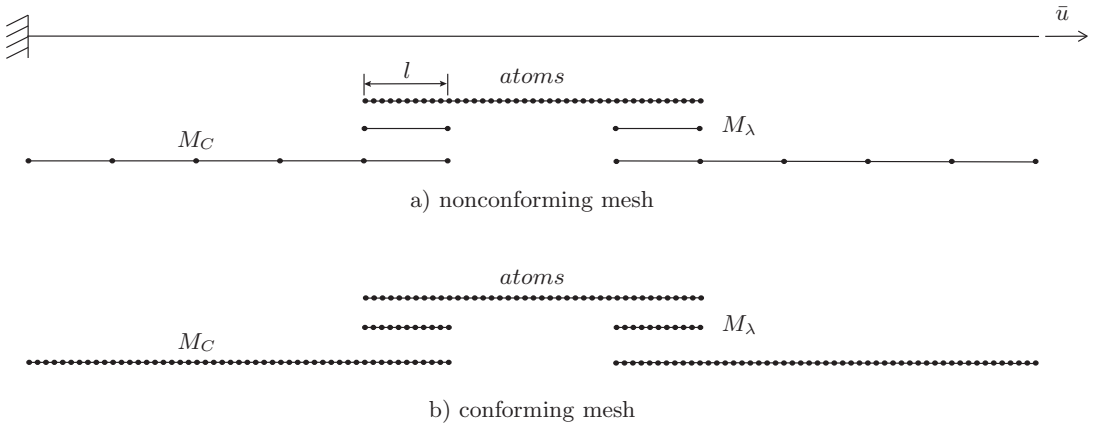


Figure 5: Continuum model mesh M_C and Lagrange multiplier mesh M_λ: a) nonconforming and b) conforming meshes to the atom positions.

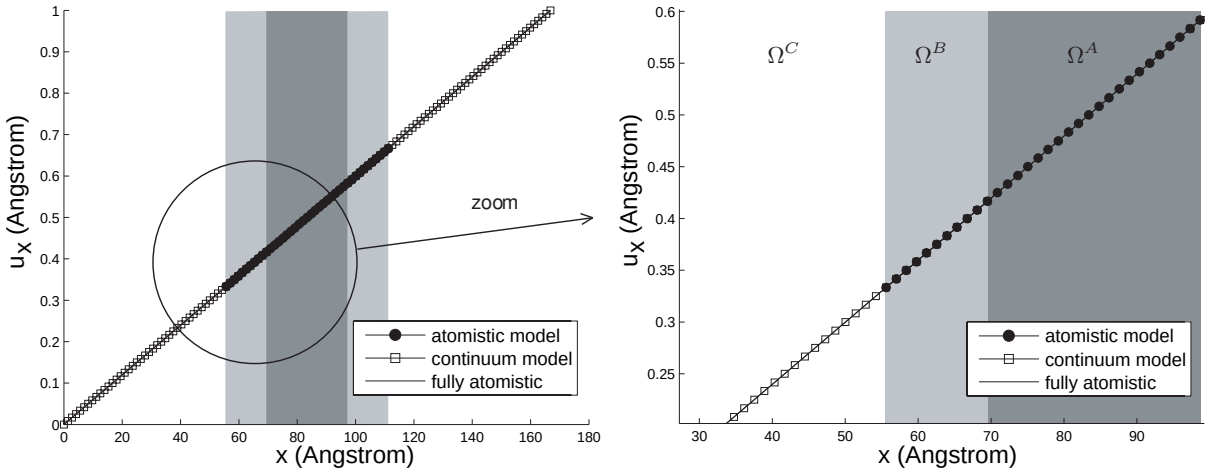


Figure 6: Displacement u for the mesh M_C and the atoms; nodes conformed to the atom positions

$\partial\Omega^B$ of the coupling zone when discontinuous weight functions are used. Similarly to the coupling of continuum models [28], continuous weight functions are required for the L^2 coupling.

The same one-dimensional problem is solved with nonconforming meshes. A coarse multiplier field ($M_\lambda = M_{C|\Omega^B}$) is used as motivated in [28]. Indeed, it was shown that a fine multiplier field ($M_\lambda = M_{A|\Omega^B}$) would lock the atomic displacements onto the finite element mesh preventing the atomistic domain to "express" itself. The displacement u is represented in Figure 8. For the two couplings, H^1 and L^2, continuous weight functions lead to a correct displacement linkage between continuum model and atomistic model. The H^1 coupling with discontinuous weight functions (Figure 8(b)) links the continuum displacement and the atom displacements in an average manner on each Lagrange multiplier element. Note that according to [28], the H^1 coupling enforces the continuity of a linear combination of the displacement and its Laplacian: $(\boldsymbol{u}^C - \boldsymbol{u}^B) - l^2\Delta(\boldsymbol{u}^C - \boldsymbol{u}^B) = 0$ with $\boldsymbol{u}^B(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{N}^{mls}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{a}^B$. This linkage is different from the classical displacement continuity $\boldsymbol{u}^C - \boldsymbol{u}^B = 0$. This flexibility of the H^1 coupling can be beneficial in coupling a very coarse continuum mesh, with element size much bigger than the interatomic distance, with an atomistic model. The same computation was performed with a larger coupling zone (Figure 9). The same "bubble-like" gluing can be seen for each element of M_λ. According to this figure, a high value of the w^A weight function is recommended in order to minimize the jump between the atomistic and the continuum displacement. In the following, w^A is set to 0.9 when constant weight functions are chosen.

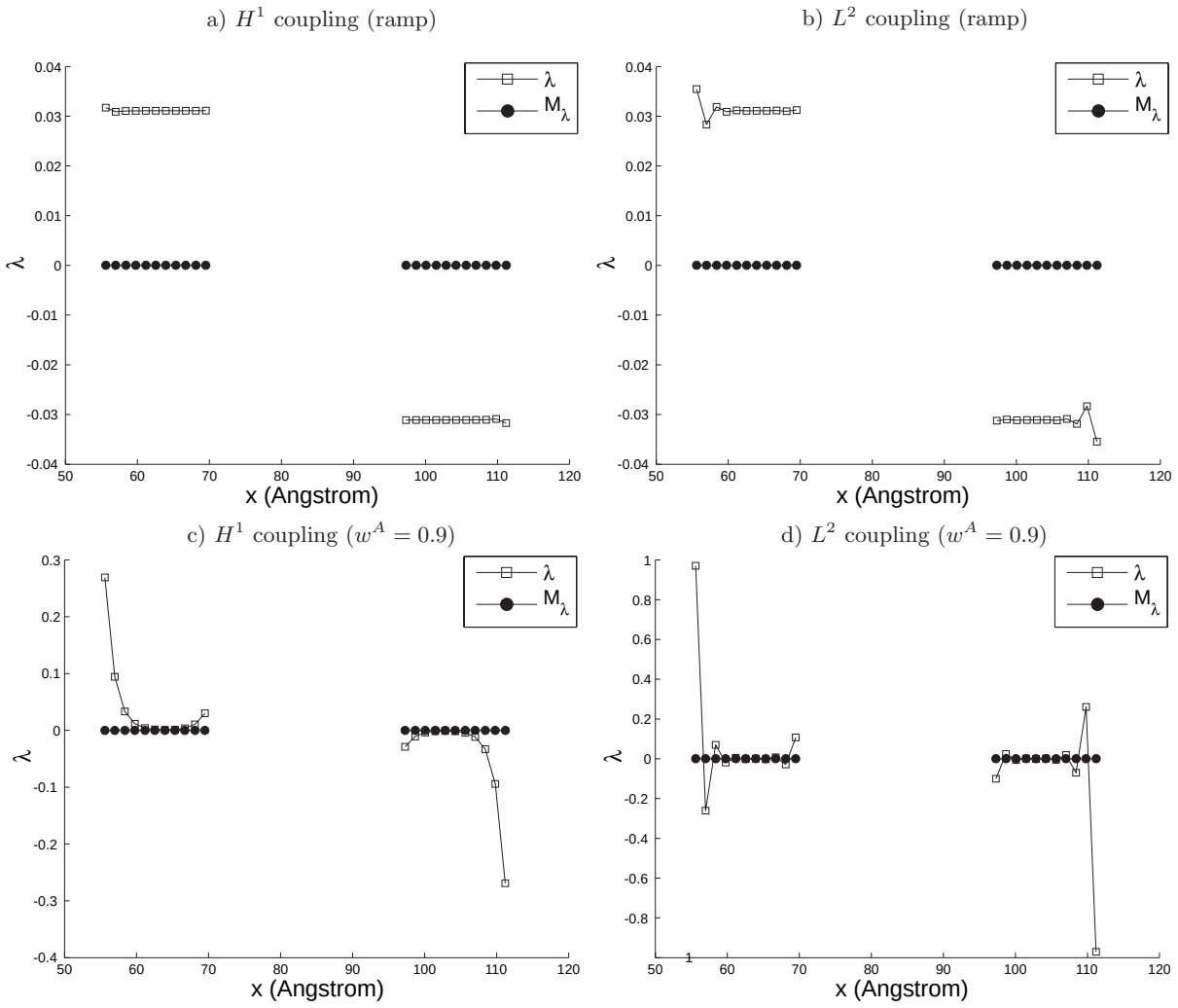


Figure 7: Lagrange multiplier field λ on the coupling zone Ω^B for the L^2 and the H^1 couplings with continuous (ramp) or discontinuous ($w^A = 0.9$) weight functions

The relative error in strain $|\varepsilon - \varepsilon_{ref}|/|\varepsilon_{ref}|$ is shown in Figure 10 for the conforming mesh (Figure 5(b)) and the nonconforming mesh (Figure 5(a)). For the atomistic domain, the strain is computed by a MLS approximation. The reference value is obtained with the fully atomistic computation. It can be seen that the L^2 coupling leads to a lower error than the H^1 coupling with constant weight functions even in the bridging zone Ω^B. Results obtained with ramp weight functions are similar for both L^2 and H^1 couplings. For the conforming case (Figure 10(a)), the non-local property of the atomistic potential (see Section 4.1) leads to a greater error on $\partial\Omega^B$. This effect is smaller with the L^2 coupling. Due to the nature of the H^1 coupling with constant weight functions, the error is big on Ω^B as it was expected by considering Figures 8(b) and 9. By increasing the value of w^A, the error decreases as the displacement jump decreases (see Figure 10(a)).

For nonconforming meshes (Figure 10(b)), the H^1 coupling gives a greater error in $\Omega^A \setminus \Omega^B$ than the L^2 coupling. Due to the "bubble-like" gluing nature of the H^1 coupling, a shift in the strain occurs in the zone of interest as noted in [28]. This problem is illustrated in Figure 9 where it is clear that the strain is different in $\Omega^A \setminus \Omega^B$, especially for $w^A = 0.2$.

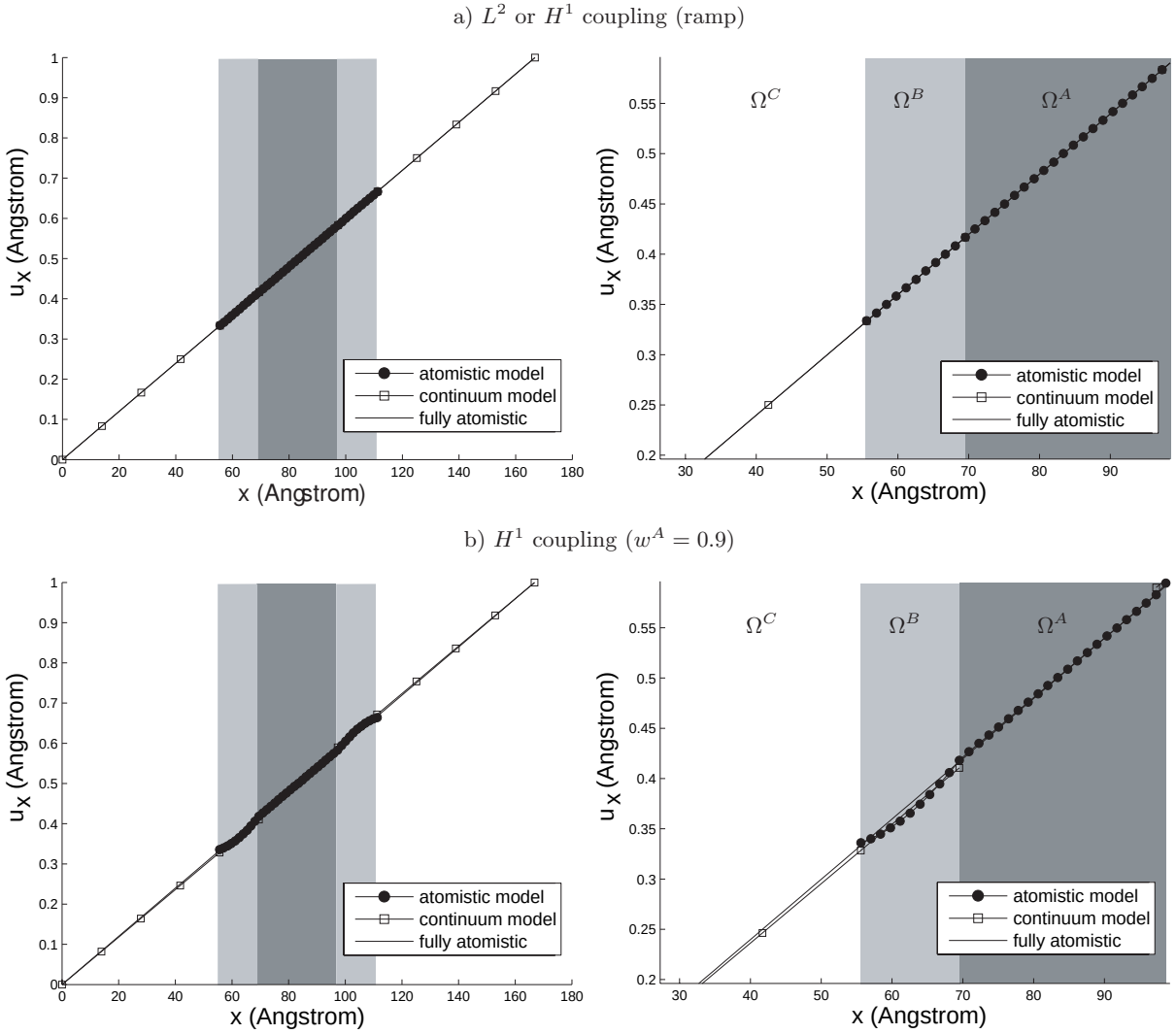


Figure 8: Displacement u with a coarse multiplier field ($M_\lambda = M_{C|\Omega^B}$) a) for the L^2 and the H^1 couplings with continuous (ramp) weight functions and b) for the H^1 coupling with discontinuous ($w^A = 0.9$) weight functions ; vertical axis is displacement.

4.3. Graphene sheet patch test

In this section, a graphene sheet patch test is studied. For this hexagonal lattice, the harmonic potential with the angle-bending term is used (see Section 4.1). The parameters are given in Section 4.1.

In this patch test, a linear displacement $\bar{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{a} + b\boldsymbol{X}$ is prescribed at the boundaries of the rectangular sheet (Figure 11) where $\boldsymbol{a} = [0.5, 0.5]^T$ and $b = 0.02$. An atomistic model Ω^A is defined on the central part of the graphene sheet whereas a continuum model is used elsewhere. The continuum mesh M_C, the Lagrange multiplier mesh M_λ as well as the atom locations are shown in Figure 12. In a continuum view, this patch test should lead to an homogeneous strain state on the whole domain.

For the continuum model, linear elastic behavior is assumed. Young's modulus and Poisson's ratio have been determined by elementary tensile tests on a graphene sheet as mentioned in [41]. The continuous and discontinuous w^A weight functions are plotted in Figure 13. The dilation parameter that ensures the invertibility of the MLS moment matrix is set to $\rho = 1.8\, r_0$.

The relative error for each strain component ε_{ij} ($|\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ref}|/|\varepsilon_{ref}|$ where $|\varepsilon_{ref}| = 0.02$) is shown

a) H^1 coupling ($w^A = 0.2$) b) H^1 coupling ($w^A = 0.9$)

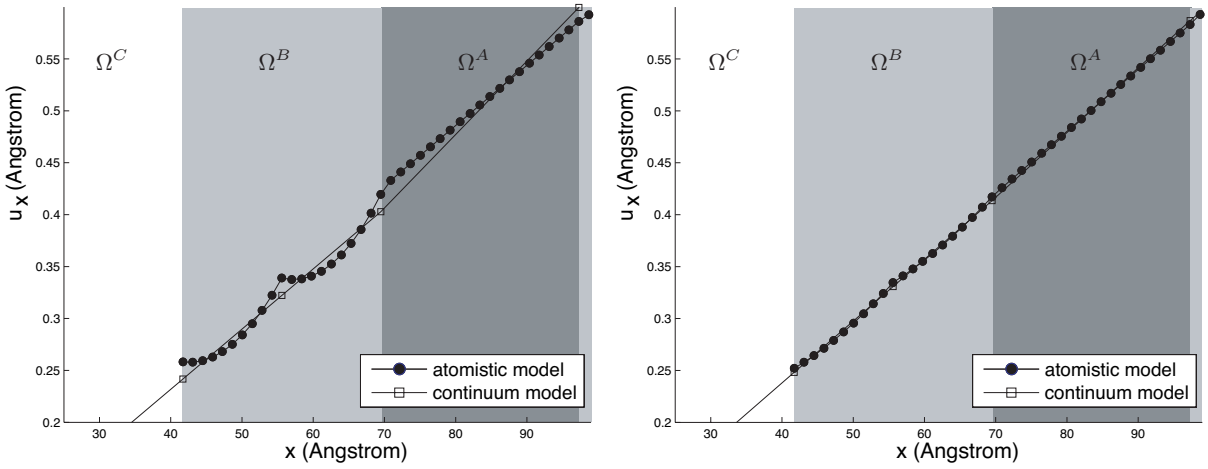
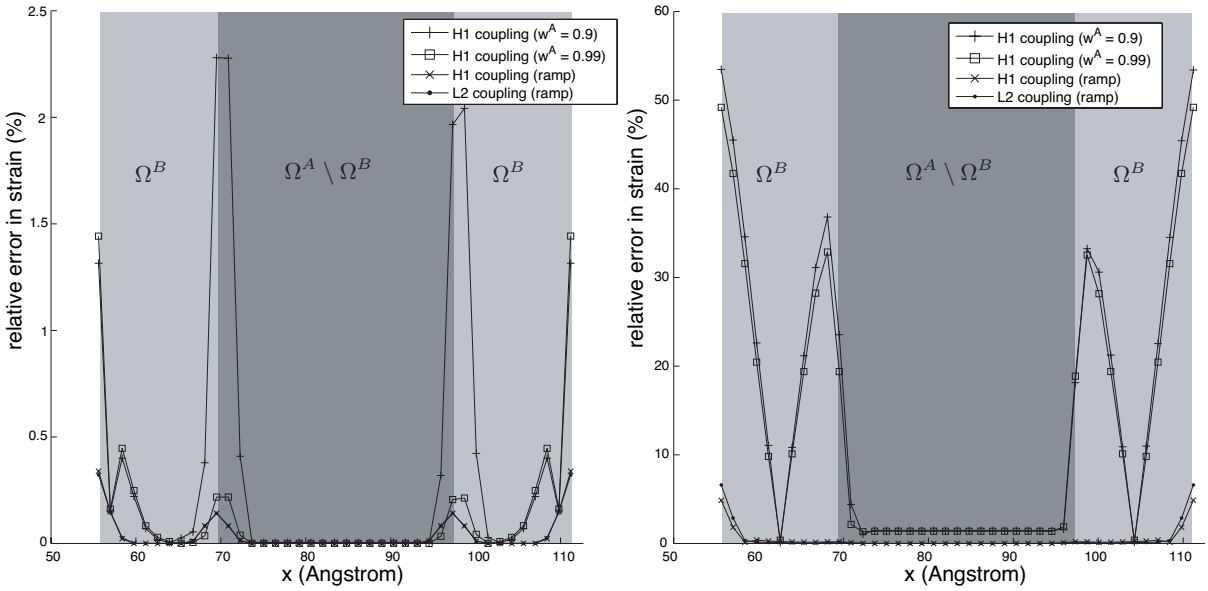


Figure 9: Displacement u with a coarse multiplier field ($M_\lambda = M_{C|\Omega^B}$) for the H^1 coupling with discontinous weight functions: a) $w^A = 0.2$ and b) $w^A = 0.9$; vertical axis is displacement.



a) Conforming meshes b) Nonconforming meshes

Figure 10: Relative error in strain $|\varepsilon - \varepsilon_{ref}|/|\varepsilon_{ref}|$ in percentage on the atomistic model Ω^A a) for the conforming and b) the nonconforming meshes for the different couplings ; vertical axis is relative error in strain.

in Figure 14. For the atomistic domain, the strain was post-processed from a MLS approximation of the displacement of the atoms. The scale maximum is set to 5%. Consequently, the error values are truncated especially in the bridging domain. Note that only the atomistic strain ε^A was plotted in the coupling zone. One could have considered the weighted field $w^A\varepsilon^A + w^C\varepsilon^C$. This requires further investigation.

The L^2 coupling with continuous weight functions and the H^1 coupling with discontinuous weight functions give a uniform strain and a low level of error (lower than 1%) over the whole domain apart from the bridging domain where the error is greater than 5% for the H^1 coupling. Let us recall that the H^1 coupling enforces the continuity of a linear combination of the displacement and its Laplacian. The continuum displacement and the atomic displacement are linked in an average manner on each Lagrange multiplier element leading to a "bubble-like" gluing (Figure 9).

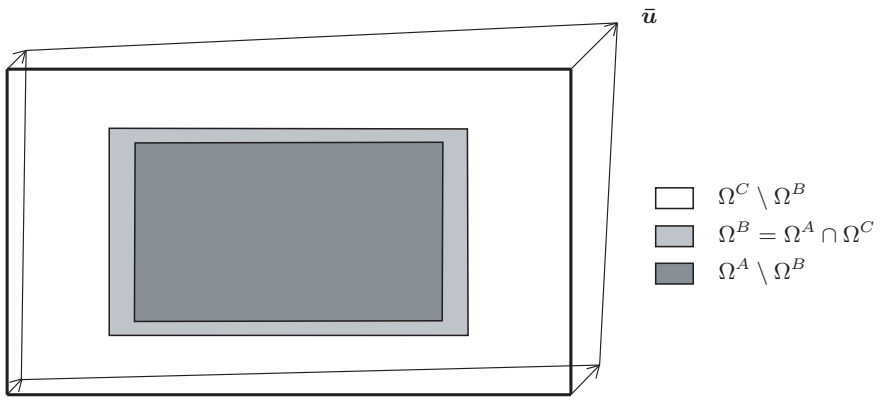


Figure 11: Graphene sheet with a linear displacement $\bar{\boldsymbol{u}}$ prescribed at its boundaries

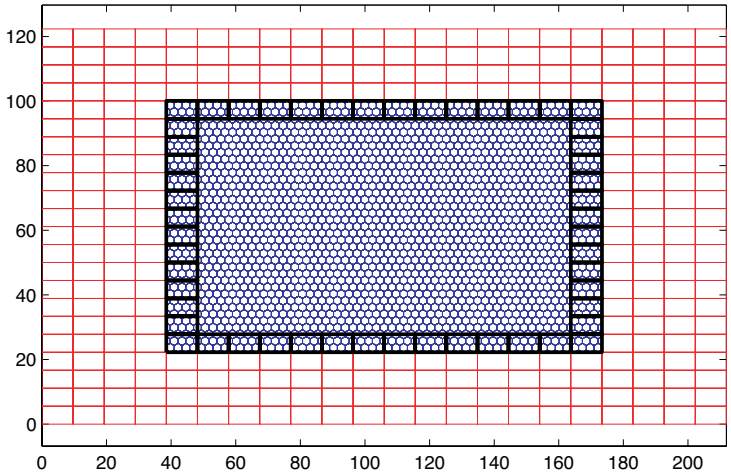
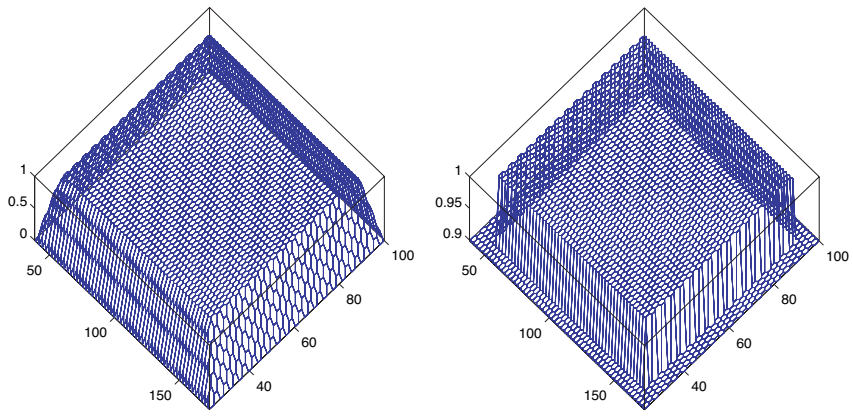


Figure 12: Continuum mesh M_C, Lagrange multiplier mesh M_λ (thick lines) and atoms for the graphene sheet



a) w^A continuous (ramp) b) w^A discontinuous ($w^A = 0.9$)

Figure 13: a) Continuous (ramp) and b) discontinuous ($w^A = 0.9$) w^A weight functions for the atomistic model Ω^A at the atom positions

For the H^1 coupling with continuous weight functions, some corner singularities seems to pollute the solution outside the coupling zone (Figure 14(b)). Let us note that the use of continuous weight functions requires a high number of quadrature points to compute the integrals on Ω^C in the corners. This could explain this corner effect. Nonetheless, the L^2 coupling seems to be less

subject to this problem.

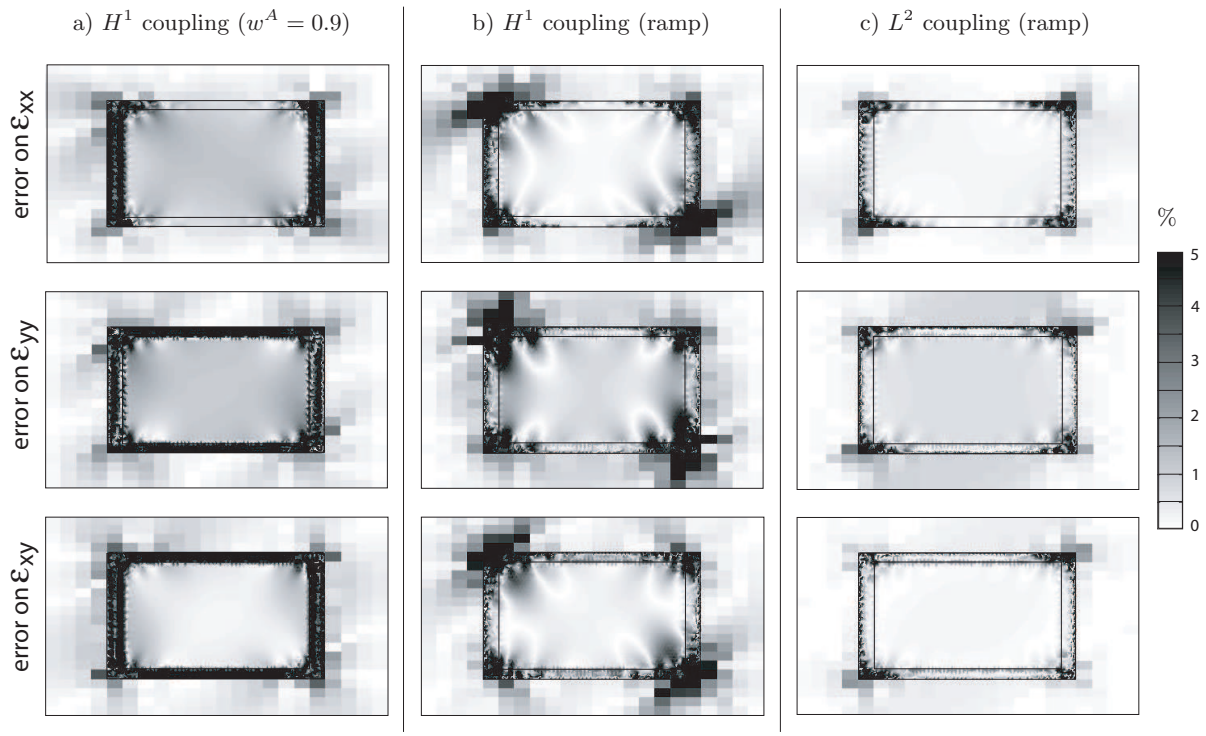


Figure 14: Relative error in percentage for each strain component ε_{ij} ($|\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ref}|/|\varepsilon_{ref}|$) over the domain with a coarse multiplier mesh ($M_\lambda = M_{C|\Omega^B}$) for the H^1 coupling with a) discontinuous ($w^A = 0.9$) or b) continuous (ramp) weight functions and for c) the L^2 coupling with continuous (ramp) weight function

4.4. Graphene sheet with a crack

In the next example, a graphene sheet with a crack is considered. An atomistic model is used in the vicinity of the crack (Figure 15) and a modified Morse potential (see (33) and (34)) is used. A K_I-field is prescribed at the boundary of the whole domain $\Omega = \Omega^A \cup \Omega^C$:

$$\begin{aligned} \bar{u}_x &= \frac{K_I}{2\mu}\sqrt{\frac{r}{2\pi}}\cos\frac{\theta}{2}\left(\kappa - \cos\theta\right) \\ \bar{u}_y &= \frac{K_I}{2\mu}\sqrt{\frac{r}{2\pi}}\sin\frac{\theta}{2}\left(\kappa - \cos\theta\right) \end{aligned}$$

where $\bar{u}_x$ and $\bar{u}_y$ are the displacements in the x and y directions, respectively, μ is the shear modulus of the material (which can be expressed as $\mu = E/(2(1+\mu))$, where E is the Young's modulus and ν is the Poisson's ratio of the corresponding continuum model). r and θ are the cylindrical coordinates measured from the crack tip and $\kappa = (3-\nu)/(1+\nu)$ for plane stress. Note that on the left edge of the graphene sheet, $\bar{\boldsymbol{u}}$ is prescribed on part of the bridging domain Ω^B. In order to avoid redundancies in the relations enforced by Lagrange multipliers, $\bar{\boldsymbol{u}}$ must be prescribed to only one model. Here, the atomistic model is chosen.

The dimensions of the sheet are 163.7Å $\times$ 165.4Å. The crack length is 31.3Å. The length and width of the sheet is more than five times the crack length as suggested in [44] in order to avoid any effects due to the finite-size of the graphene sheet. The K_I-field intensity is set to $K_I = 177.8\,GPa\sqrt{\text{Å}}$. Five different sizes of atomistic domain 67.4Å $\times$ 48.7Å, 77.0Å $\times$ 65.3Å, 86.7Å $\times$ 82.0Å, 96.3Å $\times$ 98.7Å and 105.9Å $\times$ 115, 4Å are studied while keeping the bridging domain thickness constant. The continuum mesh M_C, the Lagrange multiplier mesh M_λ as well as the atom locations are shown in Figure 15 for a 77.0Å $\times$ 65.3Å atomistic domain.

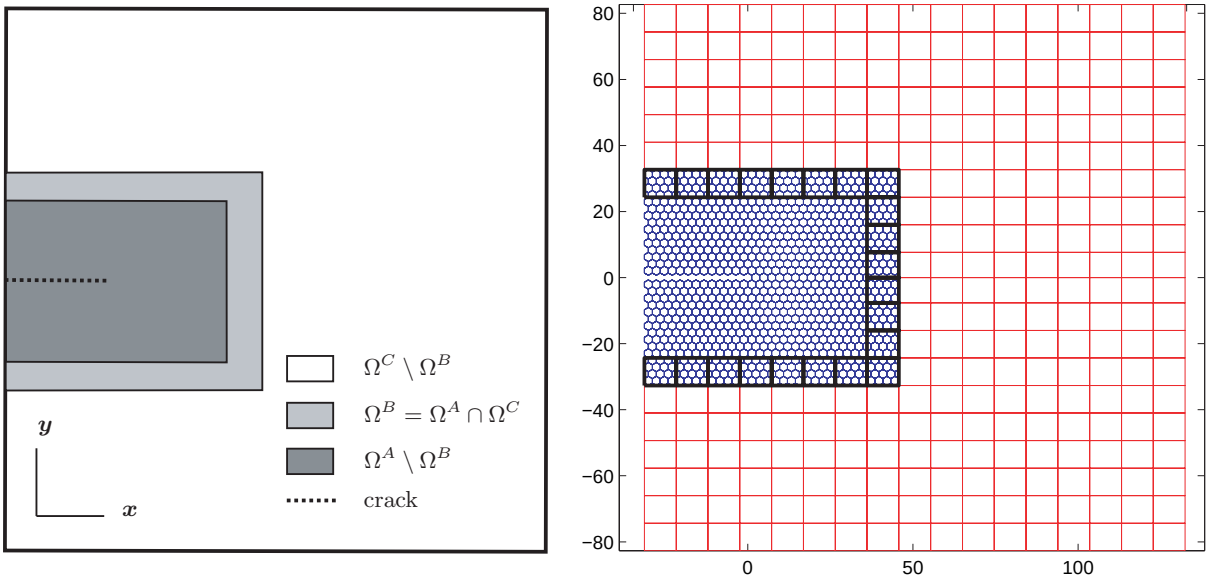
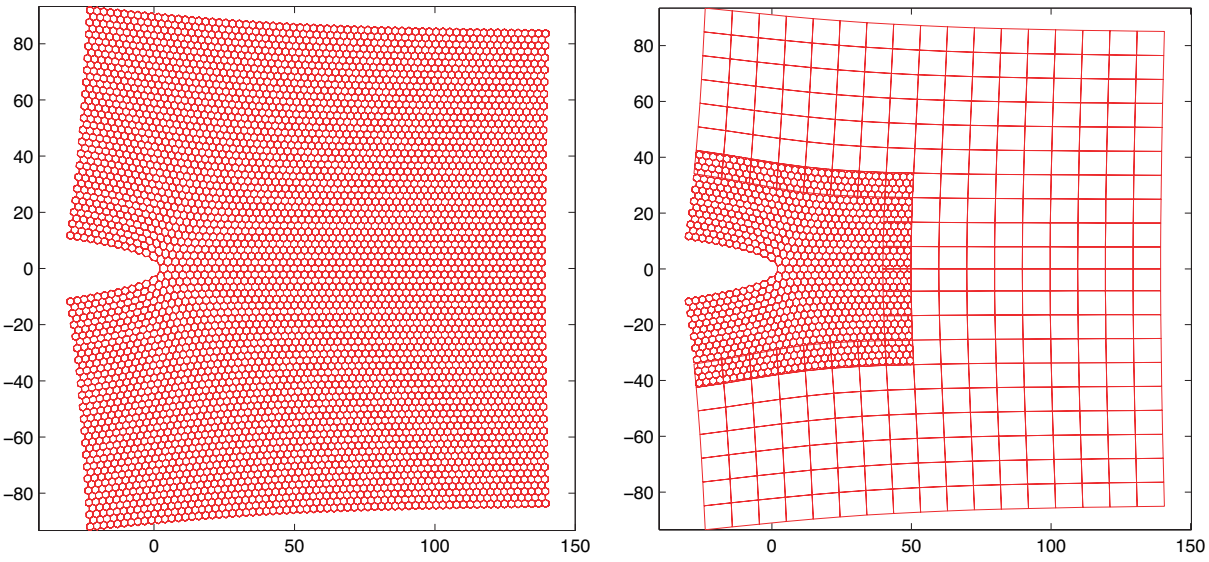


Figure 15: Graphene sheet with a crack. Continuum mesh M_C, Lagrange multiplier mesh M_λ (thick lines) and atoms for a 77.0Å $\times$ 65.3Å atomistic domain Ω^A

The deformed shapes obtained for the fully atomistic computation and one of the coupled atomistic/continuum model are shown in Figure 16.



a) fully atomistic model (reference)

b) H^1 coupling ($w^A = 0.9$)

Figure 16: Deformed shape (amplitude $\times$20) a) for the fully atomistic model (10960 atoms) and b) for the bridging domain method with a H^1 coupling and discontinuous ($w^A = 0.9$) weight functions (77.0Å $\times$ 65.3Å atomistic domain)

The strain ε^A for the atomistic model is computed using a MLS approximation. The strain component ε_{yy} along the crack line behind the crack tip is plotted in Figure 17 for the fully atomistic model and the different coupled models and compared to the elasticity solution. Reasonable agreement is observed between the elasticity solution and the computed strain.

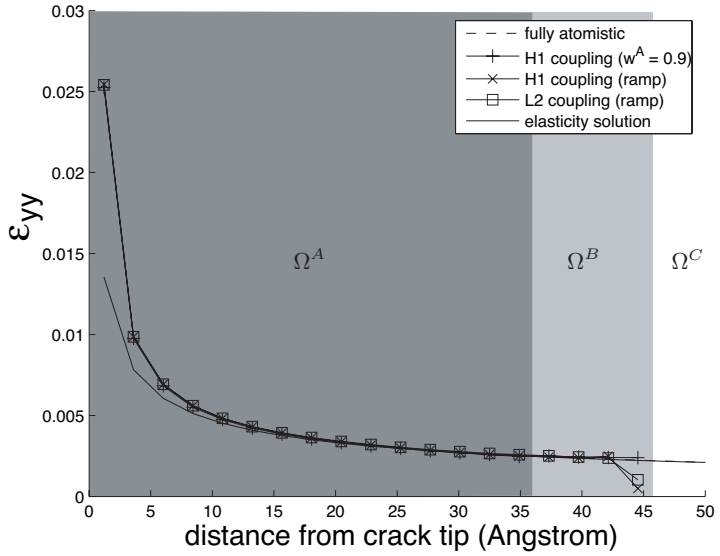


Figure 17: Strain component ε_{yy} along the crack line obtained using the bridging method with the different couplings, the fully atomistic model and the elasticity solution (77.0Å $\times$ 65.3Å atomistic domain)

Strain component ε^A_{yy} in the atomistic domain Ω^A using the different couplings is shown in Figures 18 and compared to the fully atomistic computation. The scale maximum is set to 10^{-2}. The results are similar in $\Omega^A \setminus \Omega^B$. For the L^2 and the H^1 couplings with continuous weight functions, the results are also correct in the bridging zone Ω^B even though slight discrepancies can be seen at the boundary of Ω^A where w^A is almost equal to 0 (see Figure 18(c) and (d) and Figure 17). As previously said, the H^1 coupling with constant weight function leads to a different strain state. A value higher than expected can be seen at the edges of Ω^B (see surrounded zones on Figures 18(b)) which is in agreement with the "bubble-like" gluing provided by the H^1 coupling (see Figure 9).

The global relative error in energy η_G in the zone of interest $\Omega^A \setminus \Omega^B$ of the atomistic domain is computed for the different couplings and atomistic domain sizes. This global error is defined by :

$$\eta_G = \frac{\|\varepsilon^A - \varepsilon^A_{ref}\|_{\Omega^A \setminus \Omega^B}}{\|\varepsilon^A_{ref}\|_{\Omega}} \quad \text{where } \|\varepsilon^A\|_{\Omega} = \frac{1}{n} \sum_{\substack{\alpha=1 \\ \alpha \in \Omega}}^{n} \varepsilon^A_\alpha : \mathbf{C} : \varepsilon^A_\alpha$$

$\mathbf{C}$ is the Hookean tensor of the continuum model. The reference strain ε^A_{ref} is from the fully atomistic model (see Figure 16(a)).

The local relative error in energy η_α of each atom α is also considered :

$$\eta_\alpha = \frac{\varepsilon^A_\alpha : \mathbf{C} : \varepsilon^A_\alpha}{\|\varepsilon^A_{ref}\|_{\Omega}}$$

The map of η_α is plotted in Figure 19 for the 77.0Å $\times$ 65.3Å atomistic domain with the different couplings. The scale maximum is set to 1%. The results corroborate the comments about the ε^A_{yy} maps (Figure 18). Note that the L^2 coupling gives an error smaller than 0.1% even in the bridging domain Ω^B apart from the corner as previously noted.

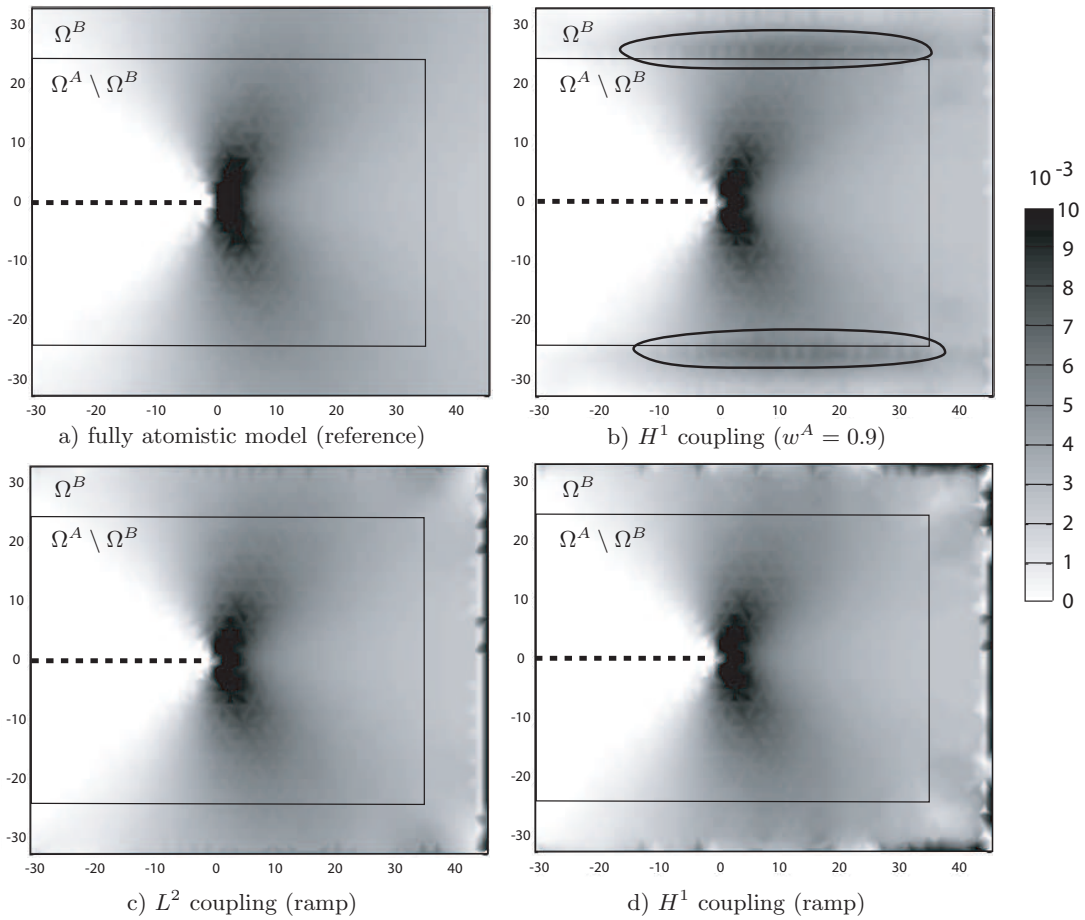


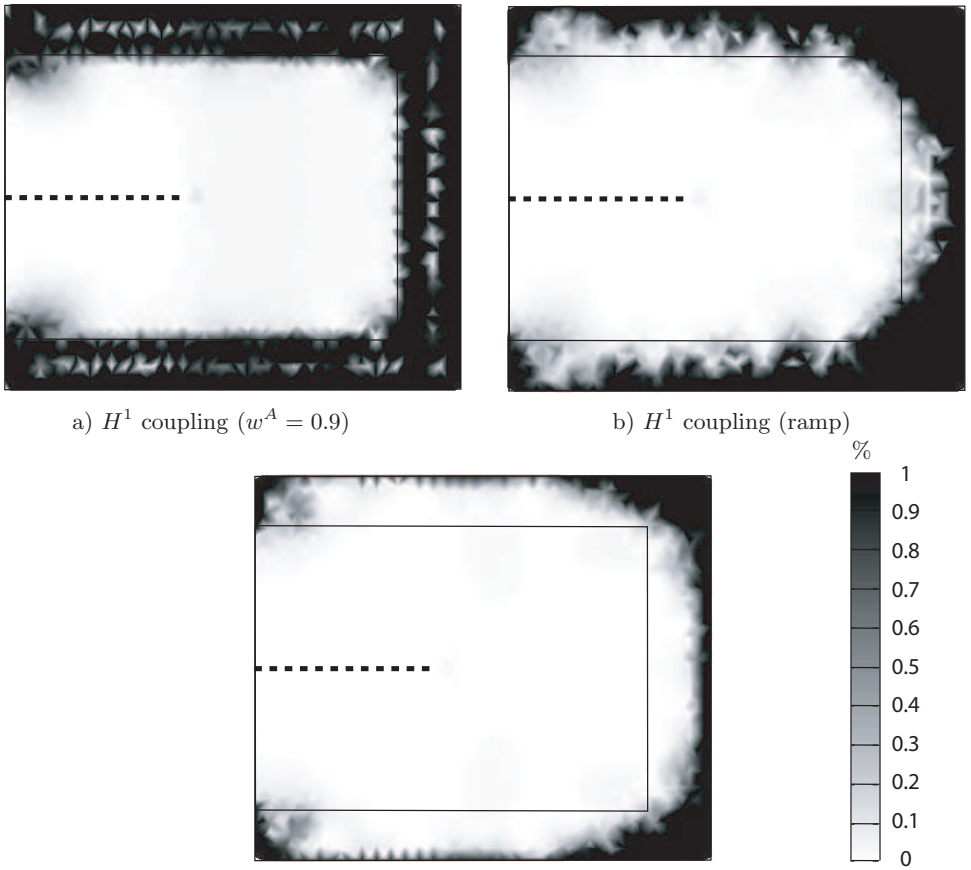
Figure 18: Strain component ε^A_{yy} in Ω^A a) for the fully atomistic model (reference) and for the bridging domain method with the H^1 coupling with b) discontinuous ($w^A = 0.9$) or d) continuous (ramp) weight functions and with c) the L^2 coupling with continuous (ramp) weight function (77.0Å $\times$ 65.3Å atomistic domain)

The convergence curves of the global error η_G when the atomistic domain dimensions increase, are given in Figure 20 for the different couplings. As expected, the value of η_G decreases when the atomistic domain dimensions increase for the different couplings. For this example, it can be seen that the L^2 coupling leads to a lower error than the H^1 coupling. Note that in [28], the flexibility of the H^1 coupling was beneficial for the coupling of two continuum model with a mixed-mode crack. In this case, the H^1 coupling gave better results regarding the stress intensity factors. It has to be mentioned that the bridging domain geometry was different. Our interpretation is that depending on the bridging domain topology and the problem to be solved (loading case), the flexibility of the H^1 coupling may affect the results. Note that for the end-loaded cantilever also studied in [28], a shift in the deflection was noticed with the H^1 coupling. In this case, a narrow bridging domain was recommended to limit this effect.

5. CONCLUSION

Two methods for coupling atomistic-continuum models based on overlapping domain decomposition approaches have been investigated. The first uses a linear weighting of the energies of the two models that are joined in the overlapping subdomain, while the second uses a constant weighting. For these two energy scalings, the L^2 and H^1 couplings have been inverstigated.

The H^1 coupling that involves the gradient of the Lagrange multiplier is an extension of Ben Dhia's Arlequin method [23, 24, 25, 26, 27] for joining incompatible finite element meshes. The



a) H^1 coupling ($w^A = 0.9$)

b) H^1 coupling (ramp)

c) L^2 coupling (ramp)

Figure 19: Local relative error in energy η_α in percentage in the atomistic domain Ω^A for the H^1 coupling with a) discontinuous ($w^A = 0.9$) or b) continuous (ramp) weight functions and for c) the L^2 coupling with continuous (ramp) weight function (77.0Å $\times$ 65.3Å atomistic domain)

implementation of this method in an atomistic/continuum coupling requires the development of a procedure for computing atomistic strains. For this purpose, we used a moving least square interpolant as developed in Khare et al. [1, 2].

Both coupling schemes have the advantage that the atoms do not need to be coincident with nodes of the finite element model of the continuum. This provides substantial advantages over methods where nodes and atoms are required to be coincident. It is possible to take a given finite element mesh and superimpose an atomistic almost anywhere. This is very advantageous in concurrent multiscale computations.

We have shown in the numerical examples that both constant (discontinuous) and linear (continuous) scalings are stable. However, it should be remarked that continuous weight functions (scaling) are required with the L^2 coupling. L^2 coupling with constant (discontinuous) weight functions is not stable and produces a Lagrange multiplier field that is irregular at the edges of the bridging zone as noted in [28]. For the examples developed herein, the L^2 coupling produced less error in the interesting part of the domain than the H^1 coupling. It was shown that even though the flexibility of the H^1 coupling with a constant weighting may be beneficial to couple a very coarse mesh with an atomistic model, the results may be affected depending of the topology of the bridging zone.

For a linear scaling (weight functions), there is little, and at times, no advantage to H^1 coupling over L^2 coupling. The latter is much simpler and computationally more efficient. However, at this time, the H^1 coupling has a more rigorous mathematical basis [29].

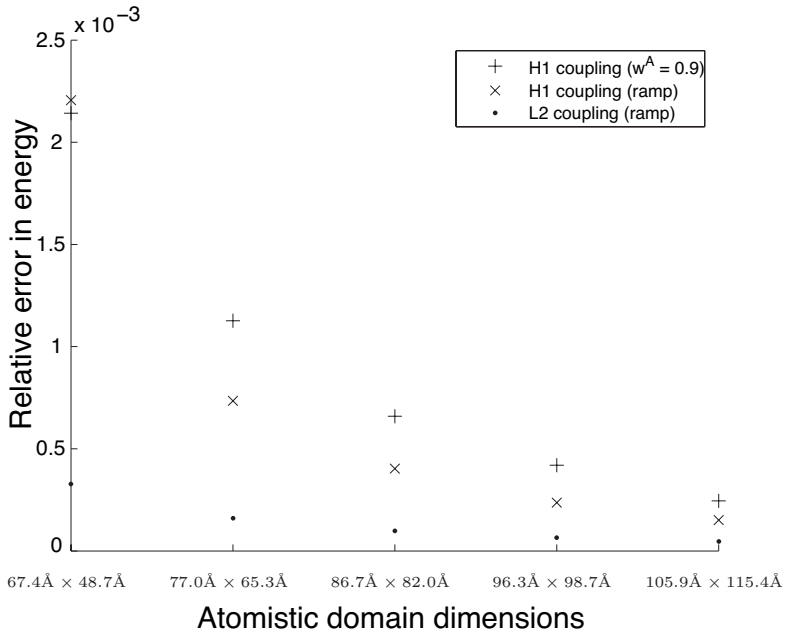


Figure 20: Convergence of the global relative error in energy η_G for different atomistic domain dimensions for the different couplings

Acknowledgements

The support of the Office of Naval Research, the National Science Foundation and the Army Research Office is gratefully acknowledged as well as the DGA/D4S, France.

References

[1] R. Khare, S.L. Mielke, J.T. Paci, S.L. Zhang, R. Ballarini, G.C. Schatz and T. Belytschko. Coupled quantum mechanical/molecular mechanical modeling of the fracture of defective carbon nanotubes and graphene sheets. *Physical Review B*, 75(7):Art. No. 075412, 2007.

[2] R. Khare, S.L. Mielke, G.C. Schatz and T. Belytschko. Multiscale coupling schemes spanning the quantum mechanical, atomistic forcefield, and continuum regimes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(41):3190–3202, 2008.

[3] 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.

[4] E.G. Karpov, H.S. Park and W.K. Liu. A phonon heat bath approach for the atomistic and multiscale simulation of solids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 70(3):351–378, 2007.

[5] S.Q. Tang, T.Y. Hou and W.K. Liu. A mathematical framework of the bridging scale method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 65(10):1688–1713, 2006.

[6] M.I. Baskes, C.F. Melius and W.D. Wilson. Interatomic Potentials and Crystalline Defects. *Edited by J. K. Lee, Metallurgical Society of AIME, New York*, 249–271, 1981.

[7] M. Mullins and M.A. Dokainish. Simulation of the (001) crack in α-Iron Employing a New Boundary Scheme. *Philosophical Magazine A*, 46:771–787, 1982.

[8] T. Belystchko, W.K. Liu and B. Moran. Nonlinear finite elements for continua and structures. John Wiley & Sons Ltd, 2001.

[9] S. Kohlhoff, P. Gumbsch and H.F. Fischmeister. Crack Propagation in B.C.C. Crystals Studied with a Combined Finite- Element and Atomistic Model. *Philosophical Magazine A*, 64:851–878, 1991.

[10] E.B. Tadmor, M. Ortiz and R. Phillips. Quasicontinuum analysis of defects in solids. *Philosophical Magazine A*, 73:1529–1563, 1996.

[11] J. Knap and M. Ortiz. An analysis of the quasicontinuum method. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49:1899–1923, 2001.

[12] L.E. Shilkrot, R.E. Miller and W.A. Curtin. Coupled atomistic and discrete dislocation plasticity. *Physical Review Letters, American Physical Society*, 89(2):025501-1–025501-4, 2002.

[13] L.E. Shilkrot, R.E. Miller and W.A. Curtin. Multiscale plasticity modeling: coupled atomistics and discrete dislocation mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52(4):755–787, 2004.
[14] W.A. Curtin and R.E. Miller. Atomistic/continuum coupling in computational materials science. *Modelling and Simulations in Materials Science and Engineering*, 3:R33–R68, 2003.
[15] N.M. Ghoniem, E.P. Busso, N. Kioussis and H. Huang. Multiscale modelling of nanomechanics and micromechanics: an overview. *Philosophical Magazine*, 83:3475–3528, 2003.
[16] F.F. Abraham, J.Q. Broughton, N. Bernstein and E. Kaxiras. Spanning the length scales in dynamic simulation. *Computational Physics*, 12(6):538–546, 1998.
[17] J.Q. Broughton, F.F. Abraham, N. Bernstein and E. Kaxiras. Concurrent coupling of length scales: Methodology and application. *Physical Review B*, 60(4):2391–2403, 1999.
[18] R.E. Rudd and J.Q. Broughton. Concurrent coupling of length scales in solid state systems. *Physica Status Solidi B—Basic Research*, 217:251–291, 2000.
[19] T. Belytschko and S.P. Xiao. Coupling methods for continuum model with molecular model. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 1(1):115–126, 2003.
[20] S.P. Xiao and T. Belytschko. A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering,* 2004; **193**:1645–1669.
[21] J. Fish, M.A. Nuggehally, M.S. Shephard, C.R. Picu, S. Badia, M.L. Parks and M. Gunzburger. Concurrent AtC coupling based on a blend of the continuum stress and the atomistic force. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(45-48): 4548–4560, 2007.
[22] S. Badia, P. Bochev, J. Fish, M. Gunzburger, R. Lehoucq, M. Nuggehally and M.L. Parks. A Force-Based Blending Model for Atomistic-to-Continuum Coupling. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 5(5):369–386, 2007.
[23] H. Ben Dhia. Multiscale mechanical problems: the Arlequin method. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Série II b*, 326:899-904, 1998.
[24] H. Ben Dhia and G. Rateau. Analyse mathématique de la méthode Arlequin mixte. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Série I*, 332:649–654, 2001.
[25] H. Ben Dhia and G. Rateau. Application of the Arlequin method to some structures with defects. *Revue Européenne des élément finis*, 11(2-3-4):291–304, 2002.
[26] G. Rateau. Méthode Arlequin pour les problèmes mécaniques multi-échelles – applications à des problèmes de jonction et de fissuration de structures élancées. Ph.D thesis, École Centrale Paris, 2003.
[27] H. Ben Dhia and G. Rateau. The Arlequin method as a flexible engineering design tool. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 62:1442–1462, 2005.
[28] P.-A. Guidault and T. Belytschko. On the L^2 and the H^1 couplings for an overlapping domain decomposition method using Lagrange multipliers. *nternational Journal for Numerical Methods in Engineering*, 70(3) : 322–350, 2007.
[29] 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*, 42:511–530, 2008.
[30] L. Chamoin, J.T. Oden and S. Prudhomme. A stochastic coupling method for atomic-to-continuum Monte-Carlo simulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(43):3530–3546, 2008.
[31] P. Lancaster and K. Salkauskas. Surfaces generated by moving least squares methods. *Mathematics of Computation*, 37(155):141–158, 1981.
[32] T. Belytschko, Y.Y. Lu and L. Gu. Element-free Galerkin methods. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37:229–256, 1994.
[33] S. Zhang, R. Khare, G. Lu and T. Belytschko. A bridging domain and strain computation method for coupled atomistic-continuum modeling of solids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 70:913–933, 2007.
[34] S. Zhang, S.L. Mielke, R. Khare, D. Troya, R.S. Ruoff, G.C. Schatz GC and T. Belytschko. Mechanics of defects in carbon nanotubes: Atomistic and multiscale simulations. *Physical Review B*, 71(11):115403, 2005.
[35] R.A. Adams. Sobolev Spaces. Academic Press, New York, 1975.
[36] T. Belytschko, Y. Krongauz, D. Organ, M. Fleming and P. Krysl. Meshless methods: An overview and recent developments. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139(1-4):3–47, 1996.
[37] J.S. Chen, C. Pan and C.I. Wu. Large Deformation Analysis of Rubber based on a Reproducing Kernel Particle Method. *Computational Mechanics*, 19:211–227, 1997.
[38] J.S. Chen and H.P. Wang. New Boundary Condition Treatments in Meshfree Computation of Contact Problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 187:441–468, 2000.
[39] S. Li and W.K. Liu. Meshfree and particle methods and their applications. *Applied Mechanics Review*, 55(1):1–34, 2002.
[40] P.L. George and H. Borouchaki. Delaunay Triangulation and Meshing: Application to Finite Elements. Hermes, 1998.
[41] M. Arroyo and T. Belytschko. Finite element methods for the non-linear mechanics of crystalline sheets and nanotubes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 59(3):419–456, 2004.
[42] J. Dolbow and T. Belytschko. Numerical Integration of the Galerkin Weak Form in Meshfree Methods. *Com-*

putational Mechanics, 23:219–230, 1999.

[43] T. Belytschko, S.P. Xiao, G.C. Schatz and R.S. Ruoff. Atomistic simulations of nanotube fracture. *Physical Review B*, 65:235430, 2002.

[44] A. Mattoni, L. Colombo and F. Cleri. Atomic scale origin of crack resistance in brittle fracture. *Physical Review Letters*, 95:115501, 2005.

PREPRINT

2

M. Wangermez, O. Allix, P.-A. Guidault, O. Ciobanu and C. Rey. Interface coupling method for the global-local analysis of heterogeneous models: a second-order homogenization-based strategy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 365, 2020.

Interface coupling method for the global-local analysis of heterogeneous models: a second-order homogenization-based strategy

M. Wangermez[a,b], O. Allix[a], P.-A. Guidault[a], O. Ciobanu[b], C. Rey[b]

[a] *Université Paris-Saclay, ENS Paris-Saclay, CNRS, LMT - Laboratoire de Mécanique et Technologie, 61 Avenue du Président Wilson, 94235, Cachan, France.*
[b] *Safran Tech, Modelling & Simulation, Rue des Jeunes Bois, Châteaufort, 78114 Magny-Les-Hameaux, France*

Abstract

This paper proposes a coupling strategy between a homogeneous macroscopic description of a structure and a description at a lower scale of some local details. In order to facilitate its implementation in industrial software, an interface coupling technique using a separation between micro and macro quantities of the unknowns is proposed. The approach leads to local solutions equivalent to those that would be obtained by second-order homogenization techniques. Its interest is that it does not require neither the construction of a second-order homogenized model nor a localization stage. The approach is validated against direct numerical simulations at microscopic scale on periodic structures under uniform and linear macroscopic strains loads.

Keywords: interface coupling, non-compatible models, zooming technique, heterogeneous media, second-order homogenization

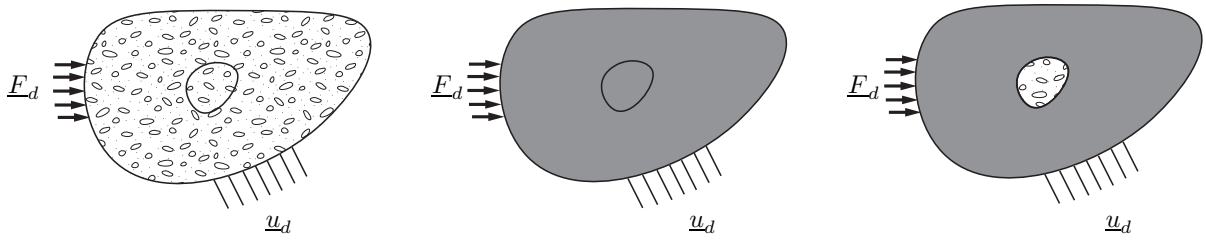
1. Introduction

Unlike metallic structures, composite materials have a tendency to suffer from manufacturing anomalies such as excessive porosities or premature phase debonding straight out of the mold. Composite being very damage-tolerant, these anomalies may or may not affect in-service performance. Therefore a number of 3D measurement techniques, such as ultrasound scanning and X-ray tomography, have been developed to characterize them and ultimately capture their morphology. From there, computational assessment of the mechanical performance may be achieved by introducing the generated morphology of the anomaly within an otherwise virgin material.

Given the relative size of manufacturing anomalies — typically between microns and a few micrometers at most — they are usually best represented at the mesoscale, i.e. the scale of the plies in laminates or that of the weaving pattern in woven composites. However since industrial systems are more commonly computed at the macroscale, where all materials are considered homogeneous, some sort of multi-scale seam must be devised to connect the mesoscale anomalous region with the rest of the structure. In other words, engineers are interested in inserting a local mesoscale

detail within a predefined finite elements macro-model of a reference structure and predict its effect on the overall mechanical performances. **Figure 1** illustrates these types of problems: described at a full micro-scale (**Figure 1(a)**), a full macro-scale (**Figure 1(b)**) and a micro-scale detail embedded in a macro-scale model (**Figure 1(c)**).

The goal is to recover from a macro-micro coupling of non-compatible models (**Figure 1(c)**) a solution as close as possible to the full reference solution (**Figure 1(a)**) inside the zone of interest. In this work, the localization of the zone of interest is chosen *a priori*, but it could be determined, for example, by a criterion based on *a posteriori* error estimations, as in the works of [1]. The main issue associated with the introduction of the local detail within the macro-model is the



(a) Microscopic description.

(b) Macroscopic description.

(c) Local detail embedded in a macroscopic model.

Figure 1: Three various descriptions at different scales of a heterogeneous material structure under prescribed boundary conditions.

definition of a proper coupling between the two models in order to transfer the relevant macroscopic "information" along with the definition of the complementary microscopic assumptions. This leads to several difficulties regarding the choice of the macroscopic/homogenized model as well as the way to couple models described at different scales, and with different finite element mesh sizes. The proposed coupling technique is developed in the scope of non-intrusive implementations. It makes use only of quantities, data and functionalities that are available in legacy and commercial codes. That is why, following [2, 3], the proposed coupling technique makes use only of interface quantities. The present article focuses on the coupling choice. The non-intrusive resolution of a coupled problem illustrated in **Figure 1(c)** will be detailed in a forthcoming paper.

In order to clarify the main issue regarding the coupling of two non-compatible models, the well established framework of the computational homogenization has been chosen, as it is the basis of numerous multi-scale approaches [4, 5, 6]. One of the most popular computational frameworks associated with it is the FE^2 method [7]. Nevertheless, being based on the first-order theory of homogenization, this scheme does not introduce size effects of the so-called Representative Volume Element (RVE). To overcome this, several methodologies, for instance based on generalized continua [8, 9, 10, 11, 12] or on numerical filter-based schemes [13, 14, 15] have been proposed. In [12], the authors proposed a two-scale computational framework with the major advantage of treating the RVE as a classical continuum by prescribing boundary conditions. This second-order computational homogenization approach takes into account the gradient effect of the macroscopic solution and hence the effect of the size of the RVE. That is why, in this paper, the considered reference scheme is the second-order computational homogenization one. Compared to the first-order theory, the second-order framework leads to more precise solutions. Let us note that, this framework was extended to deal with thin sheets in [16] and with post-localization aspects in the case of finite strain or damage in [17].

In this paper, in order to directly obtain a solution similar to the one given by a two-step homogenization procedure, an interface coupling technique is proposed. It allows reducing the incompatibility error between the heterogeneous microscopic (local) model and a first-order homogenized (global) model, representative of the macroscopic behavior of the structure. Its interest

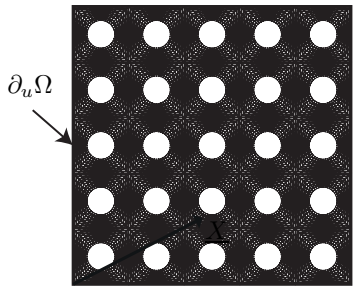
is that it does not require neither the construction of a second-order homogenized model nor any post-localization stage. The method bears some relations with the concurrent multi-scale scheme, based on mixed interface coupling, proposed for parallel computing in [18] and further developed in [19] in the case of cracking, and in [20] in the case of delamination and buckling. The common point is the treatment of interface quantities as variables with a high mechanical content. More precisely, the same micro-macro scale separation and description of interface quantities are used.

The paper is organized as follows. In **Section 2**, the limitations of a classical coupling approach for compatible models, in the case depicted in **Figure 1(c)**, are discussed on the basis of a typical example. In **Section 3**, the main principle of second-order homogenization is recalled. In **Section 4**, the Boundary Value Problem within the framework of the Second-Order Computational Homogenization applied on a periodic medium is adapted in a multi-scale interface displacement way. In **Section 5**, the coupling conditions between a macro-scale and a micro-scale model are discussed and two numerical examples are given to support the proposal. The conclusions are given in **Section 6**, along with different further research directions based on the obtained results and the long term objectives of the paper.

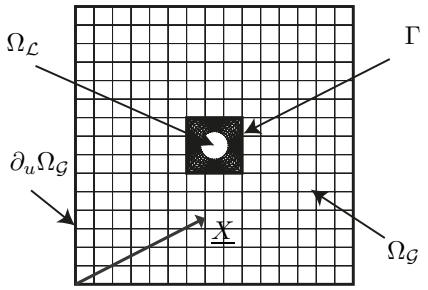
2. Toy examples and limitations of a classical coupling technique

2.1. Definition of the toy examples

In order to clearly capture the problematic addressed in this paper, a set of 2D finite element structural mechanical problems under linear elasticity assumptions is proposed. The construction of each further discussed example is based on the repetition of a 2D unit cell whose Hookean tensor is denoted by $\mathbf{K}_{\mathcal{L}}$ (linear isotopic elasticity). A reference computational mesh is made of a unit cell repeated a specified number of times, as for example the 5 by 5 unit cells mesh described in **Figure 2(a)** which corresponds to the full micro-scale problem from **Figure 1(a)**. Then, the



(a) Reference mesh of the perforated plate for a full microscopic scale modelling.



(b) Coupled domains meshes for a two-scale modelling.

Figure 2: Domains and meshes of a perforated plate.

coupled problem is defined over a mesh similar to the one from **Figure 2(b)**, which corresponds to the problem seen on **Figure 1(c)**. The central part $\Omega_{\mathcal{L}}$, considered as the local substructure is constituted of a single (or several) unit cell(s) identical to the one used for the reference problem with the same material properties (Hookean tensor $\mathbf{K}_{\mathcal{L}}$). The external part $\Omega_{\mathcal{G}}$ stands for the global substructure and is modelled by the unit cell effective proprieties $\mathbf{K}_{\mathcal{G}} = \mathbf{K}_{\mathcal{L}}^{H}$, where $\mathbf{K}_{\mathcal{L}}^{H}$ is the first-order homogenized behavior of one unit cell under periodicity assumption.

The coupling interface between the global and the local substructures is denoted by Γ. Here, the two substructures are geometrically conforming but their meshes do not necessary match along the coupling surface Γ. In other words, the elements of the two substructures are not cut by Γ and the coupling interface is aligned with the edges of the elements in both substructures. The coupling

of non-conforming geometries will be addressed in future works. Interested readers can refer to [21, 22] for recent global-local coupling techniques of conforming and non-conforming geometries.

2.2. Limitations of a classical coupling technique in the case of non-compatible models

Let us consider two examples with different loading cases over the two models shown in **Figure 2**. In these examples, the unit cell is representative of a perforated plate sample. Its size l is 2 mm, it is supposed to be linearly elastic and isotropic and characterized by the Young's Modulus $E = 210$ GPa and the Poisson's ratio $\nu = 0.3$. The homogenized behavior corresponding to the unit cell, as obtained by the classical first-order homogenization is characterized by the following elastic constants: the Young's modulus $E_1 = E_2 = 130.2$ GPa, the Poisson's ratios $\nu_{12} = \nu_{21} = 0.27$ and the shear modulus $G_{12} = 39.8$ GPa.

For the first example, the loading case is intended to impose a uniform macroscopic strain state over the considered domains whereas, in the second example, a linearly varying macroscopic strain state is imposed over the domains. The macroscopic states are prescribed by the same Dirichlet boundary conditions on the outer boundary of the reference problem **Figure 2(a)** and the coupled problem **Figure 2(b)**. They are detailed in **Section 5.1**, but not crucial for the well understanding of this section.

A wide range of techniques could be used in order to deal with the coupling of local details inserted in the global domain. For instance, recent developments aim at coupling substructures described by advanced discretization techniques using sophisticated Mortar [23, 24] or Nitsche [25, 26, 27, 28, 29] coupling techniques. Here, in order to deal with the classical finite element discretization and the non-matching grids of the coupled problem, the continuity of interface displacements and equilibrium of forces are ensured in a weak sense, with a *Mortar* finite element formulation with Lagrange Multipliers [30, 31, 32]. The space of Lagrange Multipliers is taken as the trace along the coupling interface of the global-side basis functions. In the following, the notion of "classical coupling" refers to this particular *Mortar* finite element formulation.

To compare the solutions $\underline{u}_{\text{ref}}$ and $\underline{u}_{\mathcal{L}}$ given respectively by the reference problem and by the coupled problem within the local domain $\Omega_{\mathcal{L}}$, an error e_{E} is defined on each finite element E such as:

$$e_{\text{E}} = \frac{\|\underline{u}_{\mathcal{L}} - \underline{u}_{\text{ref}}\|_{\text{E},\mathbf{K}_{\mathcal{L}}}}{\|\underline{u}_{\text{ref}}\|_{\Omega_{\mathcal{L}},\mathbf{K}_{\mathcal{L}}}} \tag{1}$$

with the following energy norm:

$$\|\underline{u}_{\mathcal{L}} - \underline{u}_{\text{ref}}\|^2_{\text{E},\mathbf{K}_{\mathcal{L}}} = \frac{1}{2\,\text{meas}(\text{E})} \int_{\text{E}} \underline{\varepsilon}(\underline{u}_{\mathcal{L}} - \underline{u}_{\text{ref}}) : \mathbf{K}_{\mathcal{L}} : \underline{\varepsilon}(\underline{u}_{\mathcal{L}} - \underline{u}_{\text{ref}})\, \text{d}\Omega$$

where meas(E) is the surface area of the finite element E.

The error maps for four different meshes of $\Omega_{\mathcal{G}}$ are shown in **Figure 3** according to each loading case. The maps are interpreted as follows: the lower the error, the closer the local solution of the coupled problem is to the reference. As the colormap is truncated after 25%, the elements of the maps that are displayed in red reach an error equal or greater than 25%. In **Figure 3**, along with each error map, two significant quantities are provided: the maximum value of the error $e_{\text{E}}^{max} = \max_{\text{E}\in\Omega_{\mathcal{L}}}(e_{\text{E}})$ and the mean value of the error over all the n_{E} elements of the local model $e_{\text{E}}^{mean} = 1/n_{\text{E}} \times \Sigma_{\text{E}\in\Omega_{\mathcal{L}}}(e_{\text{E}})$.

According to **Figure 3**, in both examples, the error decreases with the global mesh size. The lowest error is obtained for the finest global mesh. Thus, it appears that, in both examples, the coupled problem is not equivalent to the reference one. Indeed, whatever the meshes refinements, even with matching grids, an error is made. Moreover, the quality of the solution of the coupled problem is dependent of the discretization.

Therefore, the classical coupling is not adapted to couple different models of heterogeneous structures. The reason is not associated with the use of the *Mortar* approach, which is a generic

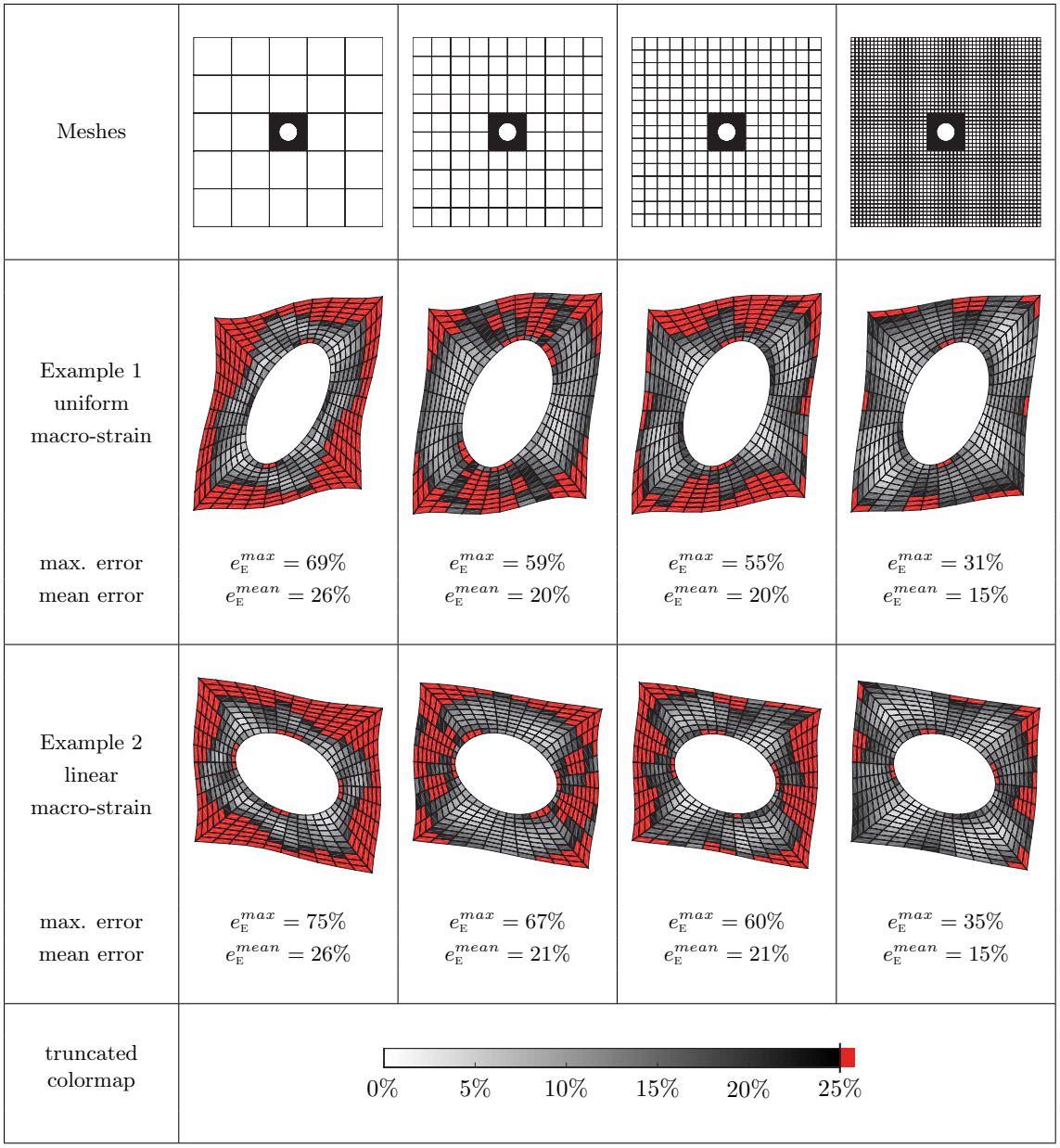


Figure 3: Distribution of local error for four global meshes and two loading cases.

and effective method for coupling incompatible meshes, but comes from the fact that the problem here lies with the coupling of non-compatible models.

Based on this observation, a new coupling technique which aims to avoid these problems is proposed in the following sections.

3. Main features of the second-order homogenization approach.

In this section, the main features of the second-order homogenization approach are recalled. The interested reader may especially study the works by Kouznetsova *et al.* [33, 12] to have a full description of the method in the finite strain setting.

The basis of second-order periodic homogenization starts by considering the Taylor expansion around a point $\underline{X}_c$ of a finite material vector $\Delta\underline{x}$ in the current configuration at the second-order complemented by a micro-fluctuation $\underline{w}$:

$$\Delta\underline{x} = \boldsymbol{F}_M \cdot \Delta\underline{X} + \frac{1}{2}\boldsymbol{G}_M : \Delta\underline{X} \otimes \Delta\underline{X} + \underline{w}(\Delta\underline{X}) \tag{2}$$

where: $\underline{X}_C$ is the geometrical center of the RVE, $\Delta\underline{x} = \underline{x} - \underline{x}_c$, $\Delta\underline{X} = \underline{X} - \underline{X}_c$. $\boldsymbol{F}_M = \frac{\partial\underline{\phi}(\underline{X}_c)}{\partial\underline{X}}$ and $\boldsymbol{G}_M = \frac{\partial}{\partial\underline{X}}(\frac{\partial\underline{\phi}(\underline{X}_c)}{\partial\underline{X}})$ are respectively second and third-order tensors. Let us note that this definition of $\boldsymbol{G}_M$ is also used in [34] where the first index i of $G_{M_{ijk}}$ denotes the spatial component. In comparison with the convention taken in [35], the first two indices of $G_{M_{ijk}}$ are inverted. Denoting $\underline{u}_C = \underline{x}_C - \underline{X}_C$, this expression leads to the following one in terms of displacements.

$$\underline{u} = \underline{x} - \underline{X} = \underbrace{\underline{u}_C + (\boldsymbol{F}_M - \boldsymbol{I}_d) \cdot \Delta\underline{X} + \frac{1}{2}\boldsymbol{G}_M : \Delta\underline{X} \otimes \Delta\underline{X}}_{=\underline{u}^M} + \underline{w}(\Delta\underline{X}) \tag{3}$$

In equation (3), $\underline{u}^M$ corresponds to the macroscopic displacements. Following [12, 34], the macroscopic first and second-order gradients are defined as follows:

$$\left\{\begin{array}{rcl} \boldsymbol{F}_M & = & \dfrac{1}{V}\displaystyle\int_{\Omega_{RVE}} \boldsymbol{F}_m \,\mathrm{d}\Omega \\ \boldsymbol{G}_M \cdot \boldsymbol{J} + \dfrac{1}{2}\boldsymbol{G}_M : \boldsymbol{J} \otimes \boldsymbol{I}_d & = & \displaystyle\int_{\partial\Omega_{RVE}} \underline{x} \otimes \Delta\underline{X} \otimes \underline{N} \,\mathrm{d}\Gamma \end{array}\right. \tag{4}$$

where $\underline{N}$ is the outward unit normal of the RVE, $\boldsymbol{J} = \int_{\Omega_{RVE}} \Delta\underline{X} \otimes \Delta\underline{X} \,\mathrm{d}\Omega$ is the second moment of volume of the undeformed RVE at point $\underline{X}_C$ and $\boldsymbol{F}_m$ the microstructural deformation gradient tensor. These relations hold only if $\underline{X}_C$ is the geometric center of the undeformed RVE, i.e. $\int_{\Omega_{RVE}} \underline{X} \,\mathrm{d}\Omega = 0$.

In the framework of the second-order homogenization, these relations are used to set up a generalized macroscopic relation linking the average stress and higher-order stress tensors to the first and second gradient of the transformation. Then, using a nested two-scale approach of FE^2 type [7] but adapted to a second-order description, it is possible to simulate the response of the structure with a refined macroscopic description taking into account gradient effect and to get the associated local response [9, 36]. The approach taken here is different. Starting from (4), explicit coupling relationships are defined for the interface quantities between the macro and micro models.

4. Equivalent kinematic admissibility on interface displacements

In the computational homogenization context, the bond between micro and macro descriptions is made by the Boundary Value Problem (BVP). The aim of this section is to determine the explicit relations that link the macroscopic and the microscopic scales on one RVE with an interface micro-macro description of the BVP kinematic admissibility. From the experience earned from DDM approaches [18, 19, 20], we have decided to choose, as independent quantities, some pertinent averages of the interface displacements. Different aspects of this choice are further discussed. For the sake of convenience, the approach is detailed for 2D cases and the differences with 3D cases will be mentioned at the end of **Section 4.3**.

4.1. Interface displacements conditions to be satisfied.

The two averaging properties (4) lead to the following kinematic conditions on the fluctuation $\underline{w}$:

$$\left\{\begin{array}{rcl} \displaystyle\int_{\partial\Omega_{RVE}} \underline{w}(\underline{X}_C, \underline{X}) \otimes \underline{N}(\underline{X}) \,\mathrm{d}\Gamma & = & 0 \\ \displaystyle\int_{\partial\Omega_{RVE}} \underline{w}(\underline{X}_C, \underline{X}) \otimes \Delta\underline{X} \otimes \underline{N}(\underline{X}) \,\mathrm{d}\Gamma & = & 0 \end{array}\right. \tag{5}$$

In the first-order homogenization framework, only the first equation of (5) is to be satisfied. Widespread hypotheses to fulfill equations (5) are *kinematic uniform boundary condition* (KUBC), *static uniform boundary condition* (SUBC) or *periodic boundary condition* (PBC). One can refer for example to [37, 38] for more details about the implications of these hypotheses.

In the second-order homogenization framework, the two equations of (5) have to be satisfied. One can refer for example to [12, 39] for more details about extensions of PBC, KUBC and SUBC to second-order homogenization.

Here, the PBC has been chosen because, this assumption gives the most reasonable estimate of the overall response of the RVE [40], as compared with the KUBC which gives an upper-bound estimation and the SUBC which gives a lower-bound estimation. Moreover, the local field of interest is often of higher quality. This is still the case even when the periodicity of the RVE geometry is not strictly satisfied, as shown in [41].

In order to satisfy equation (5), the external boundary $\partial\Omega_{RVE}$ of the RVE can be split into basic faces γ such as, in 2D cases: $\partial\Omega_{RVE} = \bigcup_{\gamma\in\{d,r,t,l\}} \gamma$ where d, r, t, l correspond respectively to the down, right, top and left faces of the RVE described on **Figure 4**.

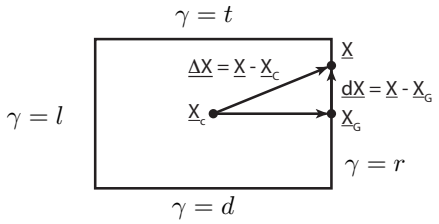


Figure 4: Two-dimensional illustration of the interface position $d\underline{X}$ expressed from the RVE center $\underline{X}_C$ and $\underline{X}_G$ the centroid of the interface r.

For a parallelepiped RVE, one can check that the conditions (5) are fulfilled for any $\underline{w}$ such that:

$$\begin{cases} \underline{w}(\underline{X}_C, \underline{X}) & \text{periodic} \\ \displaystyle\int_\gamma \underline{w}(\underline{X}_C, \underline{X})\,\mathrm{d}\Gamma = 0, & \text{for any RVE faces } \gamma \end{cases} \tag{6}$$

Different ways to fulfill these equations have been proposed in the literature. For example, in [42, 34], relations (6) are implemented in a FE framework by means of displacement constraints between degrees of freedom in boundary nodes. In [39], equations (5) are directly satisfied by means of a general multiple constraints approach. In this paper devoted to the multi-scale non-compatible coupling, the RVE boundary displacements are split in a multi-scale way and relations are given on each scale.

4.2. A micro-macro description of the transmission conditions for an interface.

In order to identify a macroscopic basis consistent with the problem being addressed, let us express, for $\underline{X}$ on any face γ, the boundary displacements $\underline{W}_\gamma$ of the RVE (see **Figure 4**):

$$\underline{W}_\gamma = \underbrace{\underline{u}^*_G + (\boldsymbol{F}_M - \boldsymbol{I}_d)\cdot d\underline{X} + \boldsymbol{G}_M : \Delta\underline{X}_G \otimes d\underline{X} + \frac{1}{2}\boldsymbol{G}_M : d\underline{X}\otimes d\underline{X}}_{\underline{W}^M_\gamma} + \underline{w} \tag{7}$$

with $\Delta\underline{X}_G = \underline{X}_G - \underline{X}_C$, as seen on **Figure 4** and:

$$\underline{u}^*_G\left(\underline{X}_G, \underline{X}_C\right) = \underline{u}_C(\underline{X}_C) + (\boldsymbol{F}_M - \boldsymbol{I}_d)\cdot\Delta\underline{X}_G + \frac{1}{2}\boldsymbol{G}_M : \Delta\underline{X}_G \otimes \Delta\underline{X}_G$$

According to (7), the displacement on one face is linear and quadratic in $d\underline{X}$ and depends on the fluctuation $\underline{w}$. Thus, on every face γ, a scale separation can be made and equations (6) and (7) can be adapted to satisfy the BVP in a multi-scale interface displacement way. To this end, a macroscopic basis can be defined in order to extract the mean parts, the linear parts and the quadratic parts of the interface displacement $\underline{W}_\gamma$ of γ. In this work, the general framework proposed in [43] to extract these macroscopic components is followed and partially developed in **Appendix A**.

4.3. Quadratic macro-components for a second-order interface kinematics

The projectors onto the macro-basis mentioned above are defined such as $\mathbf{\Pi}^T_\gamma(\underline{W}_\gamma) = \underline{W}^T_\gamma$ extracts the mean (translation) parts of the interface displacement $\underline{W}_\gamma$, the projector $\mathbf{\Pi}^L_\gamma(\underline{W}_\gamma) = \underline{W}^L_\gamma$ extracts its linear (rotation/extension) parts and $\mathbf{\Pi}^Q_\gamma(\underline{W}_\gamma) = \underline{W}^Q_\gamma$ extracts its quadratic parts. On one interface γ, each projector is built orthogonal to the others in the sense of the scalar product defined in the **Appendix A** and the macroscopic parts of the interface displacement $\mathbf{\Pi}^M_\gamma(\underline{W}_\gamma)$ are defined by:

$$\mathbf{\Pi}^M_\gamma(\underline{W}_\gamma) = \underbrace{\mathbf{\Pi}^T_\gamma(\underline{W}_\gamma)}_{\text{constant}} + \underbrace{\mathbf{\Pi}^L_\gamma(\underline{W}_\gamma)}_{\text{linear in } d\underline{X}} + \underbrace{\mathbf{\Pi}^Q_\gamma(\underline{W}_\gamma)}_{\text{quadratic in } d\underline{X}} \tag{8}$$

The complementary parts $\underline{W}^m_\gamma$ are defined by:

$$\underline{W}^m_\gamma = (\boldsymbol{I} - \mathbf{\Pi}^M_\gamma)(\underline{W}_\gamma) \tag{9}$$

Note that $\underline{W}^M$ and $\underline{W}^m$ are orthogonal in the sense of the chosen scalar product.

4.4. Proposition of micro-macro coupling conditions

In 2D, the external boundary $\partial\Omega_{RVE}$ of the RVE is made of 4 basic faces, thus, one has to determine the 12 homogenization macroscopic quantities of $\underline{u}_C$, $\boldsymbol{F}_M$ and $\boldsymbol{G}_M$ from the 24 interface macro-components $\underline{W}^T_\gamma$, $\underline{W}^L_\gamma$ and $\underline{W}^Q_\gamma$ for $\gamma \in \{d, r, t, l\}$. Consequently, in order to satisfy the kinematic macroscopic state of the BVP, 12 constraints have to be determined on the interface macro-components according to the values of $\underline{u}_C$, $\boldsymbol{F}_M$ and $\boldsymbol{G}_M$ and 12 additional compatibility constraints between the interface macro-components themselves have to be imposed.

In order to satisfy the second relation of equation (6), on each interface γ, the translation macro-components are imposed such as:

$$\underline{W}^T_\gamma = \underline{u}^*_{G_\gamma}\, S_\gamma + \frac{1}{2}\boldsymbol{G}_M : \boldsymbol{M}_{G_\gamma} \tag{10}$$

with the surface of γ denoted by S_γ and the matrix of the products of moment of area of the undeformed interface γ at point $\underline{X}_{G_\gamma}$ denoted by $\boldsymbol{M}_{G_\gamma} = \int_\gamma d\underline{X} \otimes d\underline{X}\, \mathrm{d}\Omega$. From **Appendix B**, it can be deduced that the 8 translation macro-components are related to only 10 out of the 12 homogenization macroscopic quantities. Consequently, 4 additional equations are required to totally defined the 12 homogenization macroscopic quantities.

The linear macro-components are related to 6 homogenized macroscopic quantities: 4 quantities associated to $\boldsymbol{F}_M$ and G^M_{xxy} and G^M_{yxy}. The components G^M_{xxy} and G^M_{yxy} are only linked to the linear macro-components. As the fluctuation $\underline{w}$ contains linear parts on the interfaces (i.e. the linear parts of the local and global interface displacements are different), the linear macro-components cannot be explicitly imposed because $\underline{w}$ is not known *a priori*. Nevertheless, as $\underline{w}$ is periodic, the jump of linear macro-components can be imposed such as :

$$\underline{W}^L_{\gamma^+} - \underline{W}^L_{\gamma^-} = S_\gamma \boldsymbol{G}_M : \underline{N}^+_\gamma \otimes d\underline{X} \tag{11}$$

where each face $\gamma^+ \in \{t, r\}$ is facing the opposite face $\gamma^- \in \{d, l\}$ (see **Figure 5**). In this way, equation (11) is compatible with the first relation of (6) and involves only two macroscopic

components out of the four remaining unknowns: G^M_{xxy} and G^M_{yxy}. The four relations given by equation (11) are compatible with the second-order kinematics but only two are necessary to determine the state of macroscopic deformation of the unit cell (see the expressions of G^M_{xxy} and G^M_{yxy} in **Appendix B**).

Thus, two additional equations are still required to totally define the 12 homogenization macroscopic quantities. Different options can be made in order to close the system (10)-(11). For instance, as the fluctuation solution $\underline{w}$ is supposed to be null on the RVE corners due to the periodic consideration, the full field displacement can be imposed in one corner A:

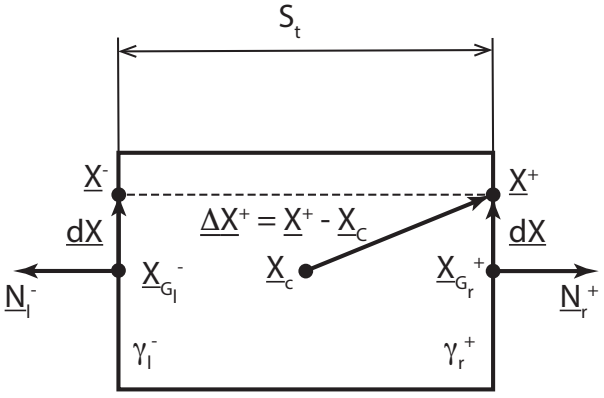


Figure 5: Periodicity notations for a pair of opposite faces on a 2D parallelepiped RVE.

$$\underline{u}(A) = \underline{u}^M(A) \tag{12}$$

This condition is interesting as it does not involve the quadratic interface macro-components which needs a quadratic mesh to be exactly represented. However, in a general case with a not purely second-order macroscopic solution, this condition would lead to different solution according to the selected corner.

One can prefer a non-local condition to define the last two missing relations, but it would add additional conditions on the interface macro-components, avoided so far. Nevertheless, it would be an improvement for the proposed coupling technique. The search of the "best" non-local conditions for not purely periodic case is still an open question.

In summary, relations (10)-(12) provide the links between the 24 interface macro-components and the macroscopic state defined by the 12 parameters of $\underline{u}_C$, $\boldsymbol{F}_M$ and $\boldsymbol{G}_M$. As said previously, 12 additional kinematically admissible conditions have to be imposed between the interface macro-components themselves.

From the 12 additional conditions sought, as the problem is solved by FEM, 8 are automatically satisfied by the continuity of the displacement at the RVE corners. Indeed, if the periodic conditions are satisfied by $\underline{w}$, the fluctuation vanishes on the RVE corners so that the macroscopic parts of the interface displacement (8) are continuous between two contiguous edges of the RVE, even if the interface macro-components are not.

The last 4 compatibility equations sought to define the interface macro-components admissibility arise from the periodicity of the quadratic macro-components between the facing interfaces γ^+/γ^-:

$$\underline{W}^Q_{\gamma^+} - \underline{W}^Q_{\gamma^-} = \underline{0} \tag{13}$$

Finally, in order to completely satisfy the first equation of (6), the microscopic parts of the interface displacement defined by (9) must verify the following condition:

$$\underline{W}^m_{\gamma^+} - \underline{W}^m_{\gamma^-} = \underline{0} \tag{14}$$

To conclude, in order to solve the 2D-BVP with a micro-macro description of boundary relations, the following relations have to be satisfied. On each interface γ, the mean part have to be imposed such as :

$$\underline{W}_{\gamma}^{T} = \underline{u}_{G_\gamma}^{*} \, S_\gamma + \frac{1}{2} \boldsymbol{G}_M : \boldsymbol{M}_{G_\gamma}$$

The jump of linear macro-components between pair of interface γ^+/γ^- must be chosen according to the expressions of G_{xxy}^M and G_{yxy}^M given in **Appendix B**, such as:

$$\underline{W}_{\gamma^+}^{L} - \underline{W}_{\gamma^-}^{L} = S_\gamma \boldsymbol{G}_M : \underline{N}_{\gamma}^{+} \otimes d\underline{X}$$

And, on one corner, the full field displacement is imposed such as:

$$\underline{u}(A) = \underline{u}^M(A)$$

Then, periodicity conditions on each pair of interface γ^+/γ^- have to be enforced. The quadratic macro-components have to satisfy:

$$\underline{W}_{\gamma^+}^{Q} - \underline{W}_{\gamma^-}^{Q} = \underline{0}$$

and the micro-components have to satisfy:

$$\underline{W}_{\gamma^+}^{m} - \underline{W}_{\gamma^-}^{m} = \underline{0}$$

In 3D cases, 30 macroscopic unknowns are involved in the second-order approach: 3 components of the rigid body displacement $\underline{u}_c$, 9 components of the deformation gradient tensor $\boldsymbol{F}_M$ and 18 components of the gradient of the gradient deformation $\boldsymbol{G}_M$. The external boundary $\partial\Omega_{RVE}$ of the RVE can be split into 6 basic faces γ such as: $\partial\Omega_{RVE} = \bigcup_{\gamma\in\{d,r,t,l,f,b\}} \gamma$ where d, r, t, l, f, b correspond respectively to the down, right, top, left, front and back faces of the RVE. Working with multi-scale interface quantities, 108 interface macro-components arise. Among them, 75 are automatically satisfied by the displacement continuity at the edges of the parallelepipedic RVE. Thus, 33 relations have to be fixed: 30 are fixed by the values of $\underline{u}_C$, $\boldsymbol{F}_M$ and $\boldsymbol{G}_M$ and 3 constraints between interface macro-components. Therefore, as in the 2D case, half of the conditions on the linear macro-components have to be imposed, according to the expression of the terms of $\boldsymbol{G}_M$ involved by the linear macro-components. But also, only 3 of the 27 conditions on quadratic macro-components have to be imposed. As previously, this choice has no consequence on the purely second-order macroscopic solution, offering flexibility to the proposed method.

Remark 1. *In **Appendix B** are given the components of $\underline{u}_c$, $\boldsymbol{F}_M$ and $\boldsymbol{G}_M$ according to the macroscopic interface displacement terms in the particular case of a 2D example. It is interesting to note that they are calculated only with surface integrals and are only dependent on the mean and linear parts of the interface displacement and on the displacement fixed at corner A. Thus, these relations may be seen as an alternative way to compute second-order gradients with surface integrals rather than volume integrals. Note that the definitions of these surface integrals are independent from the mesh discretization.*

Remark 2. *KUBC or SUBC can be satisfied by imposing respectively nullity ($\underline{W}_{\gamma}^{m} = \underline{0}$) or freedom conditions on the microscopic components of the interface displacement field on each γ interface instead of the last periodic relation* (14)*:*

$$\underline{W}_{\gamma^+}^{m} - \underline{W}_{\gamma^-}^{m} = \underline{0}$$

4.5. Validation of the proposed conditions to solve the BVP

A numerical analysis has been made in order to compare these BVP conditions to the classical ones. In [35], a perfectly periodic perforated plate composed of 3×3 RVEs has been investigated. The same problem is considered here, with the major exception that the small deformation theory is adopted instead of the large deformation one. The solution obtained by imposing relations (10)-(14) is compared to the one obtained using the method suggested in [35]. The solution of [35] was rebuilt by imposing the displacement on the four corners of the RVE, the constraints on the opposite boundaries and the zero-averaged fluctuation along two contiguous boundaries.

The test case is such that the size of the RVE is taken equal to $10\mu m$, the material behavior of the plate is supposed to be linearly elastic and the material parameters are taken such as the Young's modulus E equals 210 GPa and the Poisson's ratio ν equals 0.3.

The plate has been subjected to the same prescribed bending-tension deformation loading as in [35]. Thus, the prescribed macroscopic kinematic quantities are: $F^M_{xx} = 1.1$, $F^M_{yy} = 0.9$ and $G^M_{yxx} = -18\text{mm}^{-1}$, $G^M_{xxy} = G^M_{xyx} = 12\text{mm}^{-1}$, $G^M_{yyy} = -8\text{mm}^{-1}$ and the other components are taken equal to zero.

The **Figure 6** shows the von Mises stress map in the deformed plate for the prescribed loading applied by relations (10)-(14). According to the energy norm defined by (1), the difference between the solution obtained by imposing the relations (10)-(14) and the solution obtained by imposing relations from [35] is under $10^{-6}\%$. Thus, validating the proposed relations.

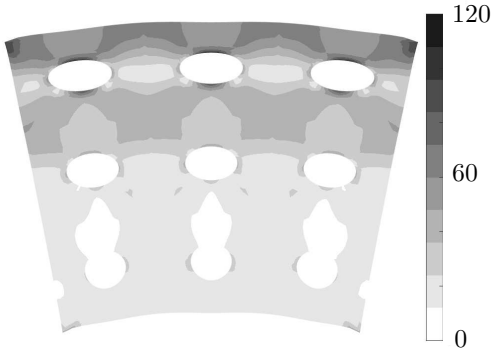


Figure 6: von Mises stress map (in GPa) of the linear elastic deformed plate for a prescribed bending-tension deformation loading, under small deformations hypothesis, computed by relations (10)-(12).

5. Towards a multi-scale global/local strategy for non-compatible models

Let us return to the initial goal of the paper: the coupling of two models representatives of an heterogeneous material at different scales. Let us note that, the same type of question arises in the case of the coupling between a plate and a 3D model for which a different coupling technique also based on homogenization was proposed in [44] and developed in [45]. **Section 2** shows that the classical coupling conditions are too strong to deal with non-compatible models. In this section, a coupling strategy between a first-order homogenized macroscopic (global) model and a micro-structured heterogeneous (local) model is proposed. The method is based on the exchange of interface macroscopic quantities defined in **Section 4.3**. Then, two examples are given to validate the method under uniform macro-strain and linear macro-strain loadings.

The same notations as in **Section 2** are taken: the subscripts $\mathcal{L}$, $\mathcal{G}$ respectively refer to the local substructure ($\Omega_{\mathcal{L}}$) and the global substructure ($\Omega_{\mathcal{G}}$). As the global substructure is supposed to be the homogenized model of the local substructure, relation (7) becomes :

$$\underline{W}_{\mathcal{L},\gamma}(\underline{X}) = \underline{W}_{\mathcal{G},\gamma}(\underline{X}) + \underline{w} \tag{15}$$

with $\underline{w}$ which satisfy (6).

The coupling relations between the global and the local substructures are built from relations (10)-(14) defined in **Section 4.3**. According to (10), the mean part of interface displacements of the local substructure ($\underline{W}^T_{\mathcal{L},\gamma}$) is taken equal to the one of the global substructure ($\underline{W}^T_{\mathcal{G},\gamma}$) for all the interfaces (in 2D: $\gamma \in \{d, r, t, l\}$ and in 3D: $\gamma \in \{d, r, t, l, f, b\}$):

$$\underline{W}^T_{\mathcal{L},\gamma} = \underline{W}^T_{\mathcal{G},\gamma} \tag{16}$$

Then, according to (11), the jumps of linear parts of interface displacements between the local model and the global model have to satisfy the following relations between pair of interfaces γ^+/γ^- :

$$\underline{W}^L_{\mathcal{L},\gamma^+} - \underline{W}^L_{\mathcal{L},\gamma^-} = \underline{W}^L_{\mathcal{G},\gamma^+} - \underline{W}^L_{\mathcal{G},\gamma^-} \tag{17}$$

And, the displacement continuity is imposed in one corner according to (12) :

$$\underline{u}_{\mathcal{L}}(\underline{A}) = \underline{u}_{\mathcal{G}}(\underline{A}) \tag{18}$$

As we are seeking for the local substructure displacement fields kinematically admissible with a second-order displacement field, the quadratic part of the global and the local displacements must be periodic according to (13). This implies that:

$$\underline{W}^Q_{\mathcal{L},\gamma^+} - \underline{W}^Q_{\mathcal{L},\gamma^-} = \underline{W}^Q_{\mathcal{G},\gamma^+} - \underline{W}^Q_{\mathcal{G},\gamma^-} = \underline{0} \tag{19}$$

This choice may be too restrictive in case of higher than second-order complex loadings because it compels the global and local displacement fields to be kinematically admissible with a second-order displacement field on the interfaces. But, it is a necessary condition for the uniqueness of $\boldsymbol{G}_M$ on each interface.

To ensure the periodicity hypothesis on the local substructure, the jumps of the microscopic part of the interface displacements are taken periodic:

$$\underline{W}^m_{\mathcal{L},\gamma^+} - \underline{W}^m_{\mathcal{L},\gamma^-} = \underline{W}^m_{\mathcal{G},\gamma^+} - \underline{W}^m_{\mathcal{G},\gamma^-} = \underline{0} \tag{20}$$

Thus, equations (16)–(20) are equivalent to (15) with $\underline{W}_{\mathcal{G},\gamma}$ and $\underline{W}_{\mathcal{L},\gamma}$ kinematically admissible with a second-order displacement field.

In summary, both coupling and periodicity conditions have to be prescribed in order to have a compatible formulation with second order kinematics. The coupling conditions that link the micro-model and the macro-model can be expressed as follows:

- continuity of the mean part of interface displacements at each interface,
- equality of the jumps of the linear parts of the displacements between pairs of interfaces,
- continuity of the full field displacements at one corner.

Then, periodicity conditions are additionally enforced to the quadratic and microscopic parts of interface displacements for the local and global domains.

Kinematic relations (16)-(20) can be imposed, for example, by Lagrange multipliers. The micro-macro separation of the interface quantities makes it possible to deduce the relations between

the interface force distributions at the different scales. These relations can be interpreted as dependencies between the models in terms of resultants and moments on each interface.

With the same scale separation as in (8) and (9) the interface force distributions are written according to the following micro-macro formalism:

$$\begin{aligned} \underline{F}_{\mathcal{G},\gamma} &= \underline{F}^T_{\mathcal{G},\gamma} + \underline{F}^L_{\mathcal{G},\gamma} + \underline{F}^Q_{\mathcal{G},\gamma} + \underline{F}^m_{\mathcal{G},\gamma} \\ \underline{F}_{\mathcal{L},\gamma} &= \underline{F}^T_{\mathcal{L},\gamma} + \underline{F}^L_{\mathcal{L},\gamma} + \underline{F}^Q_{\mathcal{L},\gamma} + \underline{F}^m_{\mathcal{L},\gamma} \end{aligned}$$

As developed in **Appendix A**, the microscopic part $\underline{F}^m_\gamma$ and the macroscopic parts $\underline{F}^T_\gamma$, $\underline{F}^L_\gamma$ and $\underline{F}^Q_\gamma$ of force distribution $\underline{F}_\gamma (= \underline{F}^T_\gamma + \underline{F}^L_\gamma + \underline{F}^Q_\gamma + \underline{F}^m_\gamma)$ are defined such that the work is uncoupled between scales:

$$(\underline{W}_\gamma, \underline{F}_\gamma)_\gamma = (\underline{W}^T_\gamma, \underline{F}^T_\gamma)_\gamma + (\underline{W}^L_\gamma, \underline{F}^L_\gamma)_\gamma + (\underline{W}^Q_\gamma, \underline{F}^Q_\gamma)_\gamma + (\underline{W}^m_\gamma, \underline{F}^m_\gamma)_\gamma \tag{21}$$

with the scalar product given by:

$$(\underline{W}_\gamma, \underline{F}_\gamma)_\gamma = \int_\gamma \underline{W}_\gamma \cdot \underline{F}_\gamma \, \mathrm{d}\Gamma$$

Thus, the static coupling relations are given by the following relations on each scale:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \underline{F}^T_{\mathcal{G},\gamma} + \underline{F}^T_{\mathcal{L},\gamma} &=& \underline{0} \\ \underline{F}^L_{\mathcal{G},\gamma} + \underline{F}^L_{\mathcal{L},\gamma} &=& \underline{0} \end{array} \right.$$

and, the following anti-periodic relations are given on pairs of opposite interfaces:

$$\left\{ \begin{array}{rcccl} \underline{F}^L_{\mathcal{G},\gamma^+} + \underline{F}^L_{\mathcal{G},\gamma^-} &=& \underline{F}^L_{\mathcal{L},\gamma^+} + \underline{F}^L_{\mathcal{L},\gamma^-} &=& \underline{0} \\ \underline{F}^Q_{\mathcal{G},\gamma^+} + \underline{F}^Q_{\mathcal{G},\gamma^-} &=& \underline{F}^Q_{\mathcal{L},\gamma^+} + \underline{F}^Q_{\mathcal{L},\gamma^-} &=& \underline{0} \\ \underline{F}^m_{\mathcal{G},\gamma^+} + \underline{F}^m_{\mathcal{G},\gamma^-} &=& \underline{F}^m_{\mathcal{L},\gamma^+} + \underline{F}^m_{\mathcal{L},\gamma^-} &=& \underline{0} \end{array} \right.$$

Due to the micro and macro works uncoupled property (21), it is then possible to show that Hill-Mandel theorem is satisfied for uniform macroscopic deformation at the local model scale. This ensures equality of the macroscopic work in the transition from the global model to the local model.

The details of the associated finite element system are given in **Appendix C**. In the following, the proposed formulation is validated on several numerical examples.

5.1. Numerical validation with first and second-order examples for periodic media

In this section, a pair of theoretical cases highlights the ability of the proposed method to couple non-compatible models in the case of the substructured problem shown in **Figure 2**.

The size of one RVE, l is 2 mm. The material itself is linearly elastic and isotropic and characterized by the Young's Modulus $E = 210$ GPa and the Poisson's ratio $\nu = 0.3$.

The homogenized behavior corresponding to the unit cell, as obtained by the classical first-order homogenization under periodicity assumption, is characterized by the following elastic constants: the Young's modulus $E_1 = E_2 = 130.2$ GPa, the Poisson's ratios $\nu_{12} = \nu_{21} = 0.27$ and the shear modulus $G_{12} = 39.8$ GPa.

Example 1. As a first example, the 2D-domains considered in **Section 2** (see **Figure 2**) are subjected to Dirichlet boundary conditions such as a macroscopic uniform strain is prescribed on the considered domains. Then, the displacement prescribed at the external boundary of the domains $\partial_u\Omega$ and $\partial_u\Omega_{\mathcal{G}}$ is:

$$\underline{u}_d = \underline{u}_C + \underline{\underline{\varepsilon}}_0 \cdot \underline{X} = \begin{bmatrix} 0.05 \\ 0.05 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.002 & 0.01 \\ 0.01 & 0.02 \end{bmatrix} \cdot \underline{X} \tag{22}$$

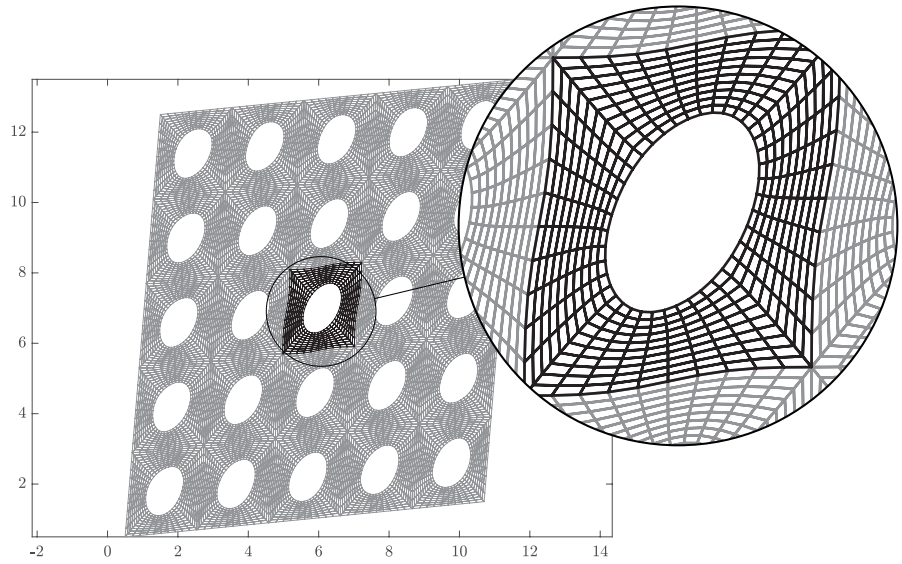


Figure 7: Deformed shape of the reference problem solution under the prescribed uniform macroscopic strain (22).

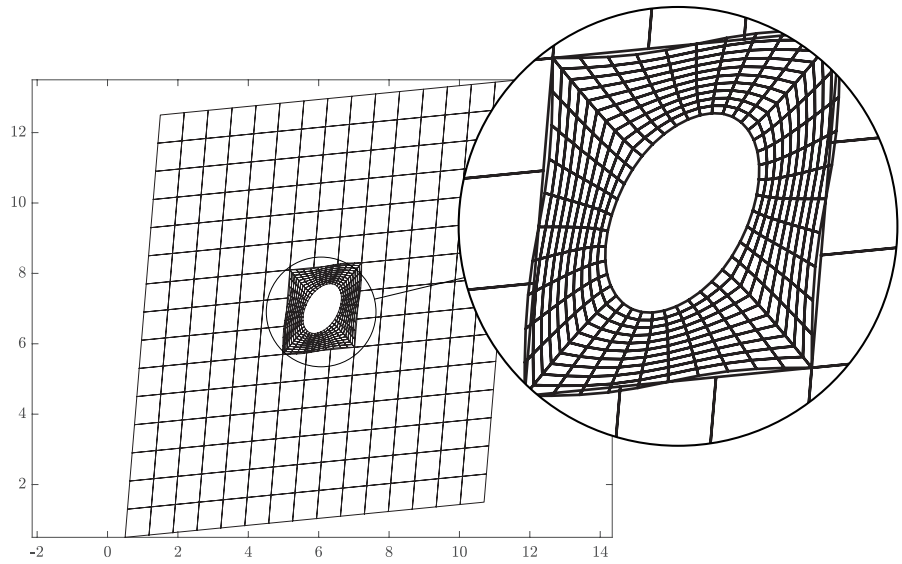
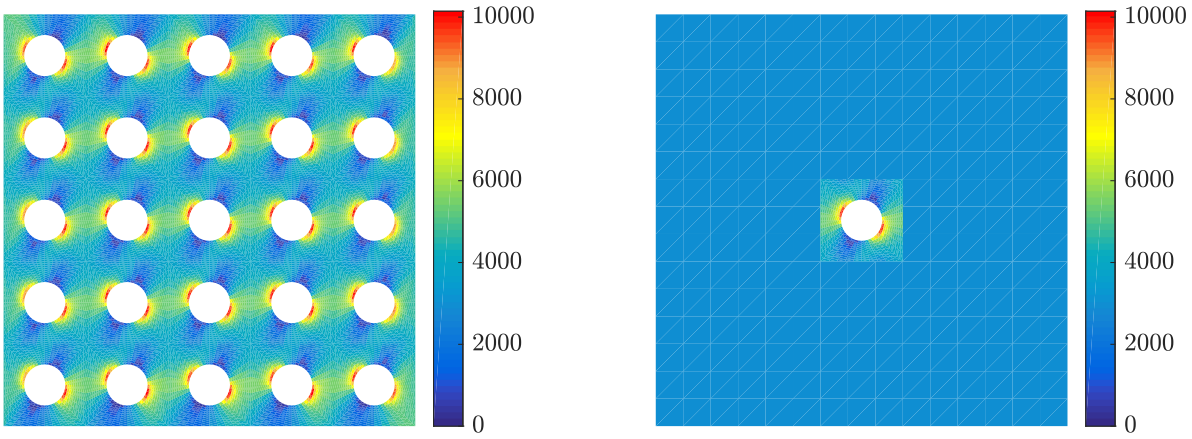


Figure 8: Illustration of the deformed solution for the proposed coupling technique under the prescribed uniform macroscopic strain (22).

with $\underline{X}$ the coordinate vector of the structures (see **Figure 2(a)**). In the case of a homogeneous structure the strain would then be uniform and equal to $\underline{\underline{\varepsilon}}_0$. The reference solution is presented in **Figure 7**.

The deformation solution of the coupled problem is shown on **Figure 8**. One notes that the displacement is discontinuous at the interface between $\Omega_{\mathcal{G}}$ and $\Omega_{\mathcal{L}}$. Indeed, the continuity of the displacement is imposed only on the mean (translation) components of each interface. Moreover, the displacement solution on $\Omega_{\mathcal{G}}$ corresponds to the one which could have been computed on a full macroscopic computation (**Figure 1(b)**). The displacement solution on $\Omega_{\mathcal{L}}$ is periodic and matches the solution of the first-order BVP on the RVE under periodic hypothesis.

The stress map of the reference problem solution is shown on **Figure 9(a)**. It can be noted that, from a macroscopic point of view, the solution is quite uniform throughout the reference structure. And, from a microscopic point of view, the stress is similar from one RVE to another except for some RVEs closed to the outer boundary of the domain. This is due to edge effects that can be observed on the reference solution (see **Remark 3**). The stress map of the coupled problem solution is shown on **Figure 9(b)**. One can note that the stress on $\Omega_{\mathcal{G}}$ is uniform and consistent with a full homogenized macroscopic computation. The solutions in the zone of interest seems to be very similar with the solution given by the reference problem as discussed hereafter.



(a) Reference problem (b) Coupled problem

Figure 9: Equivalent von-Mises stress map solutions under a uniform macroscopic strain.

The obtained error map drawn on the warped central RVE between the solutions of the coupled problem and the reference problem is shown in **Figure 10**. The maximum relative energetic error is of 1.56% regardless of the discretization. The improvement is especially significant in comparison with the results obtained with the classical coupling technique which is not designed to deal with non-compatible models in a continuum mechanics way (see **Figure 3**). The error level is much lower with the proposed coupling technique and the solution is independent of the discretization of the global model.

The coupled problem gives the expected results on the local and global substructures as it gives the solution of the full-homogenized model on $\Omega_{\mathcal{G}}$ and the exact solution of the first-order periodic BVP at micro-scale on $\Omega_{\mathcal{L}}$. Indeed, the maximum error value between the solution of the coupled problem on $\Omega_{\mathcal{L}}$ and the exact solution of the first-order periodic BVP on a single RVE is under $1e^{-11}\%$.

Remark 3. *One can note that the reference problem is not equivalent to the first-order periodic BVP. Hence, the observed errors ($< 1.56\%$) shown on the map of **Figure 10** can be explained by edge effects. Indeed, in the reference problem, the central RVE is not really periodic because the boundary condition* (22) *is not compatible with the periodic hypothesis near the outer boundary*

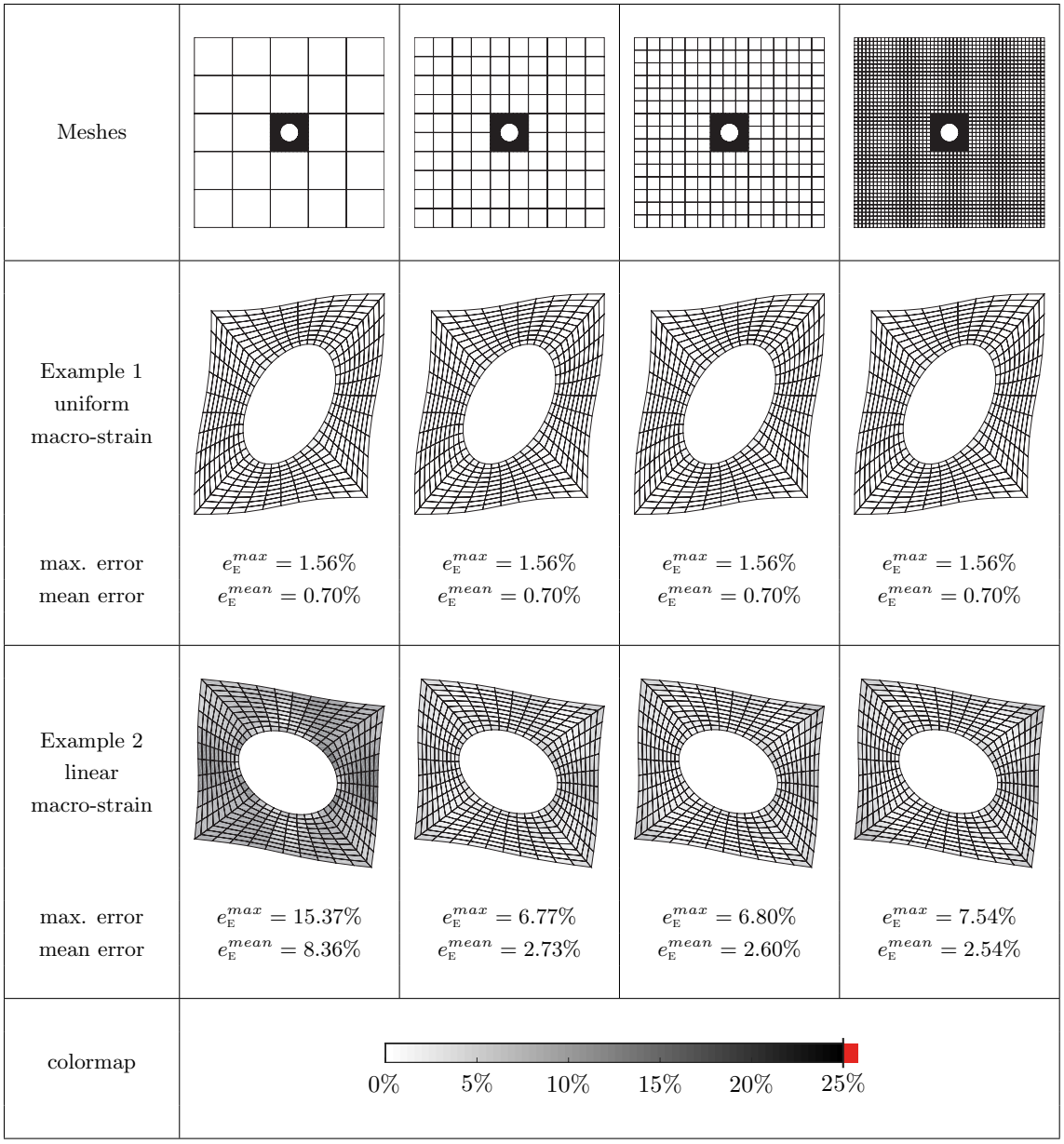


Figure 10: Error maps based on the energetic criterion e_{E} defined on (1) between $\underline{u}$ the displacement solution of coupled problem central unit cell and $\underline{u}_{\mathrm{ref}}$ the displacement solution of reference problem central unit cell. Error drawn on the deformed shapes of $\Omega_{\mathcal{L}}$ with scale factors.

of the domain $\partial_u\Omega_{\mathcal{G}}$. Thus, the more RVEs compose the domain the more periodic will be the displacement on the central RVE.

To convince of this, the average strain $\underline{\varepsilon}_s^M$ with $s \in \{\mathcal{G}, \mathcal{L}, ref\}$ is defined by: $\underline{\varepsilon}_s^M = (\mathbf{K}_{\mathcal{L}}^H)^{-1} : \underline{\boldsymbol{\sigma}}_s^M$ with the average stress $\underline{\boldsymbol{\sigma}}_s^M$ over the domain Ω_s given by $\underline{\boldsymbol{\sigma}}_s^M = \frac{1}{meas(\Omega_s)} \int_{\Omega_s} \underline{\boldsymbol{\sigma}}_s \, d\Omega$ and with $\mathbf{K}_{\mathcal{L}}^H$ the homogenized material behavior of the RVE.

On the coupled problem, in both substructures $\Omega_{\mathcal{G}}$ and $\Omega_{\mathcal{L}}$, the average strain equals the one imposed on the boundary: $\underline{\varepsilon}_{\mathcal{L}}^M = \underline{\varepsilon}_{\mathcal{G}}^M = \underline{\varepsilon}_0$. On the reference problem the average strain $\underline{\varepsilon}_{ref}^M$ over the

central RVE gives:

$$\mathbb{E}^M_{ref} = \begin{bmatrix} 0.002\underline{0002} & 0.01\underline{0152} \\ 0.01\underline{0152} & 0.02\underline{0039} \end{bmatrix}$$

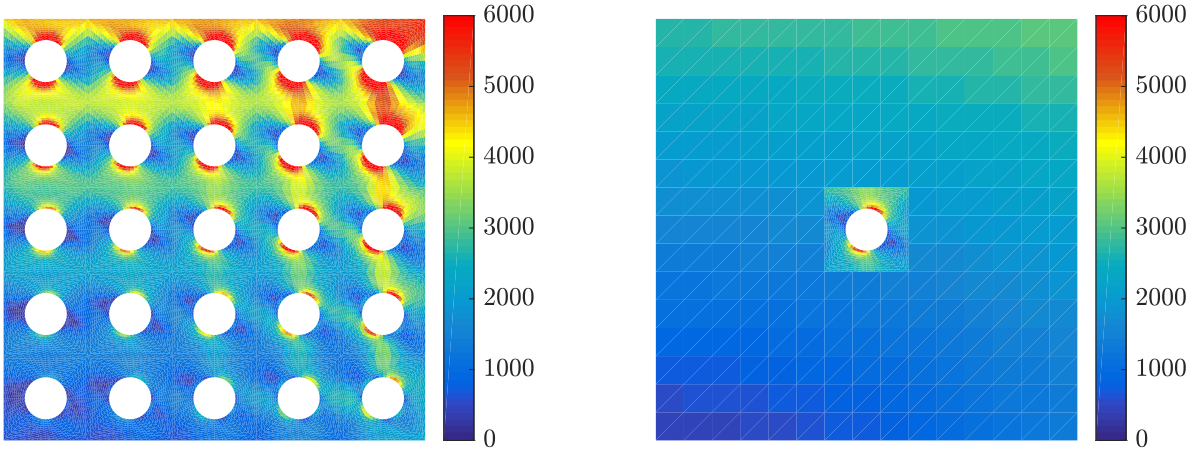
which is different from the prescribed $\mathbb{E}_0$ *given in* (22).

Example 2. In the second example, the same structures as those given in **Figure 2** are subjected to a linealy varying macro-strain. The following displacement is then applied on the outer edges of Ω and Ω_G:

$$\underline{u}_d = (\boldsymbol{F}_0 - \boldsymbol{I}_d) \cdot \underline{X} + \frac{1}{2}\boldsymbol{G}_0 \colon \underline{X} \otimes \underline{X} \tag{23}$$

with $F_0^{xx} = 1.002$ and $F_0^{yy} = 0.998$ the non-null components of $\boldsymbol{F}_0$. The non-null components of the prescribed $\boldsymbol{G}_0$ are $G_0^{xxy} = 2\text{E}^{-3}$ mm^{-1}, $G_0^{xyy} = 4\text{E}^{-4}$ mm^{-1}, $G_0^{xyy} = -7.7\text{E}^{-4}$ mm^{-1} and $G_0^{yxx} = -3.9\text{E}^{-3}$ mm^{-1}. They are chosen such that $\text{div}(\mathbf{K}^H_{\mathcal{L}} : \mathbb{E}(\underline{u}_d)) = \underline{0}$. Such a boundary condition prescribes a lineary varying macro-strain on the whole domain of a homogeneous material.

The stress map solution of the reference problem is shown on **Figure 11(a)**. An evolution of the macroscopic stress at the scale of the structure is clearly visible since the stress increases between the RVE at the bottom left corner and the RVE at the top right corner. On the coupled problem, the macroscopic gradient of stress is also visible on the global substructure. As the maximum value of the reference problem is related to the top right hand corner RVE solution whereas the maximum value of the coupled problem is related to the central RVE, the color scale has been arranged to facilitate the comparison of the von-Mises stress in the zone of interest (the central RVE). In this zone, the solutions for the two models seem to be very similar as discussed hereafter.



(a) Reference problem (b) Coupled problem

Figure 11: Equivalent von-Mises stress map solutions under a linearly varying macroscopic strain.

The **Figure 10** highlights the local difference between the solutions of the coupled problem and the reference problem with the local error defined by (1). The errors maps show that the reference problem is quite well approximated compared with classical techniques: the maximum relative error is between 5 and 40 times smaller than the one found whith the coupling technique for compatible models.

In this second example, it can be noticed that the error is a little higher than in the first example. In addition, their trends follow those of the errors of **Figure 3**. These errors can be explained by three different reasons.

The first one is that, in the same way as in the first example, the boundary conditions of the reference and coupled problems are not identical. Indeed, as mentioned in **Remark 3**, the boundary conditions on the reference problem satisfy full field Dirichlet conditions whereas on the coupled problem, the Dirichlet conditions are applied on the homogenized substructure. In other words, on the reference problem, the micro-displacement is imposed to vanish on the outer edges of the reference structure while on the coupled problem, the micro-displacement is implicitly supposed to be periodic.

A second source of error comes from the linear interpolation of the finite element shape functions used to compute the solutions. Indeed, as a macroscopic linear strain is enforced, it corresponds to a quadratic displacement on the global subdomain $\Omega_{\mathcal{G}}$. This quadratic displacement is then not exactly computed with a linear mesh. This explains the error variation similar to the one in **Figure 3**.

A third source of errors comes from the material behavior of the global substructure. Indeed, the micro-structured RVE is not well represented by a first-order periodic homogenized material behavior because, in this case, the strain variation is not negligible according to the size of the RVE. Therefore, the macroscopic behavior of the RVE is not well represented by the used first-order periodic homogenized behavior.

A major benefit from this technique is that, due to the mechanical sense of the macro-basis, the proposed coupling technique is nearly insensible to the discretization. Indeed, the shared macroscopic quantities are defined before any discretization. No matter how coarse are the meshes, if they can describe the macroscopic quantities, the technique is valid. This last point partially illustrates the reason why, in example 2, for the coarsest global refinement, there is a higher error. Indeed, the linear global mesh only offers a linear interpolation of the displacement field on the coupling interface. This discretization does not provide a proper description of the solution sought in the global domain.

Up to now, the local substructure corresponded to a single RVE. In the following section, different sizes and patterns of the local substructure $\Omega_{\mathcal{L}}$ are analyzed.

5.2. Different sizes and patterns of the local substructure

Let us consider the coupled problems with the meshes of **Figure 12(b)** and **Figure 12(d)**. The central parts $\Omega_{\mathcal{L}}$ are respectively composed by a set of 1 RVE, 3×3 RVEs and 5×5 RVEs. The RVE have the same dimensions and material parameters as in the previous sections. That is to say l, the size of one RVE, is taken to be of 2 mm. The material parameters are the ones given in **Section 5.1** for the common steel material. The external part $\Omega_{\mathcal{G}}$ is larger than in the previous sections: 30 mm. As previously, this one is modeled by a homogenized behavior with the parameters also given in **Section 5.1**.

The reference mesh for the full microscopic description is shown in **Figure 12(a)**. It is composed by a set of 15×15 RVEs and the material parameters are the same as in $\Omega_{\mathcal{L}}$.

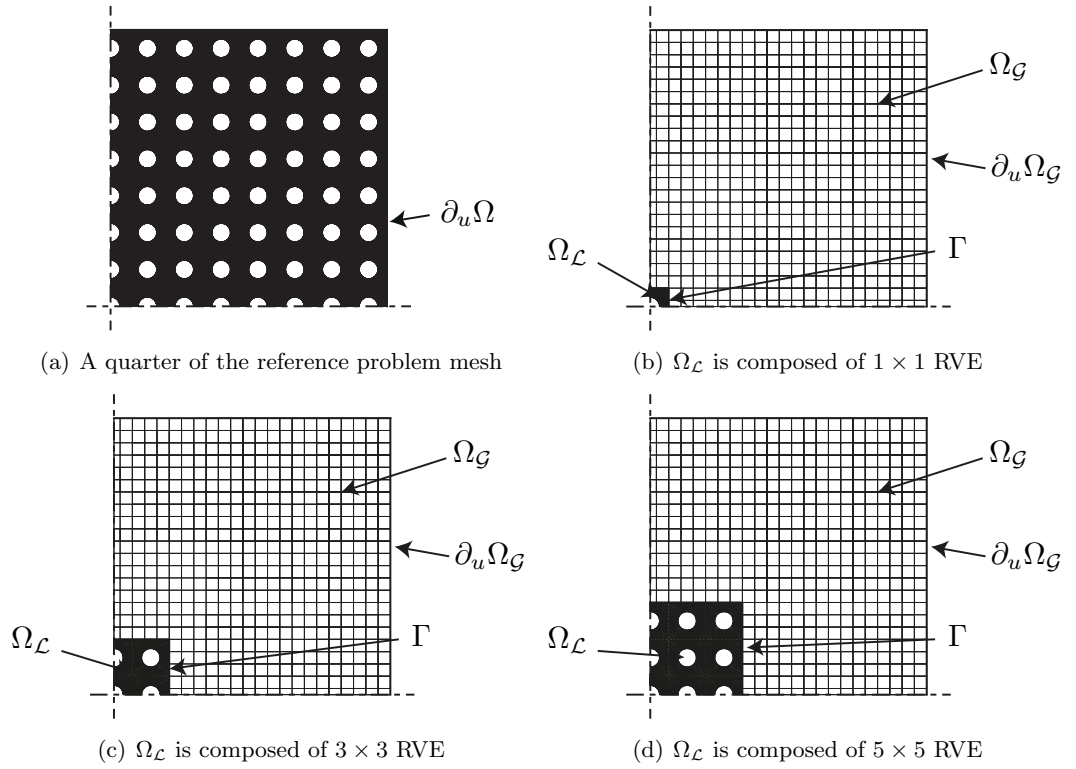
As previously, the boundary conditions on $\partial_u \Omega_{\mathcal{G}}$ satisfy equation (23) with the same components of the deformation gradient tensor as in the example 2.

The solutions given by the reference problem and by the coupled problem are compared through the error defined by (1). The local error maps are shown in **Figure 13** and their maximum and mean values are displayed in the **Table 1**.

	1×1 RVE	3×3 RVEs	5×5 RVEs
e_{E}^{max}	3%	7.7%	12%
e_{E}^{mean}	1.1%	1.7%	1.9%

Table 1: Maximum energy local error for different scenarios of local substructures.

As shown in **Figure 13**, the maximum local error increases with the number of RVEs in $\Omega_{\mathcal{L}}$ because the local substructure is getting closer to the boundary $\partial_u \Omega_{\mathcal{G}}$. Indeed, the coupled solutions



(a) A quarter of the reference problem mesh

(b) $\Omega_{\mathcal{L}}$ is composed of 1×1 RVE

(c) $\Omega_{\mathcal{L}}$ is composed of 3×3 RVE

(d) $\Omega_{\mathcal{L}}$ is composed of 5×5 RVE

Figure 12: Illustration of a quarter mesh of the reference and the coupled problems for different sizes of the local substructure.

used to compute the error maps in **Figure 13** are obtained for local structures of increasing sizes. But, the reference domain is fixed and its corresponding local region is getting bigger and closer to the outer edges. Similarly, the results show the same tendency for a single RVE according to its proximity to the outer edges. Comparing the solutions obtained for the same local structure but different sizes of test cases, the error decreases from a mean value of 2.6% (**Figure 10** - exemple 2, column 3) to a mean value of 1.1% (**Figure 13(a)**). The two maps are given for a single centered RVE with different sizes of the global and reference models.

The errors are due to edge effects as explained in the **Remark 3** because the reference solution tends to be periodic for the most centrally located cells but the boundary conditions applied are not compatible with the periodicity assumptions being used. Thus the error increases as the zoom gets closer to the outer edges. However, they remain low and localized on the boundaries of $\Omega_{\mathcal{L}}$ which satisfy the Saint-Venant principle as the macroscopic quantities are well transmitted between the local and global substructures. The error comes from the microscopic fields and does not penetrate into the interior of $\Omega_{\mathcal{L}}$.

As a result, periodicity conditions are relevant in ideal cases from a homogenization point of view. In other cases, for example non-periodic, the periodicity conditions on the microscopic parts can be advantageously modified according to the case treated.

6. Conclusions

In this paper, a global-local interface coupling technique has been proposed in order to couple a heterogeneous microscopic (local) model with a first-order homogenized (global) model. The coupling technique is based on a second-order homogenization strategy and deals with non-uniform loadings at the RVE scale. It is associated with a scale separation of interface quantities on the coupling interface which makes the formulation independent of the meshes considered.

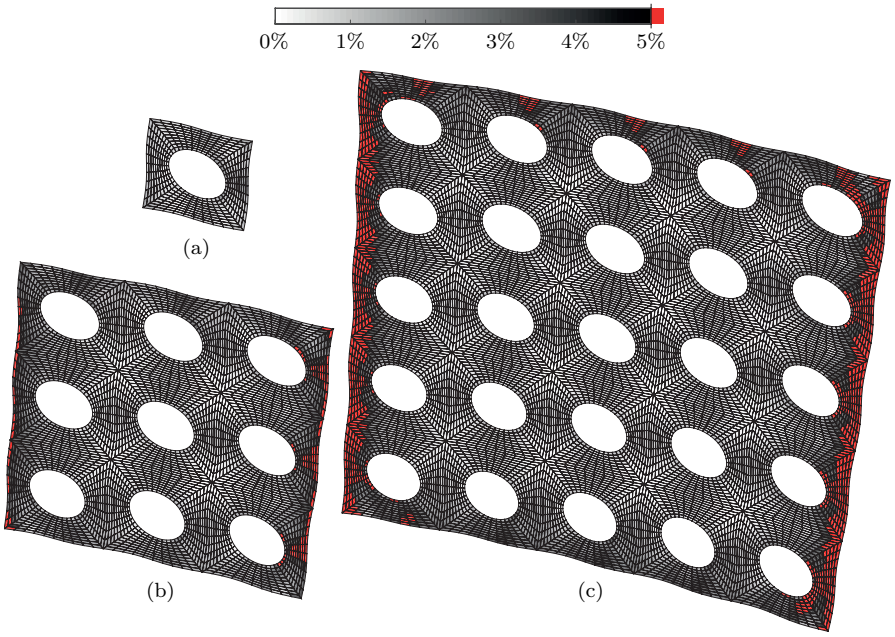


Figure 13: Error maps based on the energetic criterion e_{E} defined on (1) between $\underline{u}$ the displacement solution of the coupled problem on $\Omega_{\mathcal{L}}$ and $\underline{u}_{\text{ref}}$ the displacement solution of the corresponding part of the reference problem. $\Omega_{\mathcal{L}}$ is respectively composed by a single RVE (a) a set of 3×3 RVEs (b) and a set of 5×5 RVEs (c). The colorscale is truncated after 5%.

The proposed coupling technique was validated on different toy examples and loading cases, it gives excellent results in comparison with the considered Mortar interface coupling technique for compatible models and was shown to be nearly insensible to mesh discretizations.

The proposed coupling conditions are given for a local model fully shrouded in the global model. The current work is to extend this technique and formulate coupling conditions for different localizations of the local model, including cases near the domain boundaries. Moreover, a non-intrusive version of the approach is currently being developed.

Appendix A. Two-scale separation of dual interface quantities according to a given scala product

Appendix A.1. Separation of a force distribution into a macroscopic and microscopic parts

Let us consider an interface displacement field $\underline{W}_\gamma \in \mathcal{W}_\gamma$ defined on γ. The macroscopic part of this displacement field, $\underline{W}_\gamma^M$, is defined as the projection onto a subspace $\mathcal{W}_\gamma^M$ of $\mathcal{W}_\gamma$ with a finite dimension $n_M = dim(\mathcal{W}_\gamma^M)$. Thus, the following projector can be introduced:

$$\begin{aligned} \mathbf{\Pi}_\gamma^{M,W} : \mathcal{W}_\gamma &\to \mathcal{W}_\gamma^M \\ \underline{W}_\gamma &\mapsto \mathbf{\Pi}_\gamma^{M,W}(\underline{W}_\gamma) = \underline{W}_\gamma^M \end{aligned}$$

The microscopic part, $\underline{W}_\gamma^m$, of $\underline{W}_\gamma$ belongs to the complementary subspace $\mathcal{W}_\gamma^m$ of $\mathcal{W}_\gamma = \mathcal{W}_\gamma^M \oplus \mathcal{W}_\gamma^m$ as follows:

$$\underline{W}_\gamma^m = \underline{W}_\gamma - \underline{W}_\gamma^M = (I_d - \mathbf{\Pi}_\gamma^{M,W})(\underline{W}_\gamma)$$

Consequently, one has $\underline{W}_\gamma = \underline{W}_\gamma^M + \underline{W}_\gamma^m$. Let us introduce the following work bilinear form on

$\mathcal{W}_\gamma \times \mathcal{F}_\gamma$:

$$(\cdot,\cdot)_\gamma : \quad \begin{aligned} \mathcal{W}_\gamma \times \mathcal{F}_\gamma &\to \mathbb{R} \\ (\underline{W}_\gamma, \underline{F}_\gamma)_\gamma &\mapsto \int_\gamma \underline{W}_\gamma \cdot \underline{F}_\gamma \, \mathrm{d}\Gamma \end{aligned}$$

The microscopic part $\underline{F}_\gamma^m$ and the macroscopic part $\underline{F}_\gamma^M$ of force distribution $\underline{F}_\gamma (= \underline{F}_\gamma^M + \underline{F}_\gamma^m)$ are defined such that the work is uncoupled between scales:

$$(\underline{W}_\gamma, \underline{F}_\gamma)_\gamma = (\underline{W}_\gamma^M, \underline{F}_\gamma^M)_\gamma + (\underline{W}_\gamma^m, \underline{F}_\gamma^m)_\gamma$$

Consequently, the macroscopic force $\underline{F}_\gamma^M \in \mathcal{F}_\gamma^M$ is defined by:

$$\forall \underline{W}_\gamma^{M*} \in \mathcal{W}_\gamma^M, \ (\underline{W}_\gamma^{M*}, \underline{F}_\gamma) = (\underline{W}_\gamma^{M*}, \underline{F}_\gamma^M) \tag{A.1}$$

The spaces $\mathcal{W}_\gamma^M$ and $\mathcal{F}_\gamma^M$ have therefore the same dimension : n_M.

Appendix A.2. Macroscopic projector definition

Let us introduce $\mathbf{e}_\gamma^M$, a basis of the subspace $\mathcal{W}_\gamma^M \subset \mathcal{F}_\gamma \cap \mathcal{W}_\gamma$: $\mathbf{e}_\gamma^M = \left(\{\underline{e}_k^M\}_{k=1..n_M}\right)$. Then, the bilinear form $(\cdot,\cdot)_\gamma$ is a scalar product on the subspace generated by the basis $\mathbf{e}_\gamma^M$ and:

$$\mathbf{\Pi}_\gamma^{M,W}(\underline{W}_\gamma) = \underline{W}_\gamma^M = \sum_{k=1}^{n_M} (\underline{W}_\gamma, \underline{e}_k^M)_\gamma \, \underline{e}_k^M = \sum_{k=1}^{n_M} [\underline{W}_\gamma^M]_k \, \underline{e}_k^M = \mathbf{e}_\gamma^M [\underline{W}_\gamma^M]_{\mathbf{e}_\gamma^M}$$

where the k-th component of $\underline{W}_\gamma^M$ in $\underline{e}_k^M$ is in this case $[\underline{W}_\gamma^M]_k = (\underline{W}_\gamma, \underline{e}_k^M)_\gamma$. The vector of the n_M macro-displacement components in the macro-basis $\mathbf{e}_\gamma^M$ is denoted by $[\underline{W}_\gamma^M]_{\mathbf{e}_\gamma^M}$. Moreover, since $\mathbf{e}_\gamma^M$ is also a basis of $\mathcal{F}_\gamma^M$, one also has:

$$\mathbf{\Pi}_\gamma^{M,F}(\underline{F}_\gamma) = \underline{F}_\gamma^M = \sum_{k=1}^{n_M} (\underline{F}_\gamma, \underline{e}_k^M)_\gamma \, \underline{e}_k^M$$

and :

$$(\underline{W}_\gamma^M, \underline{F}_\gamma^M)_\gamma = \sum_{k=1}^{n_M} \sum_{j=1}^{n_M} [\underline{W}_\gamma^M]_k (\underline{e}_k^M, \underline{e}_j^M)_\gamma \, [\underline{F}_\gamma^M]_j$$

If the basis $\mathbf{e}_\gamma^M$ is orthonormal in the sense of scalar product $(\cdot,\cdot)_\gamma$ on the subspace generated by the basis $\mathbf{e}_\gamma^M$, the macrowork is then defined by:

$$(\underline{W}_\gamma^M, \underline{F}_\gamma^M)_\gamma = [\underline{W}_\gamma^M]_{\mathbf{e}_\gamma^M}^T [\underline{F}_\gamma^M]_{\mathbf{e}_\gamma^M}$$

and, finally the macroscopic projector for displacement, $\mathbf{\Pi}_\gamma^{M,W}$, is similar to the macroscopic projector for force distribution: $\mathbf{\Pi}_\gamma^{M,W} = \mathbf{\Pi}_\gamma^{M,F} = \mathbf{\Pi}_\gamma^M$. Then :

$$\mathbf{\Pi}_\gamma^M(\underline{W}_\gamma) = \underline{W}_\gamma^M = \sum_{k=1}^{n_M} [\underline{W}_\gamma^M]_k \, \underline{e}_k^M = \sum_{k=1}^{n_M} (\underline{W}_\gamma, \underline{e}_k^M)_\gamma \, \underline{e}_k^M \tag{A.2}$$

and:

$$\mathbf{\Pi}_\gamma^M(\underline{F}_\gamma) = \underline{F}_\gamma^M = \sum_{k=1}^{n_M} [\underline{F}_\gamma^M]_k \, \underline{e}_k^M = \sum_{k=1}^{n_M} (\underline{F}_\gamma, \underline{e}_k^M)_\gamma \, \underline{e}_k^M \tag{A.3}$$

For further details, interested reader can refer to [43].

Appendix B. Homogeneized Macroscopic Quantities

For the particular case of a two-dimensional rectangular RVE presented in **Figure B.14**, the 12 homogenization macroscopic quantities, ε^M_{xx}, ε^M_{yy}, ε^M_{xy}, G^M_{xxx}, G^M_{yyy}, G^M_{xyy}, G^M_{yxx}, G^M_{xxy}, G^M_{xyx}, G^M_{yxy}, G^M_{yyx}, as well as the RVE rigid body motion components u^C_y, u^C_x and ω^M can be determined by the 12 relations imposed on $\underline{W}$ by (10)-(12). The relations between the interface macro-components and the homogenization macroscopic quantities are given below according to the following notations:

$$\begin{aligned}\left\langle [\underline{W}^M]_{e_2^M} \right\rangle_{nr/ml} &= n[\underline{W}^M_r]_{e_2^M} + m[\underline{W}^M_l]_{e_2^M} \\ \left[[\underline{W}^M]_{e_4^M} \right]_{nt/md} &= n[\underline{W}^M_t]_{e_4^M} - m[\underline{W}^M_d]_{e_4^M}\end{aligned}$$

The RVE rotation and strain components are given only by mean parts of interface displacements ($[\underline{W}^M]_{e_1^M}$ and $[\underline{W}^M]_{e_2^M}$):

$$\begin{aligned}\omega^M &= -\frac{1}{2L_xL_y}\left[\sqrt{L_x}\left\langle [\underline{W}^M]_{e_1^M}\right\rangle_{1t/1d} + \sqrt{L_y}\left\langle [\underline{W}^M]_{e_1^M}\right\rangle_{1r/1l}\right] \\ \varepsilon^M_{xx} &= \frac{1}{L_x\sqrt{L_y}}\left\langle [\underline{W}^M]_{e_2^M}\right\rangle_{1r/1l} \\ \varepsilon^M_{yy} &= \frac{1}{\sqrt{L_x}L_y}\left\langle [\underline{W}^M]_{e_2^M}\right\rangle_{1t/1d} \\ \varepsilon^M_{xy} &= \frac{1}{2L_xL_y}\left[\sqrt{L_x}\left\langle [\underline{W}^M]_{e_1^M}\right\rangle_{1t/1d} - \sqrt{L_y}\left\langle [\underline{W}^M]_{e_1^M}\right\rangle_{1r/1l}\right]\end{aligned}$$

The two components of $\boldsymbol{G}_M$ that are expressed only in terms of linear components (rotation $[\underline{W}^M]_{e_3^M}$ and extension $[\underline{W}^M]_{e_4^M}$) are written as:

$$\begin{aligned}G^M_{xyx} &= \frac{1}{L_y}\sqrt{\frac{12}{L_x^3}}\left[[\underline{W}^M]_{e_4^M}\right]_{1t/1d}\left(= G^M_{xxy} = -\frac{1}{L_x}\sqrt{\frac{12}{L_y^3}}\left[[\underline{W}^M]_{e_3^M}\right]_{1r/1l}\right) \\ G^M_{yyx} &= \frac{1}{L_x}\sqrt{\frac{12}{L_y^3}}\left[[\underline{W}^M]_{e_4^M}\right]_{1r/1l}\left(= G^M_{yxy} = \frac{1}{L_y}\sqrt{\frac{12}{L_x^3}}\left[([\underline{W}^M]_{e_3^M}\right]_{1t/1d}\right)\end{aligned}$$

The other components of $\boldsymbol{G}_M$ are written as a function of the macroscopic interface displacements and the displacement in a corner A with $u^A_x = \underline{u}(A)\cdot\underline{e}_x$, $u^A_y = \underline{u}(A)\cdot\underline{e}_y$:

$$\begin{aligned}G^M_{xxx} = \frac{6}{L_x^2\sqrt{L_y}}\Bigg[&\left\langle [\underline{W}^M]_{e_2^M}\right\rangle_{1r/1l} + \sqrt{3}\left[[\underline{W}^M]_{e_3^M}\right]_{1r/1l} + \\ &+2\sqrt{\frac{L_y}{L_x}}[\underline{W}^M_d]_{e_1^M} + 2\sqrt{L_y}u^A_x\Bigg]\end{aligned}$$

$$G^M_{yyy} = \frac{6}{L_y^2\sqrt{L_x}}\left[\left\langle [\underline{W}^M]_{e_2^M}\right\rangle_{1t/1d} - \sqrt{3}\left[[\underline{W}^M]_{e_3^M}\right]_{1t/1d} - \right.$$
$$\left. -2\sqrt{\frac{L_x}{L_y}}[\underline{W}^M_l]_{e_1^M} + 2\sqrt{L_x}u_y^A\right]$$
$$G^M_{xyy} = \frac{6}{\sqrt{L_x}L_y^2}\left[\left\langle [\underline{W}^M]_{e_1^M}\right\rangle_{1t/1d} + \sqrt{\frac{3L_x}{L_y}}\left[[\underline{W}^M]_{e_3^M}\right]_{1r/1l} + \right.$$
$$\left. +2\sqrt{L_x}\left(\frac{1}{\sqrt{L_y}}[\underline{W}^M_l]_{e_2^M} + u_x^A\right)\right]$$
$$G^M_{yxx} = -\frac{6}{\sqrt{L_y}L_x^2}\left[\left\langle [\underline{W}^M]_{e_1^M}\right\rangle_{1r/1l} + \sqrt{\frac{3L_y}{L_x}}\left[[\underline{W}^M]_{e_3^M}\right]_{1t/1d} - \right.$$
$$\left. -2\sqrt{L_y}\left(\frac{1}{\sqrt{L_x}}[\underline{W}^M_d]_{e_2^M} + u_y^A\right)\right]$$

The RVE rigid body translation components are given by:

$$u_x^C = -\frac{1}{4\sqrt{L_y}}\left[4\sqrt{3}\left[[\underline{W}^M]_{e_3^M}\right]_{1r/1l} + \left\langle [\underline{W}^M]_{e_2^M}\right\rangle_{1r/7l} + \right.$$
$$\left. +\sqrt{\frac{L_y}{L_x}}\left\langle [\underline{W}^M]_{e_1^M}\right\rangle_{1t/7d} + 8\sqrt{L_y}u_x^A\right]$$
$$u_y^C = \frac{1}{4\sqrt{L_x}}\left[4\sqrt{3}\left[[\underline{W}^M]_{e_3^M}\right]_{1t/1d} - \left\langle [\underline{W}^M]_{e_2^M}\right\rangle_{1t/7d} + \right.$$
$$\left. +\sqrt{\frac{L_x}{L_y}}\left\langle [\underline{W}^M]_{e_1^M}\right\rangle_{1r/7l} - 8\sqrt{L_x}u_y^A\right]$$

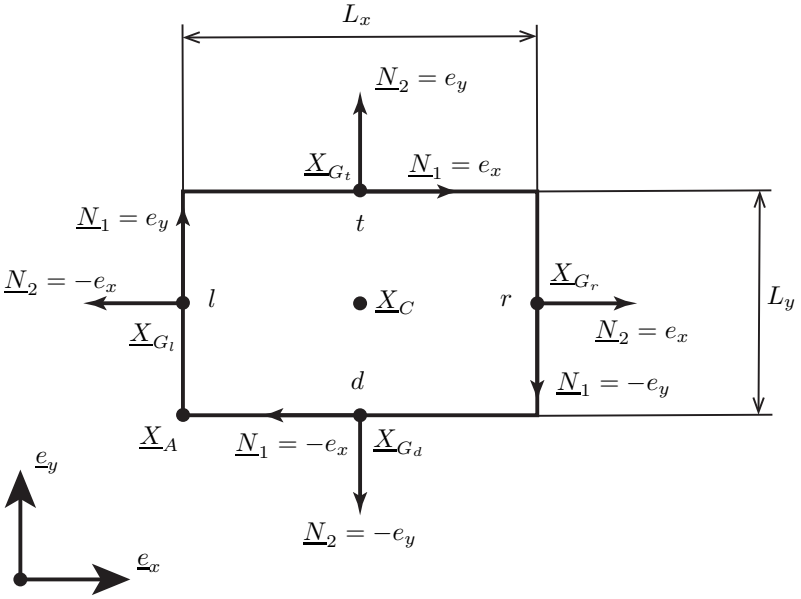


Figure B.14: Rectangular two-dimensional RVE with interface notations

Appendix C. Discretization and solution strategy

Appendix C.1. Discretization

Let us introduce the finite element approximation spaces $\mathcal{U}_s^h \subset \mathcal{U}_s$, $\mathcal{F}_s^h \subset \mathcal{F}_s$ and $\mathcal{W}_s^h \subset \mathcal{W}_s$ such that the displacement on the substructure $s \in \{\mathcal{G}, \mathcal{L}\}$ is written as:

$$\underline{u}_s^h(\underline{x}) = \sum_{k=1}^{N_s} [U_s]_k \ \underline{\varphi}_k(\underline{x})$$

the displacement on the interface Γ is written as:

$$\underline{W}_s^h(\underline{x}) = \sum_{k=1}^{N_\Gamma} [W_s]_k \ \underline{\psi}_k(\underline{x})$$

and the k-th discretized vector of macroscopic basis function is written as:

$$\underline{e}_k^{M,h}(\underline{x}) = \sum_{j=1}^{N_\Gamma} [e_k^M]_j \ \underline{\psi}_j(\underline{x})$$

Approximation spaces for the interface quantities and the displacement quantities has to be carefully chosen so that the inf-sup conditions (or LBB-conditions) are satisfied [46, 47, 48, 49]. In the following, one considers that $\mathcal{W}_s^h = \mathcal{F}_s^h$. For the sake of generality, the interface shape functions ψ are not necessary the restriction of internal shape functions $\varphi_{|\gamma}$. Thus, the kinematic admissibility between $\underline{u}_{s_{|\gamma}}$ and $\underline{W}_s$ can be classically discretized as follows:

$$[\boldsymbol{N}_{s_\gamma}][\boldsymbol{B}_{s_\gamma}][U_s] = [\boldsymbol{M}_{s_\gamma}][W_s]$$

where $[\boldsymbol{B}_{s_\gamma}]$ is a boolean operator (discretized trace operator) that restricts the nodal vector of unknowns $[U_s]$ to the interface γ. The matrices $[\boldsymbol{N}_{s_\gamma}]$ and $[\boldsymbol{M}_{s_\gamma}]$ are defined by:

$$[\boldsymbol{N}_{s_\gamma}]_{ij} = \left(\underline{\psi}_i \, , \, \underline{\varphi}_{j_{|\Gamma}}\right)_\gamma \tag{C.1}$$

$$[\boldsymbol{M}_{s_\gamma}]_{ij} = \left(\underline{\psi}_i \, , \, \underline{\psi}_j\right)_\gamma \tag{C.2}$$

Since the matrix $[\boldsymbol{M}_{s_\gamma}]$ is similar to a mass matrix, it is invertible and:

$$[W_{s_\gamma}] = \underbrace{[\boldsymbol{M}_{s_\gamma}]^{-1}[\boldsymbol{N}_{s_\gamma}][\boldsymbol{B}_{s_\gamma}]}_{[\overline{\boldsymbol{B}}_{s_\gamma}]}[U_s] \tag{C.3}$$

By introducing $[\boldsymbol{e}_\Gamma^M] = [[e_1^M], [e_2^M], \ldots, [e_{n_M}^M]]$ the $n_\Gamma \times n_M$ discretized macro-basis where column l corresponds to the discretized macro-basis function l, $[e_l^M]$, one can show that the macroscopic projectors Π_γ^M can be discretized as follows:

$$[\boldsymbol{\Pi}_{s_\gamma}^M] = [\boldsymbol{e}_{s_\gamma}^M]^t [\boldsymbol{e}_{s_\gamma}^M][\boldsymbol{M}_{s_\gamma}]$$

Thus, one deduces that the discretized macroscopic and microscopic displacements are such that:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} [W_{s_\gamma}^m] & = & \left([\boldsymbol{I_d}] - [\boldsymbol{\Pi}_{s_\gamma}^M]\right)[\overline{\boldsymbol{B}}_{s_\gamma}][U_s] \\ [W_{s_\gamma}^M] & = & [\boldsymbol{e}_{s_\gamma}^M][W_{s_\gamma}^M]_{e^M} = [\boldsymbol{\Pi}_{s_\gamma}^M][\overline{\boldsymbol{B}}_{s_\gamma}][U_s] \end{array} \right. \tag{C.4}$$

where $[W_{s_\gamma}^M]_{e^M}$ is a n_M-length vector of components of $\underline{W}_{s_\gamma}^M$ in the discretized macro-basis $[\boldsymbol{e}_{s_\gamma}^M]$. Similar approximations can be given for an interface force $\underline{F}_{s_\gamma}$. Due to the orthogonality of the macro-basis function, one has the following property:

$${}^t[\boldsymbol{e}_{s_\gamma}^M][\boldsymbol{M}_{s_\gamma}][\boldsymbol{e}_{s_\gamma}^M] = [\boldsymbol{I_d}] \tag{C.5}$$

Appendix C.2. Discretized saddle-point problem

The substitution of discretized quantities into the weak formulation gives the following monolithic finite element linear system:

$$\begin{bmatrix} [\boldsymbol{K}] & [\boldsymbol{C}]^T & [\boldsymbol{P}]^T \\ [\boldsymbol{C}] & [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{0}] \\ [\boldsymbol{P}] & [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{\epsilon}] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [U] \\ [\Lambda_C] \\ [\Lambda_P] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [F] \\ [0] \\ [0] \end{bmatrix} \tag{C.6}$$

where:

$$[\boldsymbol{K}] = \begin{bmatrix} [\boldsymbol{K}_{\mathcal{G}}] & [\boldsymbol{0}] \\ [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{K}_{\mathcal{L}}] \end{bmatrix}$$

$$[U] = \begin{bmatrix} [U_{\mathcal{G}}] \\ [U_{\mathcal{L}}] \end{bmatrix}$$

$$[F] = \begin{bmatrix} [F_{\mathcal{G}}] \\ [F_{\mathcal{L}}] \end{bmatrix}$$

with $[\boldsymbol{K}_{\mathcal{G}}]$ and $[\boldsymbol{K}_{\mathcal{L}}]$ the stiffness matrices of the global and the local substructures respectively, $[U_{\mathcal{G}}]$ and $[U_{\mathcal{L}}]$ the nodal vector of unknows of the global and the local substructures, $[F_{\mathcal{G}}]$, $[F_{\mathcal{L}}]$ the generalized forces applied over the global and the local substructures and $[\Lambda_C]$, $[\Lambda_P]$ the discretized Lagrangian multipliers associated to relations (10)-(14).

The discretized coupling operator $[\boldsymbol{C}]$ in (C.6) is defined by:

$$[\boldsymbol{C}] = \begin{bmatrix} [\boldsymbol{C}^U_{\mathcal{G}}] & -[\boldsymbol{C}^U_{\mathcal{L}}] \\ [\boldsymbol{P}^L_{\mathcal{G}}] & -[\boldsymbol{P}^L_{\mathcal{L}}] \\ [\boldsymbol{B}_{\mathcal{G}_A}] & -[\boldsymbol{B}_{\mathcal{L}_A}] \end{bmatrix}$$

where the coupling operators on the substructure $s \in \{\mathcal{L}, \mathcal{G}\}$ concerning the macro-basis components $p \in \{T, L, Q\}$ are defined by:

$$[\boldsymbol{C}^p_s] = \begin{bmatrix} {}^t[\boldsymbol{e}^p_{s_d}][\boldsymbol{M}_{s_d}][\overline{\boldsymbol{B}}_{s_d}] \\ {}^t[\boldsymbol{e}^p_{s_r}][\boldsymbol{M}_{s_r}][\overline{\boldsymbol{B}}_{s_r}] \\ {}^t[\boldsymbol{e}^p_{s_t}][\boldsymbol{M}_{s_t}][\overline{\boldsymbol{B}}_{s_t}] \\ {}^t[\boldsymbol{e}^p_{s_l}][\boldsymbol{M}_{s_l}][\overline{\boldsymbol{B}}_{s_l}] \end{bmatrix}$$

and the periodicity operators of linear macrocomponent on the substructure s by:

$$[\boldsymbol{P}^L_s] = \begin{bmatrix} {}^t[\boldsymbol{e}^L_{s_t}][\boldsymbol{M}_{s_t}][\overline{\boldsymbol{B}}_{s_t}] - {}^t[\boldsymbol{e}^L_{s_d}][\boldsymbol{M}_{s_d}][\overline{\boldsymbol{B}}_{s_d}] \\ {}^t[\boldsymbol{e}^L_{s_r}][\boldsymbol{M}_{s_r}][\overline{\boldsymbol{B}}_{s_r}] - {}^t[\boldsymbol{e}^L_{s_l}][\boldsymbol{M}_{s_l}][\overline{\boldsymbol{B}}_{s_l}] \end{bmatrix}$$

The discretized trace operator $[\boldsymbol{B}_{s_A}]$, on the substructure s, restricts the nodal vector of unknowns $[U_s]$ to the A corner.

The discretized periodicity operator $[\boldsymbol{P}]$ in (C.6) is defined by:

$$[\boldsymbol{P}] = \begin{bmatrix} [\boldsymbol{P}^Q_{\mathcal{G}}] & [\boldsymbol{0}] \\ [\boldsymbol{P}^m_{\mathcal{G}}] & [\boldsymbol{0}] \\ [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{P}^Q_{\mathcal{L}}] \\ [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{P}^m_{\mathcal{L}}] \end{bmatrix}$$

where the periodicity operators of quadratic macrocomponent on substructure $s \in \{\mathcal{L}, \mathcal{G}\}$ is defined by:

$$[\boldsymbol{P}^Q_s] = \begin{bmatrix} {}^t[\boldsymbol{e}^Q_{s_t}][\boldsymbol{M}_{s_t}][\overline{\boldsymbol{B}}_{s_t}] - {}^t[\boldsymbol{e}^Q_{s_d}][\boldsymbol{M}_{s_d}][\overline{\boldsymbol{B}}_{s_d}] \\ {}^t[\boldsymbol{e}^Q_{s_r}][\boldsymbol{M}_{s_r}][\overline{\boldsymbol{B}}_{s_r}] - {}^t[\boldsymbol{e}^Q_{s_l}][\boldsymbol{M}_{s_l}][\overline{\boldsymbol{B}}_{s_l}] \end{bmatrix}$$

and the periodicity operator of the micro-components on local substructure, with a periodic mesh, is given by:

$$[\boldsymbol{P}_{\mathcal{L}}^{m}] = \begin{bmatrix} [\boldsymbol{M}_{\mathcal{L}_t}]\,([\boldsymbol{I_d}] - [\boldsymbol{\Pi}_{\mathcal{L}_t}])\,[\overline{\boldsymbol{B}}_{\mathcal{L}_t}] - [\boldsymbol{M}_{\mathcal{L}_d}]\,([\boldsymbol{I_d}] - [\boldsymbol{\Pi}_{\mathcal{L}_d}])\,[\overline{\boldsymbol{B}}_{\mathcal{L}_d}] \\ [\boldsymbol{M}_{\mathcal{L}_r}]\,([\boldsymbol{I_d}] - [\boldsymbol{\Pi}_{\mathcal{L}_r}])\,[\overline{\boldsymbol{B}}_{\mathcal{L}_r}] - [\boldsymbol{M}_{\mathcal{L}_l}]\,([\boldsymbol{I_d}] - [\boldsymbol{\Pi}_{\mathcal{L}_l}])\,[\overline{\boldsymbol{B}}_{\mathcal{L}_l}] \end{bmatrix}$$

The penalty term $[\boldsymbol{\epsilon}]$, is added to system (C.6) in order to enforce periodicity of microscopic displacements and is defined by:

$$[\boldsymbol{\epsilon}] = \begin{bmatrix} [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{0}] \\ [\boldsymbol{0}] & -\varepsilon[\boldsymbol{M}_{\mathcal{G}}^{P}] & [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{0}] \\ [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{0}] \\ [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{0}] & -\varepsilon[\boldsymbol{M}_{\mathcal{L}}^{P}] \end{bmatrix}$$

where $\varepsilon > 0$ and as the meshes of the global and the local substructures are assumed to be periodic:

$$[\boldsymbol{M}_{s}^{P}] = \begin{bmatrix} [\boldsymbol{M}_{s_d}] & [\boldsymbol{0}] \\ [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{M}_{s_l}] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [\boldsymbol{M}_{s_t}] & [\boldsymbol{0}] \\ [\boldsymbol{0}] & [\boldsymbol{M}_{s_r}] \end{bmatrix}$$

One can refer to [47] (sections 3.2.2 and 3.2.3) for further details on the penalty term $[\boldsymbol{\epsilon}]$.

References

[1] J. T. Oden, T. I. Zohdi, Analysis and adaptive modeling of highly heterogeneous elastic structures, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 148 (3) (1997) 367–391. doi:10.1016/S0045-7825(97)00032-7.

[2] L. Gendre, O. Allix, P. Gosselet, F. Comte, Non-intrusive and exact global/local techniques for structural problems with local plasticity, Computational Mechanics 44 (2) (2009) 233–245. doi:10.1007/s00466-009-0372-9.

[3] M. Duval, J.-C. Passieux, M. Salaün, S. Guinard, Non-intrusive Coupling: Recent Advances and Scalable Nonlinear Domain Decomposition, Archives of Computational Methods in Engineering 23 (1) (2016) 17–38. doi:10.1007/s11831-014-9132-x.

[4] R. J. M. Smit, W. A. M. Brekelmans, H. E. H. Meijer, Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite element modeling, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 155 (1) (1998) 181–192. doi:10.1016/S0045-7825(97)00139-4.

[5] C. Miehe, J. Schröder, J. Schotte, Computational homogenization analysis in finite plasticity Simulation of texture development in polycrystalline materials, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 171 (3) (1999) 387–418. doi:10.1016/S0045-7825(98)00218-7.

[6] K. Terada, N. Kikuchi, A class of general algorithms for multi-scale analyses of heterogeneous media, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 190 (40) (2001) 5427–5464. doi:10.1016/S0045-7825(01)00179-7.

[7] F. Feyel, J.-L. Chaboche, FE2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 183 (3) (2000) 309–330. doi:10.1016/S0045-7825(99)00224-8.

[8] S. Forest, Mechanics of generalized continua: Construction by homogenization, Le Journal de Physique IV 08 (PR4) (1998) Pr4–39–Pr4–48. doi:10.1051/jp4:1998405.

[9] F. Feyel, A multilevel finite element method (FE2) to describe the response of highly non-linear structures using generalized continua, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 192 (28) (2003) 3233–3244. doi:10.1016/S0045-7825(03)00348-7.

[10] J. R. Willis, The Overall Elastic Response of Composite Materials, Journal of Applied Mechanics 50 (4b) (1983) 1202–1209. doi:10.1115/1.3167202.

[11] M. Ostoja-Starzewski, S. D. Boccara, I. Jasiuk, Couple-stress moduli and characteristic length of a two-phase composite, Mechanics Research Communications 26 (4) (1999) 387–396. doi:10.1016/S0093-6413(99)00039-7.

[12] V. G. Kouznetsova, M. G. D. Geers, W. a. M. Brekelmans, Multi-scale constitutive modelling of heterogeneous materials with a gradient-enhanced computational homogenization scheme, International Journal for Numerical Methods in Engineering 54 (8) (2002) 1235–1260. doi:10.1002/nme.541.

[13] J. Yvonnet, G. Bonnet, A consistent nonlocal scheme based on filters for the homogenization of heterogeneous linear materials with non-separated scales, International Journal of Solids and Structures 51 (1) (2014) 196–209. doi:10.1016/j.ijsolstr.2013.09.023.

[14] J. Yvonnet, G. Bonnet, Nonlocal/coarse graining homogenization of linear elastic media with non-separated scales using least-square polynomial filters, International Journal for Multiscale Computational Engineering 12 (5) (2014) 375–395. doi:10.1615/IntJMultCompEng.2014010414.

[15] A. Tognevi, M. Guerich, J. Yvonnet, A multi-scale modeling method for heterogeneous structures without scale separation using a filter-based homogenization scheme, International Journal for Numerical Methods in Engineering 108 (1) (2016) 3–25. doi:10.1002/nme.5200.

[16] E. W. C. Coenen, V. G. Kouznetsova, M. G. D. Geers, Computational homogenization for heterogeneous thin sheets, International Journal for Numerical Methods in Engineering 83 (8-9) (2010) 1180–1205. doi:10.1002/nme.2833.
[17] E. Bosco, V. G. Kouznetsova, E. W. C. Coenen, M. G. D. Geers, A. Salvadori, A multiscale framework for localizing microstructures towards the onset of macroscopic discontinuity, Computational Mechanics 54 (2) (2014) 299–319. doi:10.1007/s00466-014-0986-4.
[18] P. Ladevèze, A. Nouy, O. Loiseau, A multiscale computational approach for contact problems, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 191 (43) (2002) 4869–4891. doi:10.1016/S0045-7825(02)00406-1.
[19] P.-A. Guidault, O. Allix, L. Champaney, C. Cornuault, A multiscale extended finite element method for crack propagation, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 197 (5) (2008) 381–399. doi:10.1016/j.cma.2007.07.023.
[20] K. Saavedra, O. Allix, P. Gosselet, On a multiscale strategy and its optimization for the simulation of combined delamination and buckling, International Journal for Numerical Methods in Engineering 91 (7) (2012) 772–798. doi:10.1002/nme.4305.
[21] R. Bouclier, J.-C. Passieux, M. Salaün, Development of a new, more regular, mortar method for the coupling of NURBS subdomains within a NURBS patch: Application to a non-intrusive local enrichment of NURBS patches, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 316 (2017) 123–150. doi:10.1016/j.cma.2016.05.037.
[22] S. Guinard, R. Bouclier, M. Toniolli, J.-C. Passieux, Multiscale analysis of complex aeronautical structures using robust non-intrusive coupling, Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences 5 (1) (2018) 1. doi:10.1186/s40323-017-0094-z.
[23] W. Dornisch, G. Vitucci, S. Klinkel, The weak substitution method – an application of the mortar method for patch coupling in NURBS-based isogeometric analysis, International Journal for Numerical Methods in Engineering 103 (3) (2015) 205–234. doi:10.1002/nme.4918.
[24] E. Brivadis, A. Buffa, B. Wohlmuth, L. Wunderlich, Isogeometric mortar methods, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 284 (2015) 292–319. doi:10.1016/j.cma.2014.09.012.
[25] J. Dolbow, I. Harari, An efficient finite element method for embedded interface problems, International Journal for Numerical Methods in Engineering 78 (2) (2008) 229–252. doi:10.1002/nme.2486.
[26] C. Annavarapu, M. Hautefeuille, J. E. Dolbow, A robust Nitsche's formulation for interface problems, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 225-228 (2012) 44–54. doi:10.1016/j.cma.2012.03.008.
[27] V. P. Nguyen, P. Kerfriden, M. Brino, S. P. A. Bordas, E. Bonisoli, Nitsche's method for two and three dimensional NURBS patch coupling, Computational Mechanics 53 (6) (2014) 1163–1182. doi:10.1007/s00466-013-0955-3.
[28] D. Schillinger, I. Harari, M.-C. Hsu, D. Kamensky, S. K. F. Stoter, Y. Yu, Y. Zhao, The non-symmetric Nitsche method for the parameter-free imposition of weak boundary and coupling conditions in immersed finite elements, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 309 (2016) 625–652. doi:10.1016/j.cma.2016.06.026.
[29] R. Bouclier, J.-C. Passieux, A Nitsche-based non-intrusive coupling strategy for global/local isogeometric structural analysis, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 340 (2018) 253–277. doi:10.1016/j.cma.2018.05.022.
[30] C. Lacour, Y. Maday, Two different approaches for matching nonconforming grids: The Mortar Element method and the Feti Method, BIT Numerical Mathematics 37 (3) (1997) 720–738. doi:10.1007/BF02510249.
[31] F. B. Belgacem, The Mortar finite element method with Lagrange multipliers, Numerische Mathematik 84 (2) (1999) 173–197. doi:10.1007/s002110050468.
[32] C. Bernardi, Y. Maday, F. Rapetti, Basics and some applications of the mortar element method, GAMM-Mitteilungen 28 (2) (2005) 97–123. doi:10.1002/gamm.201490020.
[33] Kouznetsova, Varvara, Computational homogenization for the multi-scale analysis of multi-phase materials, Ph.D. thesis, Technische Universiteit Eindhoven (2002).
[34] F. Otero, S. Oller, X. Martinez, Multiscale Computational Homogenization: Review and Proposal of a New Enhanced-First-Order Method, Archives of Computational Methods in Engineering (2016) 1–27doi:10.1007/s11831-016-9205-0.
[35] V. G. Kouznetsova, M. G. D. Geers, W. a. M. Brekelmans, Size of a Representative Volume Element in a Second-Order Computational Homogenization Framework, International Journal for Multiscale Computational Engineering 2 (4). doi:10.1615/IntJMultCompEng.v2.i4.50.
[36] V. G. Kouznetsova, M. G. D. Geers, W. A. M. Brekelmans, Multi-scale second-order computational homogenization of multi-phase materials: A nested finite element solution strategy, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 193 (48) (2004) 5525–5550. doi:10.1016/j.cma.2003.12.073.
[37] J. R. Willis, Variational and Related Methods for the Overall Properties of Composites, in: C.-S. Yih (Ed.), Advances in Applied Mechanics, Vol. 21, Elsevier, 1981, pp. 1–78. doi:10.1016/S0065-2156(08)70330-2.
[38] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, D. Jeulin, Determination of the size of the representative volume element for random composites: Statistical and numerical approach, International Journal of Solids and Structures 40 (13) (2003) 3647–3679. doi:10.1016/S0020-7683(03)00143-4.
[39] Ł. Kaczmarczyk, C. J. Pearce, N. Bićanić, Scale transition and enforcement of RVE boundary conditions in second-order computational homogenization, International Journal for Numerical Methods in Engineering 74 (3)

(2008) 506–522. doi:10.1002/nme.2188.
[40] O. van der Sluis, P. J. G. Schreurs, W. A. M. Brekelmans, H. E. H. Meijer, Overall behaviour of heterogeneous elastoviscoplastic materials: Effect of microstructural modelling, Mechanics of Materials 32 (8) (2000) 449–462. doi:10.1016/S0167-6636(00)00019-3.
[41] K. Terada, M. Hori, T. Kyoya, N. Kikuchi, Simulation of the multi-scale convergence in computational homogenization approaches, International Journal of Solids and Structures 37 (16) (2000) 2285–2311. doi:10.1016/S0020-7683(98)00341-2.
[42] V. Kouznetsova, W. a. M. Brekelmans, F. P. T. Baaijens, An approach to micro-macro modeling of heterogeneous materials, Computational Mechanics 27 (1) (2001) 37–48. doi:10.1007/s004660000212.
[43] P. Ladevèze, O. Loiseau, D. Dureisseix, A micro-macro and parallel computational strategy for highly heterogeneous structures, International Journal for Numerical Methods in Engineering 52 (1-2) (2001) 121–138. doi:10.1002/nme.274.
[44] G. Guguin, O. Allix, P. Gosselet, S. Guinard, Nonintrusive coupling of 3D and 2D laminated composite models based on finite element 3D recovery, International Journal for Numerical Methods in Engineering 98 (5) (2014) 324–343. doi:10.1002/nme.4630.
[45] G. Guguin, O. Allix, P. Gosselet, S. Guinard, On the computation of plate assemblies using realistic 3D joint model: A non-intrusive approach, Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences 3 (1) (2016) 16. doi:10.1186/s40323-016-0069-5.
[46] I. Babuška, The finite element method with Lagrangian multipliers, Numerische Mathematik 20 (3) (1973) 179–192. doi:10.1007/BF01436561.
[47] D. Boffi, F. Brezzi, M. Fortin, Mixed Finite Element Methods and Applications, Vol. 44 of Springer Series in Computational Mathematics, Springer, Berlin Heidelberg, 2013.
[48] F. Brezzi, On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrangian multipliers, ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis - Modélisation Mathématique et Analyse Numérique 8 (R2) (1974) 129–151.
[49] F. Brezzi, M. Fortin, Approximation of Saddle Point Problems, in: Mixed and Hybrid Finite Element Methods, Springer, 1991, pp. 36–88.

PREPRINT
3

J. Hinojosa, O. Allix, P-A. Guidault and Ph.Cresta. Domain decomposition methods with nonlinear localization for the buckling and post-buckling analyses of large structures. *Advances in Engineering Software*, 70:13–24, 2014.

Domain decomposition methods with nonlinear localization for the buckling and post-buckling analyses of large structures

J. Hinojosa[a], O. Allix[b], P.-A. Guidault[b], Ph. Cresta[c]

[a] *Departamento de Tecnologías Industriales, Facultad de Ingeniería, Universidad de Talca, Camino a Los Niches, km.1, Curicó, Chile*
[b] *LMT-Cachan (ENS Cachan/CNRS/UPMC/PRES UniverSud Paris) 61, avenue du Président Wilson, 94235 Cachan CEDEX, France*
[c] *EADS Innovation Works, Campus engineering, BP 90112, 31703 Blagnac CEDEX, France*

Abstract

The paper is focussed on the robustness of parallel computation in the case of buckling and post-buckling analyses. In the nonlinear context, domain decomposition methods are mainly used as a solver for the tangent problem solved at each iteration of a Newton-Raphson algorithm. In case of strongly nonlinear and heterogeneous problems as those encountered in buckling and post-buckling, this procedure may lead to severe difficulties regarding convergence and efficiency. The problem of convergence is regarded as the most critical issue at the industrial level. Indeed if a method, which can show efficiency for some problems, is not robust with respect to convergence the method will not be implemented by industrial end-users. Therefore, two paths are explored to gain robustness when making use of domain decomposition methods: (1) a nonlinear localization strategy which may also improve the robustness by treating the nonlinearity at the subdomain level; (2) a mixed framework allowing to circumvent the problem of local divergence (i.e. at the subdomain level). It is to be noted that those two ingredients may also be used to improve the numerical efficiency of the method but this is not the main focus of the paper. Simple structures are first considered to illustrate the method performances. Results obtained in the case of a boxed structure and of a stiffened panel are then discussed.

Keywords: Primal and mixed domain decomposition methods, Nonlinear structural analysis, Post-buckling, Nonlinear localization

1. Introduction

The design of complex structures, such as aeronautical ones, requires a large number of physical tests up to failure through all different scales (structural details, assemblies, complete sections or full structures). In order to reduce the costs and the total time of these procedures, engineers introduce, at earlier stages of the design, numerical simulations to guide, complete or replace one part of the experimental approach.

The aeronautical structures are composed of slender elements, which are designed to stand local skin buckling but not global one. With increasing loads, the nonlinear zones can extend and

redistribute the stresses through the structure. Direct computations at the detailed scale of industrial structures are inaccessible at the moment due to computational costs and/or computational memory issues. In this context, analyses at different scales (complete structure, structural details) are often introduced in the computation. At the industrial level they are today mainly performed in a "descendant" approaches, by doing in a first step a simplified, often linear, simulation of the whole structure. A local analysis is then performed with possible geometrical and material nonlinearities by prescribing the boundary condition obtained from the upper, linear, computation while taking into account the desired refinement in order to handle possible nonlinearities. Such procedure ignores therefore possible stress redistribution or nonlinearities expansion in the rest of the structure. In the case of buckling a previous study [1] shows that very large errors can be induced by such a procedure.

Multiscale methods are a way to overcome the limitations of descending approaches. They have been developed at first for the computation of large linear problems. In the context of nonlinear problems they can be used to solve each of the subsequent linear problems, which comes from a Newton-Raphson or quasi-Newton strategy. This is the case of nonlinear geometrical analysis based on the Newton-Krylov-Schur (NKS) method [2, 3, 4]. In case of strongly nonlinear and large heterogeneous problems as those encountered in buckling and post-buckling, this procedure may lead to severe difficulties regarding convergence and efficiency. The problem of convergence is regarded as the most critical issue at the industrial level. Robustness is therefore crucial.

The first difficulty comes from the fact that the larger the model, the higher the number of possible buckling modes may lead to divergence even for a direct solver. The second difficulty is specific to domain decomposition method (DDM). Indeed, classical DDM preconditioners, which have been mainly designed for linear problems, may not be adapted to deal with large stiffness modifications as those encountered in buckling and post-buckling analysis. The paper proposes to circumvent these two effects by introducing two ingredients in the domain decomposition framework:

1. A nonlinear localization strategy which improves the robustness by treating the nonlinearity at the subdomain level avoiding to deal with a high number of local buckling modes.
2. A mixed domain decomposition scheme which favors nor interface displacement continuity, which is a too stiff condition, nor the interface equilibrium, but a combination (Robin-like condition). For the resulting condensed interface problem, this scheme shares similar features with continuation methods to control the algorithm convergence.

Nonlinear localization strategy was first proposed in [1] to improve the convergence rate for the post-buckling analysis of stable structures. A dual version has been applied to damage analysis in [5]. The present paper focuses on the robustness of this approach to deal with problems which exhibit possible unstable global behaviors and multiple solutions. Moreover, the strategy has been parallelized to address more complex structures. This paper is an updated and revised version of the conference paper [6].

In this study, a corotational formulation dedicated to slender structure is adopted [7, 8, 9]. Under the assumption of small strain in local frames, this formulation proposes to choose as a reference configuration the one obtained by a rigid rotation of the element, and to express strains and stresses in a coordinate frame, attached to the element, called corotational frame. This allows a linear treatment of the behavior inside the elements in their attached frame, while the geometrical nonlinearity remains in the rotation of these frames. More general finite elements methods for shells can be found in [10].

In this paper, a primal and a mixed domain decomposition methods with nonlinear localization are first presented. Second, these approaches are illustrated on simple structures which exhibit various unstable behaviors in order to appreciate the robustness of the different approaches as well as the interest of nonlinear localization. Third, parallel computations of a boxed structure and a stiffened panel are proposed and discussed.

2. Description of the reference problem

The studied structures are composed of beams, plates and shells, which may be prone to geometrical nonlinearities. The following assumptions are used: small strains, large displacements, isothermal quasistatic state and linear elasticity.

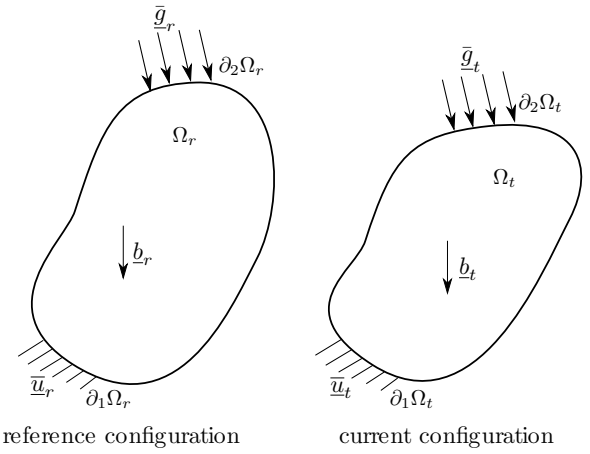


Figure 1: Reference problem

Let us consider a structure denoted by Ω_r in its reference configuration (**Fig. 1**), Ω_t being its current configuration. It is subjected to a dead body force $\underline{b}$ and a dead surface forces $\underline{\overline{g}}$ on a portion $\partial_2\Omega$. On the complementary part of the boundary $\partial_1\Omega$, the displacement $\underline{\overline{u}}$ is prescribed. The problem to be solved consists in finding $\Big(\underline{u}(\underline{M},t), \underline{\underline{\pi}}(\underline{M},t)\Big), \underline{M} \in \Omega,\ t \in [0,T]$, that verifies:

- Kinematic admissibility of displacement field, defining space $\mathcal{U}_{ad}$:

$$\underline{u}(\underline{M},t) = \underline{\overline{u}}(\underline{M},t) \quad \text{on} \quad \partial_1\Omega, \forall\, t \in [0,T] \tag{1}$$

  Space $\mathcal{U}_{ad,0}$ is the corresponding vector space.

- Static admissibility of stress field:

$$\forall \underline{u}^* \in \mathcal{U}_{ad,0} \quad \int_{\Omega_r} \underline{\underline{\pi}} \,:\, \underline{\underline{\hat{e}}}[\underline{u}^*]\ d\Omega_r = \int_{\Omega_r} \underline{b}_r\ \underline{u}^*\ d\Omega_r + \int_{\partial_2\Omega_r} \underline{\overline{g}}_r\ \underline{u}^*\ ds_r \tag{2}$$

  where $\underline{\underline{\pi}}$ is the second Piola-Kirchoff stress tensor and $\underline{\underline{\hat{e}}}$ the rate of the Green strain.

- Constitutive law,

$$\underline{\underline{\pi}} = \mathbf{C}(\underline{\underline{F}}) \quad \text{with} \quad \underline{\underline{F}} = \frac{d\,\underline{u}}{d\underline{M}_r} \tag{3}$$

$\mathbf{C}$ is a nonlinear operator which corresponds to a linear elastic behavior under small strains assumption in the rotated configuration. In practice, we followed the approach of Felippa and Haugen where the corrotated configuration is defined at the element level after discretization by finite element method [9] (**Fig. 2**).

For sake of simplicity, $\underline{u}$ will now refer to the nodal vector of displacement unknowns. Using classical notations, Equation (2) now reads:

$$\underline{f}_{int}(\underline{\underline{\pi}}, \underline{u}) + \underline{f} = \underline{0} \tag{4}$$

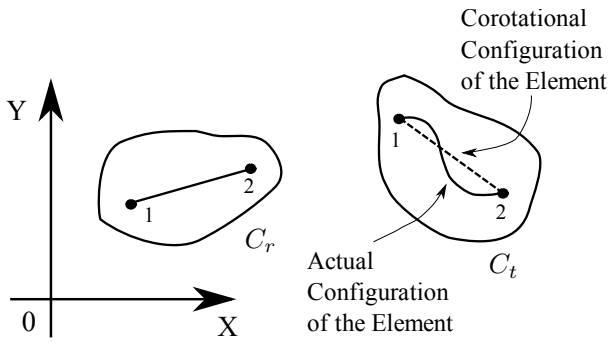


Figure 2: Corotational configurations for a beam element

where $\underline{f}$ are the nodal external forces and $\underline{f}_{int}$ the internal forces. These types of nonlinear equations are generally solved by classical incremental/iterative procedures, such as Newton-Raphson methods through a linearization of (4), leading to (5) and (6)

$$(\underline{f}_{int})^{(t+\Delta t)} \cong (\underline{f}_{int})^{(t)} + \left(\frac{\partial \underline{f}_{int}}{\partial \underline{u}}\right)^{(t)} .\delta\underline{u} \tag{5}$$

$$\cong (\underline{f}_{int})^{(t)} + \mathbf{K}_T(\underline{u}^{(t)}, \underline{\pi}^{(t)}).\delta\underline{u} \tag{6}$$

where δu denotes the displacement increment.

3. DDM with nonlinear localization

3.1. Motivations and principle of the method

The domain decomposition methods allow the resolution of large problems with parallel computers. A review is presented in [11]. The reader could refer to [12, 13, 14] for the primal methods, to [15, 16, 17] for dual methods and to [18, 19, 20, 21, 22, 23, 24] for mixed methods, among others. When these methods are used with a Newton iterative procedure for solving nonlinear problems, they are often called Newton-Krylov-Schur (NKS) methods. These methods have been described in [2] for nonlinear elastic problems, in [3] for the computation of large slender structures and in [25] for multi-contact problems. These NKS methods are based on:

- The Newton method for the linearization and the incremental iterative scheme;
- The domain decomposition and the Schur condensation of the tangent problem to define the interface problem;
- A Krylov parallel iterative solver for solving the linear problem condensed on the interfaces.

Fig. 3 presents the different stages of a classical NKS method, where DDM is used to solve the tangent problem after linearization.

Such method involves a large number of linear systems (interface problem and substructure problems), which produce a large number of communications between the processors (assembly of global residual). When dealing with large nonlinear problems, an important computational effort is spent to treat regions that behaves linearly when the nonlinearities are not equally distributed. These efforts are amplified in the case of a geometrical nonlinear problem when a large number of loading steps are necessary to pass a limit or a bifurcation point.

In nonlinear domain decomposition approaches, the nonlinear problem is decomposed before any linearization. These allow to propose various iterative schemes. The one proposed in this paper is called, nonlinear localization [1]. This strategy is based on NKS methods, with additional local

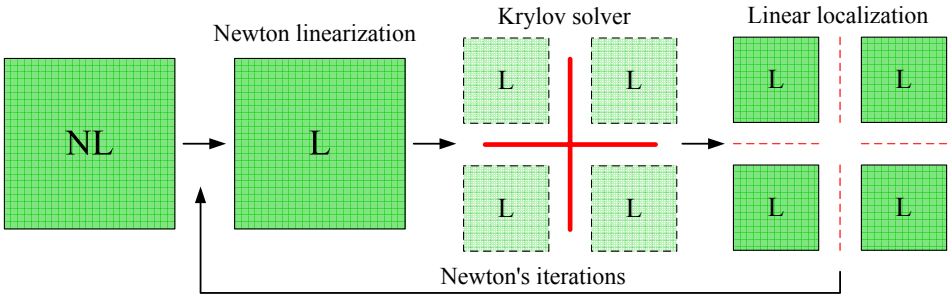


Figure 3: Classical NKS method

iterations per substructure after each global computation in order to enforce nonlinear behavior and equilibrium at the substructure level. This leads to the iterative scheme depicted in **Fig. 4**. In comparison with classical DDM for nonlinear problems (**Fig. 3**), a nonlinear problem is solved within each substructure at the local stage.

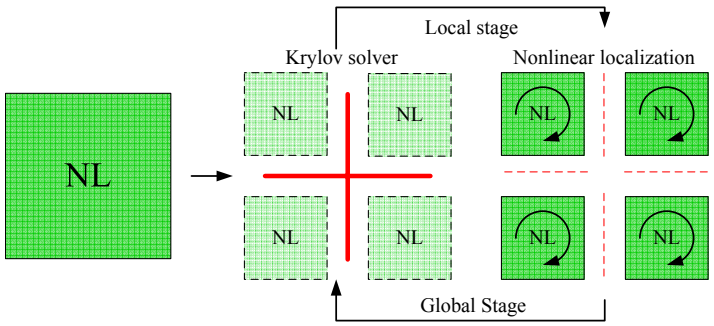


Figure 4: NKS method with nonlinear localization

The idea is to overcome the rather poor convergence for unbalanced nonlinear effects, i.e. when the nonlinearity has a significant spatial variation as discussed in [26]. In this approach, the computational effort is concentrated on the sensitive zones of the structure to treat nonlinear phenomena (local buckling) at the scale where they are actually occurring, i.e. within substructures. Nonlinear problems within each substructure are much simpler than the initial unsubstructured one since fewer multiple solutions are to be handled. One other potential outcome is the decrease of the number of global iterations which reduces the number of communications between processors in case of a parallel implementation of the method.

3.2. Nonlinear localization with a primal DDM

3.2.1. Nonlinear local stage – substructure problem

The local stage, on each substructure, corresponds to solving a geometrical nonlinear problem with prescribed interface displacements $\underline{U}$, computed by preliminary solving the global condensed interface problem (see Section 3.2.2). This substructure problem is solved by a Newton method. The tangent problem can be written as:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}^s_{Tii}(\underline{u}^s) & \mathbf{K}^s_{Tib}(\underline{u}^s) \\ \mathbf{K}^s_{Tbi}(\underline{u}^s) & \mathbf{K}^s_{Tbb}(\underline{u}^s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta\underline{u}^s_i \\ \delta\underline{u}^s_b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{r}^s_i \\ \underline{r}^s_b \end{bmatrix} \tag{7}$$

where i represents the internal degrees of freedom (d.o.f.) of substructure s, while b the d.o.f. of substructure s connected to an interface, $\delta\underline{u}^s$ represents a displacement correction. Quantities $\underline{r}^s_i$, $\underline{r}^s_b$ represent the associated residual of the substructure equilibrium at the considered iteration.

To solve this problem, a direct elimination method of interface unknowns $\delta\underline{u}_b^s = \delta\underline{U}$ obtained at the previous global stage is performed. Penalization or Lagrange multipliers techniques could be also used:

$$\delta\underline{u}_i^s = {\mathbf{K}_{Tii}^s}^{-1}(\underline{r}_i^s - \mathbf{K}_{Tib}^s \delta\underline{U}) \tag{8}$$

The iterative procedure is stopped when reaching the local error criterion, η_{local}^{crit}. This criterion is defined as the ratio between the norm of the current residual over the norm of the initial one.

3.2.2. Condensed interface problem

A correction $\delta\underline{U}$ of the interface displacement $\underline{U}$, allowing to verify in a weak sense the equilibrium of interface forces is searched (superscripts: $.^s$ and $.^{s'}$ represents two neighboring substructures):

$$\underline{F}^s + \underline{F}^{s'} = \underline{0} \tag{9}$$

The tangent interface problem can be written as (in matrix form):

$$\mathbf{S}_T \delta\underline{U} = \underline{r} \tag{10}$$

where $\mathbf{S}_T$ is the classical tangent Schur operator, obtained by the assembly of the local tangent operators $\mathbf{S}_T^s$:

$$\mathbf{S}_T = \sum_s A^s {\mathbf{S}_T}^s A^{st} = \sum_s A^s (\mathbf{K}_{Tbb}^s - \mathbf{K}_{Tbi}^s {\mathbf{K}_{Tii}^s}^{-1} \mathbf{K}_{Tib}^s) A^{st} \tag{11}$$

where A is the assembling operator linking boundary d.o.f. of substructure (s) to the global boundary unknowns.

Second member $\underline{r}$ is the condensed interface residual:

$$\underline{r} = \sum_s A^s \underline{r}^s = \sum_s A^s ({\underline{r}_b}^s - \mathbf{K}_{Tbi}^s {\mathbf{K}_{Tii}^s}^{-1} {\underline{r}_i}^s) \tag{12}$$

Algorithm 1 presents the different steps of the approach. It only differs from the classical NKS by the nonlinear local problems that are solved when needed (depending on the local error criteria) and that replace the classical linear localization step.

Algorithm 1: Nonlinear localization with a primal DDM

Do [*Global Newton iterations*]
- Assemble local tangent operators $\mathbf{K}_T^s(\underline{u})$
- Factorize $\mathbf{K}_{Tii}^s$
- Assemble local residuals $\underline{r}^s$
- Solve condensed global problem *[Krylov solver]*: $\mathbf{S}_T\delta\underline{U} = \underline{\mathrm{r}}$
- **Do** *[Local Newton iterations]*
  - Compute $\delta\underline{u}_i^s = \mathbf{K}_{Tii}^{s-1}(\underline{r}_i^s - \mathbf{K}_{Tib}^s A^{st}\delta\underline{U})$
  - Update $\underline{u}_i, \mathbf{K}_T^s(\underline{u})$ *and* $\underline{r}_i^s$
- **Until** $\eta_{local} < \eta_{local}^{crit}$

Until $\eta_{global} < \eta_{global}^{crit}$

3.3. Nonlinear localization with a mixed DDM

A mixed domain decomposition scheme is here proposed. This approach favors nor interface displacement continuity, which is a too stiff condition, nor the interface equilibrium, but a combination (Robin-like condition). The connection of nonconforming meshes based on a mixed link can be found in [27]. For the resulting condensed interface problem, this scheme shares similar features with continuation methods and helps to control the algorithm convergence. The result is

that it can deal with larger load increments at the global level, and reduces the number of global iterations and, consequently, the amount of exchanged data between processors.

The Robin operator of substructure s, denoted by $\mathbf{k}^s$ in the following, is a parameter of the method. It corresponds to an interface stiffness. This operator is chosen to be symmetric positive definite to have well-posed local substructure problems. When this interface stiffness is large ($\|\mathbf{k}^s\| \to \infty$) the method behaves like a primal DDM (enforcing displacement continuity at the interfaces) solved with a penalization method. If it is small ($\|\mathbf{k}^s\| \to 0$), the method behaves like a dual DDM (enforcing force continuity at the interfaces). In this case, rigid body modes of the substructures have to be handled. Nevertheless, the choice of the interface stiffness is done in order to avoid such a difficulty.

3.3.1. Condensed interface problem

This stage consists in solving the global condensed interface problem. Its goal is to ensure the admissibility of interface unknowns, namely equilibrium of interface forces $\underline{F}$ and continuity of interface displacements $\underline{U}$, while transmitting the mechanical information to the entire structure in order to ensure the numerical scalability of the algorithm. More precisely, knowing $\underline{f}_b^s$ and $\underline{u}_b^s$ (local interface forces and displacements coming from a previous local stage (see Section 3.3.2) or initialization stage), the interface quantities $\underline{F}$ and $\underline{U}$ are sought such that they verify the continuity of displacement (13) and equilibrium of forces (14) at each interface $\Gamma^{ss'}$ connecting two neighboring substructures s and s'. For each interface $\Gamma^{ss'}$, one has:

$$\underline{U}^s = \underline{U}^{s'} \quad \text{on} \quad \Gamma^{ss'} \tag{13}$$

$$\underline{F}^s + \underline{F}^{s'} = \underline{0} \quad \text{on} \quad \Gamma^{ss'} \tag{14}$$

The following search directions are introduced:

$$\mathbf{S}_T^s(\underline{U}^s - \underline{u}_b^s) = \underline{F}^s - \underline{f}_b^s \tag{15}$$

$$\mathbf{S}_T^{s'}(\underline{U}^{s'} - \underline{u}_b^{s'}) = \underline{F}^{s'} - \underline{f}_b^{s'} \tag{16}$$

where quantities $\underline{u}_b^s$, $\underline{u}_b^{s'}$, $\underline{f}_b^s$ and $\underline{f}_b^{s'}$ are known. The choice of $\mathbf{S}_T^s$ as a search direction, was *a priori* made in [1] so that it propagates global information between the substructures. $\mathbf{S}_T^s$ is the tangent primal Schur complement of substructure s. In this case, search direction $\mathbf{S}_T^s$ (resp. $\mathbf{S}_T^{s'}$) is an operator that connects all the interface d.o.f. of substructure s (resp. s').

The mixed nonlinear condensed problem that arises from the equilibrium of interface forces ($\underline{F}^s + \underline{F}^{s'}$ at the interfaces between substructures s and s'), after linearization and a displacement formulation, reads:

$$\mathbf{S}_T \delta\underline{U} = \sum_s A^s(\mathbf{S}_T{}^s \underline{u}_b^s + \underline{r}_b^s - \mathbf{K}_{T_{bi}}^s \mathbf{K}_{T_{ii}}^s{}^{-1} \underline{r}_i^s) = \sum_s A^s \underline{R}^s = \underline{R} \tag{17}$$

$$\underline{U}^s = \underline{U}_{old}^s + \delta\underline{U} \quad \text{and} \quad \underline{F}^s = \underline{f}_b^s + \mathbf{S}_T^s(\underline{U}^s - \underline{u}_b^s) \tag{18}$$

This system is similar to the one of the primal method (10). It only differs by the right-hand side term $\underline{R}$. It can be solved in the same manner as for the classical NKS methods, in particular with the same type of preconditioners. Balanced boundary forces $\underline{F}$ from global displacement $\underline{U}$ are obtained using (18). This problem can be treated independently within each substructure.

3.3.2. Nonlinear local stage – substructure problem

The second stage consists in finding fields $\underline{f}^s$ and $\underline{u}^s$ (interface forces and displacements) in each substructure s that verify the nonlinear behavior and the mixed boundary conditions, knowing the

interface forces $\underline{F}^s$ (balanced) and the interface displacement $\underline{U}^s$ (continuous at interfaces), coming from the previous global condensed interface problem (see Section 3.3.1):

$$\underline{f}^s_{int}(\underline{u}^s) + \underline{\overline{g}}^s + \underline{f}^s = \underline{0} \qquad on\ \Omega^s \tag{19}$$

$$\underline{u}^s = \underline{\overline{u}}^s \qquad on\ \partial_1\Omega \cap \partial\Omega^s \tag{20}$$

$$(\underline{f}^s - \underline{F}^s) + \mathbf{k}^s(\underline{u}^s_b - \underline{U}^s) = \underline{0} \qquad on\ \Gamma^s \tag{21}$$

were Equation (21) is a Robin-like condition. Variables in capital refer to interface quantities that are known at this stage (see 3.3.1).

This problem is solved by a Newton method. The linear system obtained at each iteration, taking into account the Robin operator $\mathbf{k}^s$, allows the computation of the displacement corrections $\delta\underline{u}^s$. The tangent discretized problem reads (using index i as internal unknowns and index b for interface unknowns):

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}^s_{Tii}(\underline{u}^s) & \mathbf{K}^s_{Tib}(\underline{u}^s) \\ \mathbf{K}^s_{Tbi}(\underline{u}^s) & \mathbf{K}^s_{Tbb}(\underline{u}^s) + \mathbf{k}^s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta\underline{u}^s_i \\ \delta\underline{u}^s_b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{r}^s_i \\ \underline{r}^s_b + \mathbf{k}^s.\Delta\underline{U}^s - \underline{F}^s \end{bmatrix} \tag{22}$$

where the known quantity $\Delta\underline{U}^s = \underline{U}^s - \underline{u}^s_b$ represents the displacement jump between the interfaces and the substructure. This equation (22) is similar to Equation (7). It differs by the introduction of the Robin operators, $\mathbf{k}^s$, on the left-hand side and the interfaces variables ($\underline{U}^s$ and $\underline{F}^s$, by means of the same Robin parameter $\mathbf{k}^s$) on the right-hand side.

In case of linear elasticity problem, the theoretical optimal value of $\mathbf{k}^s$ is the Schur complement of the rest of the structure, but this computation is very expensive. Some classical approximations are the Schur complement ($\bar{\mathbf{S}}^s$) of the neighboring substructures or a Schur complement of several layers of elements of the neighboring substructures [28] for instance. For this study, the Schur complements of the neighboring substructures is used, $\mathbf{k}^s = \alpha\bar{\mathbf{S}}^s$, where the choice of the coefficient α will be studied in Section 4.4.

Algorithm 2 presents the different steps of the method. The main advantage of this method with respect to the previous one is its ability to relax the constraints imposed on the nonlinear local problems by mixed boundary conditions.

Algorithm 2: Nonlinear localization with a mixed DDM

Do [*Global Newton iterations*]
- Assemble local tangent operators $\mathbf{K}^s_T(\underline{u})$
- Factorize $\mathbf{K}^s_{Tii}$
- Assemble local residual $\underline{R}^s$
- Solve condensed global problem *[Krylov solver]*: $\mathbf{S}_T.\delta\underline{U} = \underline{R}$
- **Do** *[Local Newton iterations]*
  - Compute $\delta\underline{u}^s_i = (\mathbf{K}^s_T + \mathbf{k}^s)^{-1}(\underline{r}^s + \mathbf{k}^s\Delta\underline{U} - \underline{F}^s)$
  - Update $\underline{u}_i, \mathbf{K}^s(\underline{u})$ *and* $\underline{r}^s$
- **Until** $\eta_{local} < \eta^{crit}_{local}$

Until $\eta_{global} < \eta^{crit}_{global}$

4. Comparison between classical NKS approach and primal and mixed DDM with nonlinear localization

The robustness of the different approaches and the interest of nonlinear localization are illustrated through three simple beam structures of increasing complexity (stable, snap-back, snap-through behaviors). It is shown in [1] that in order to minimize the computational cost, the local error criterion is chosen such that:

$$\eta^{crit}_{local} = \sqrt{\eta^{crit}_{global}} \tag{23}$$

The idea is that local nonlinear substructure problems do not have to be solved precisely in order to avoid unnecessary local iterations. Since the residue of the global interface problem is obtained by the assembly of the local residual, global convergence at a given precision implies local convergence at the same precision. In the following examples, the convergence criterion is set to $\eta_{global}^{crit} = 10^{-6}$.

In order to test the methods, a Newton-Raphson method with an adaptation of the load increment size is implemented. In case of divergence, the load increment is halved, and for two consecutive successful convergences, it is doubled.

In addition to test the robustness of the different strategies, this section aims at showing the benefit of nonlinear localization. Therefore, the solving of the tangent interface problem with an iterative solver is not of main interest. Thus, for the three examples presented in this section, the interface problem is solved with a direct solver without resorting to an iterative solver. The different problems are solved in a sequential way, not in parallel. Moreover, no continuation methods are used.

4.1. Globally stable structure

The studied structure is presented in **Fig. 5**. It is a frame structure submitted to a bending force. It is made of beams and partitioned into 10 substructures. Each substructure is composed

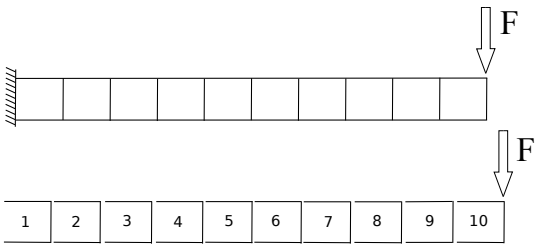


Figure 5: Globally stable structure submitted to a vertical load and domain decomposition of the beam structure

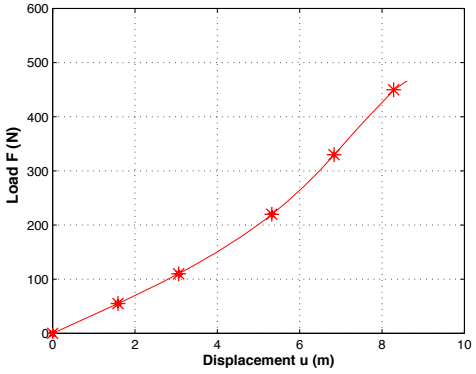


Figure 6: Load - displacement curve for structure of **Fig. 5**. Points represent the converged points for the mixed method with linear localization and an initial load step of 55 N.

of three beams, which are discretized into 10 corotational Navier-Bernoulli beam elements. Each beam is 1 meter long and has a cross-section area of 0.16 m^2. Each substructure has 4 interface nodes. The material is linear elastic with a Young modulus of 200 GPa and a Poisson's ratio of 0.3. In order to induce local buckling, the lower beam of substructure 1 has been weakened, by reducing its section to half the original.

Tab. 1 presents the results for the various strategies: classical primal NKS (NKS Clas.), primal (NKS-P) and mixed (NKS-M) NKS with nonlinear localization. The behavior of the structure is shown in **Fig. 6**, where are also shown the converged points for the mixed NKS method with nonlinear localization (third row of **Tab. 1**).

The classical NKS method (first row in **Tab. 1**) can not start with an initial load step larger than 55 N. For comparison purpose, the same initial loading step has been used for the two nonlinear localization strategies (second and third row). Less global and local iterations are required for the nonlinear strategies, especially the mixed version, with respect to the classical NKS method. The last row shows that the mixed approach can compute the final loading (450 N) in a single load step. This is the only method that can achieve it, and the result shows a very important reduction of the number of global and local iterations.

Method	No. load steps	Initial load step (N)	No. global iter.	No. local iter.
NKS Clas.	8	55	63	630
NKS-P	5	55	46	488
NKS-M	5	55	22	428
NKS-M	1	450	5	262

Table 1: Convergence results for the different methods on a globally stable structure

Nonlinear localization strategies, especially the mixed one, show a gain in robustness since convergence is obtained even with very large load steps. Moreover, a gain in numerical efficiency can also be appreciated thanks to a significant reduction of the number of global iterations while keeping a reasonable - equivalent - number of local iterations compared with the classical NKS approach.

4.2. Structure with a snap-through behavior

The studied structure is presented in **Fig. 7**. It is a frame structure with the same type of elements than for the stable structure (see Section 4.1)). The structure represents an arch (60^o)

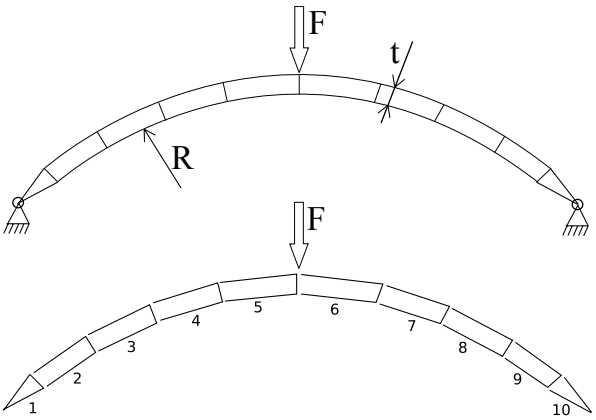


Figure 7: Globally unstable structure (snap-through) submitted to a vertical load. Domain decomposition of the arc structure

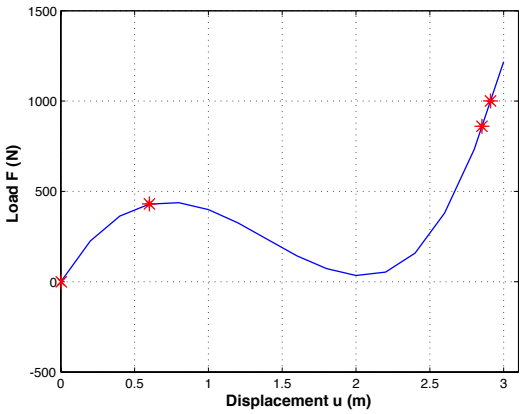


Figure 8: Load - displacement curve for structure of **Fig. 7**. Points represent the converged points for the mixed method with linear localization and an initial load step of 430 N.

with a radius of $R = 10\ m$ and a thickness of $t = 0.6\ m$, made of beams with a cross-section area of 0.16 m^2. The material is linear elastic with a Young modulus of 200 GPa and a Poisson's ratio of 0.3. It is simply supported at both ends and submitted to a vertical load applied at its middle section. It is decomposed into 10 substructures. Each substructure has several hundreds of inner degrees of freedom and shares 4 nodes (12 boundary d.o.f.) with its neighboring substructures. In order to induce local buckling, the upper beam of substructure 5 has been weakened, reducing the section to its half.

The global behavior of this structure is presented in **Fig. 8**, where the convergence points for the mixed method with nonlinear localization (NKS-M, fourth row of **Tab. 2**) are also shown. **Tab. 2** shows that the two primal methods (marked with a $*$) can not pass the limit point that occurs for a load of 430 N. The final and the initial load steps are consequently equal. The computation for the mixed approach (third row) can be continued up to the final loading of 1000 N (fourth row). The mixed approach (NKS-M) is the only one that can pass the limit point and compute the final loading in a single load step (last row of **Tab. 2**).

Method	No. load steps	Initial/Final load steps (N)	No. global iter.	No. local iter.
NKS Clas.*	1	430/430	7	70
NKS-P*	1	430/430	7	70
NKS-M	1	430/430	6	101
NKS-M	3	430/1000	33	506
NKS-M	1	1000/1000	10	234

Table 2: Convergence results for the different methods on a globally unstable structure (snap-through)

In this case of snap-through behavior, the mixed approach is more robust than the primal approaches since it can pass the limit point without resorting to continuation methods. For the resulting condensed interface problem, the mixed approach shares similar features with continuation methods.

4.3. Structure with a snap-back behavior

The studied structure is presented in **Fig. 9**, it is a frame structure with the same type of elements than for the two previous examples. The structure represents an arch (15^o) with a radius

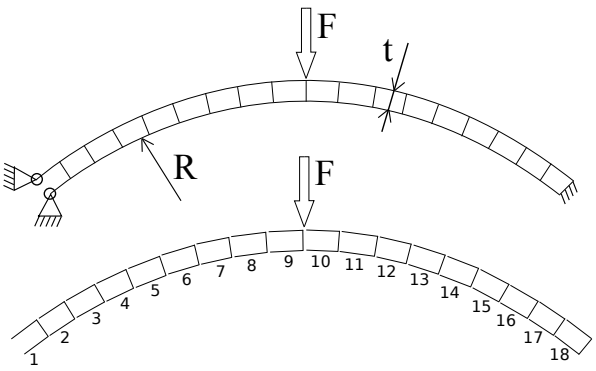


Figure 9: Globally unstable structure (snap-back) submitted to a vertical load. Domain decomposition of the arch structure

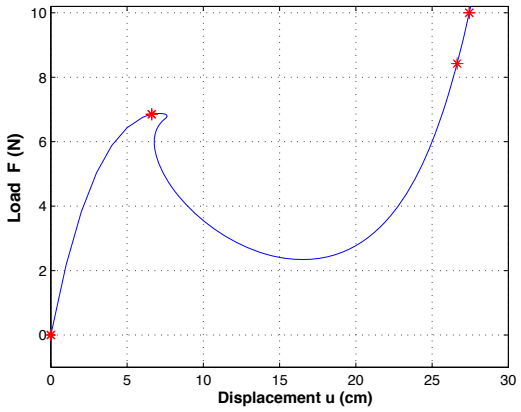


Figure 10: Load - displacement curve for structure of **Fig. 9**. Points represent the converged points for the mixed method with linear localization and an initial load step of 6.8 N.

of $R = 2040\ cm$ and a thickness of $t = 2.9\ cm$, made of beams with a cross-section of 16 cm^2. The material is linear elastic with a Young modulus of 3100 MPa and a Poisson's ratio of 0.3. It is simply supported at the left end and clamped at the right end. A vertical load is applied at the middle section of the structure. It is decomposed into 18 substructures. In order to induce local buckling, the lower beam of substructure 1 has been weakened.

The behavior of this structure is presented in **Fig. 10**, where are also shown the converged points for the mixed method with nonlinear localization (NKS-M, third column of **Tab. 3**). The two primal approaches (NKS Clas. and NKS-P) require a load step just before the critical point in order to continue the computation up to the maximum load of 10 N. Nevertheless a high number of global iterations are required with several divergence situations. The mixed version is the only one that can reach the maximum load in a single load step (fourth column in **Tab. 3**).

As for the previous example, the two primal approaches, NKS Clas., and NKS-M, encounter convergence difficulties to pass the snap-back. Both diverge. Introducing a continuation method is required. The mixed approach does not diverge without need for a pass following method.

NKS Clas.		NKS-P		NKS-M		NKS-M	
Load inc. (cm)	No. glob. it. (loc.)	Load inc. (cm)	No. glob. it. (loc.)	Load inc. (cm)	No. glob. it. (loc.)	Load inc. (cm)	No. glob it. (loc.)
6,85	9 (162)	6,85	9 (162)	6,85	9 (162)	10	13 (350)
3,15	diver.	3,15	diver.	3,15	diver.		
1,58	diver.	1,58	diver.	1,58	13 (238)		
0,79	diver.	0,79	diver.	1,58	10 (180)		
0,39	13 (234)	0,39	13 (235)				
0,39	4 (72)	0,39	4 (72)				
0,79	4 (72)	0,79	4 (72)				
0,79	4 (72)	0,79	4 (72)				
0,79	4 (72)	0,79	4 (72)				
10	38 (684)	**10**	38 (685)	**10**	32 (580)	**10**	13 (350)

Table 3: Convergence results for the different methods on a globally unstable structure (snap-back)

4.4. Sensitivity study of the method with respect to the choice of the Robin operator

Here the effect of the Robin operator on the performances of the strategy is investigated more closely. For a given substructure s, the value of $\mathbf{k}^s$ is multiplied by a factor α varying from 10^{-3} to 10^2: $\mathbf{k}^s = \alpha\bar{\mathbf{S}}^s$. Operator $\bar{\mathbf{S}}^s$ corresponds to the condensed Schur complement of the neighboring substructures of substructure s when the remaining interfaces of these substructures are clamped. **Tab. 4**, **Tab. 5** and **Tab. 6** present the resulting number of global/local iterations for the different cases studied in Sections 4.1, 4.2 and 4.3.

Factor	No. global iter.	No. local iter. iter.
10^{-3}	no conv	no conv
10^{-2}	4	109
10^{-1}	4	97
10^{0}	5	94
10^{1}	8	111
10^{2}	18	182

Table 4: Influence of the Robin operator for the globally stable structure (**Fig. 5**)

Factor	No. global iter.	No. local iter. iter.
10^{-3}	6	156
10^{-2}	5	121
10^{-1}	6	120
10^{0}	6	101
10^{1}	7	97
10^{2}	13	135

Table 5: Influence of the Robin operator for the structure with snap-through behavior (**Fig. 7**)

Factor	No. global iter.	No. local iter. iter.
10^{-3}	no conv	no conv
10^{-2}	7	263
10^{-1}	7	184
10^{0}	9	176
10^{1}	9	163
10^{2}	9	162

Table 6: Influence of the Robin operator for the structure with snap-back behavior (**Fig. 9**)

From these results, it appears that a quite wide range of the α factor ensures goods results for all types of structure:

$$10^{-2} < \alpha < 10^{0} \tag{24}$$

The results for low or high value of α is expected (see Introduction of Section 3.3). Theoretically, the optimal Robin operator $\mathbf{k}^s_{th}$ for substructure s is the Schur complement of the rest of the structure on the substructure interfaces. Here, the chosen approximation of $\mathbf{k}^s_{th}$ corresponds

to the condensed Schur complement $\bar{\mathbf{S}}^s$ of the neighboring substructures of substructure s when the remaining interfaces of these substructures are clamped. However, for this one-direction decomposition of this slender structure, a better approximation is given by $\mathbf{k}^s_{th} \sim \frac{1}{n}\bar{\mathbf{S}}^s$ where n is the number of substructures. This explains why, in this case, a parameter α of the order of $1/n$ ($n \simeq 17$) is a suitable choice. In practice, choosing $\alpha = 10^{-1}$ should ensure a good convergence for a similar number of substructures.

In the general case, a substructure will have several neighboring substructures, which will generate as much interfaces as neighbors it has (one interface is shared by only 2 substructures). In this case, the computation of the Robin operator is done by interface and relates the two concerned substructures. For 3D examples with plate elements treated in Section 5, a strip band elements in each neighboring substructures close to the interfaces of substructure s as defined in [28] is used. This corresponds to the condensation of the strip band of the neighboring substructure on the considered interface, when its others degrees of freedom are clamped.

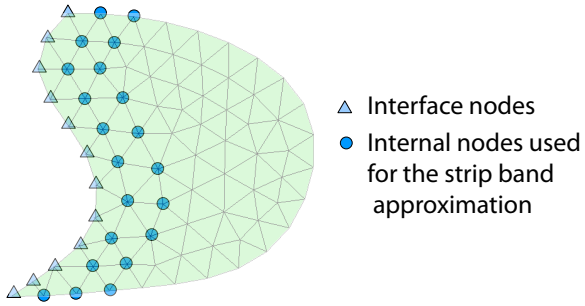


Figure 11: Strip band approximation of the interface stiffness (Robin operator) $\mathbf{k}^s$ with a two-elements thickness

If multiple substructures are connected at the same point (node), multiplicity of the concerned nodes must be taking into account for the interface force or residual contributions.

5. Application to large structures with a parallel solver

The efficiency of the three approaches, the classical NKS approach (NKS Clas.), the primal (NKS-P) and the mixed (NKS-M) approaches with nonlinear localization is illustrated through two examples of stiffened structures. Despite their simplicity, they are quite representative of practical cases that aeronautical engineers could face. First example induces a one-direction domain decomposition whereas the second one implies rather a two-directions partitioning based on components and technology considerations. These two examples enables one to illustrate both the contributions and the limitations of the proposed approaches to address large scale complex industrial structures.

All the studied structures are made of aluminum and are supposed to remain in their elastic domain even though they undergo large displacements. Young modulus is $E = 70\,000\ MPa$ and Poisson's ratio is $\nu = 0.3$.

Concerning the discretization, three-nodes triangular elements have been used with Reissner-Mindlin formulation for the bending part that accounts for transverse shearing. Order one shape functions are used for both the bending and the tensile parts. Global error criterion is set to $\eta^{crit}_{global} = 10^{-6}$. For the mixed approach, a strip band of three-element thickness is used to compute search direction $\mathbf{k}^s$ (**Fig. 11**). Note that no continuation methods are used in the following examples.

5.1. Parallelization details

A complete parallelization of the strategy is made:

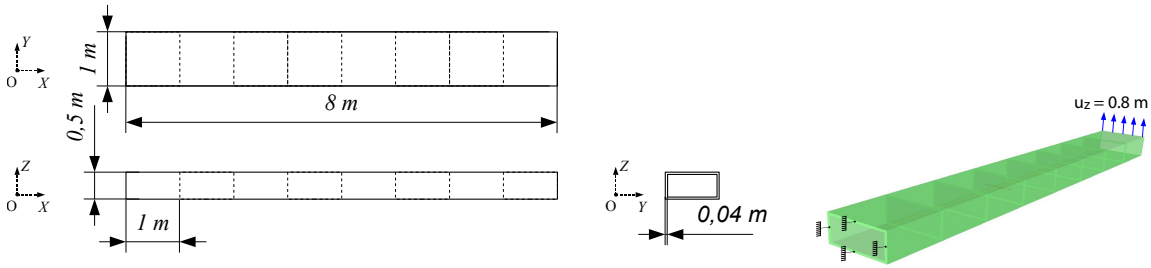
- *The nonlinear local stage* (Section 3.2.1 for the primal version and section 3.3.2 for the mixed version) is by definition a very parallelizable stage, because each substructure problem is computed independently from the rest of the structure and does not need to communicate with any other processor.
- *The tangent condensed interface problem* (Section 3.2.2 for the primal version and section 3.3.1 for the mixed version) is parallelized by means of a BDD-C (Balancing Domain Decomposition by Constraints) [29]. A GMRES iterative solver was chosen because of the non-symmetry of the operator due to the corotational formulation used [7, 8, 9].

The BDD-C method avoids assembling the operator of the interface problem and exchanging a large amount of data between processors. Only residual vectors are exchanged and assembled. The BDD-C preconditioner enforces the continuity of displacement at the corner nodes between subdomains in order to endow the DDM with good scalability and convergence properties.

5.2. Stiffened boxed structure under bending load

5.2.1. Effect of nonlinear localization on the number of global iterations

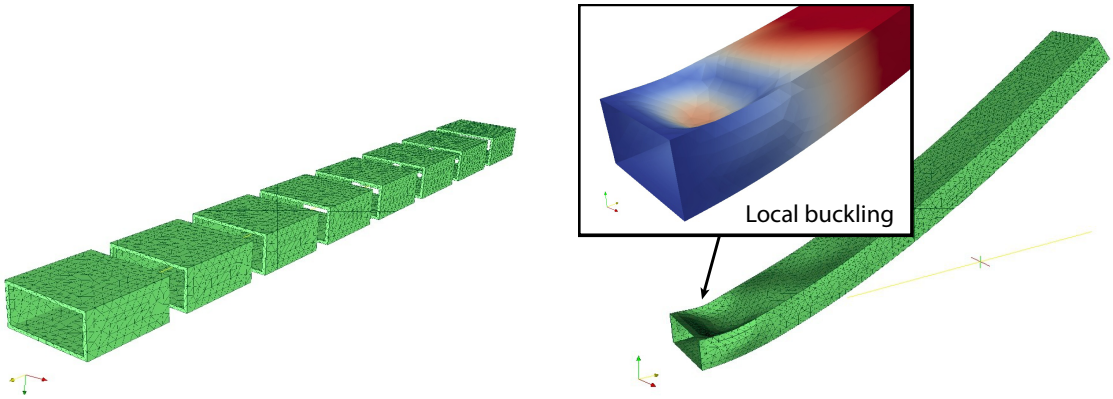
The structure is clamped and subjected to a prescribed vertical displacement at its other end (**Fig. 12(a)**). Aluminum sheet thickness is about 2 *mm*. The decomposition into eight subdomains (**Fig. 13(a)**) is induced by the location of the eight internal stiffeners of 4 cm in height (**Fig. 12(a)**). Each substructure introduced 2 400 degrees of freedom leading to a model with about 20 000 unknowns. On the final configuration of **Fig. 13(b)**, a local skin buckling can



(a) Dimensions (b) Loading

Figure 12: Dimensions and boundary conditions

be seen in the subdomain close to the clamped zone.



(a) Decomposition into 8 subdomains (b) Deformed shape

Figure 13: One-dimensional decomposition and deformed shape at final load step

Tab. 7 shows that seven loads steps are required with the classical NKS approach but only two (resp. one) for the primal (resp. mixed) strategy with nonlinear localization. The total number of global problems is clearly smaller compared with the classical NKS approach - about six times smaller for the mixed approach. It is worth noting that no divergence occurred with the mixed approach. Primal and mixed nonlinear localization strategies allow larger load steps and consequently required less global iterations than the classical NKS approach. These conclusions corroborate those of Section 4.

NKS Clas.		NKS-P		NKS-M	
Load inc. (m)	No. global. it. (loc.)	Load inc. (m)	No. global. it. (loc.)	Load inc. (m)	No. global. it. (loc.)
0,8	diver.	0,8	diver.	0,8	6 (126)
0,4	diver.	0,4	5 (90)		
0,2	5 (40)	0,4	5 (79)		
0,2	diver.				
0,1	6 (48)				
0,1	5 (40)				
0,1	5 (40)				
0,1	5 (40)				
0,1	5 (40)				
0,1	5 (40)				
0,8	35 (280)	**0,8**	10 (169)	**0,8**	6 (126)

Table 7: Total numbers of global and local iterations for the three approaches

5.2.2. Numerical scalability

The length of the structure of **Fig. 13** is now changed. It varies from 2 to 32 substructures. As previously, each of them are delimited by a stiffener. In order to have similar nonlinear geometrical effects within the first substructure close to the clamped zone, the prescribed displacement is increased according to the structure length so that the bending moment is similar for the different cases. Thus, the relation between the prescribed vertical displacements of the model with $n+1$ substructures and the one with n is : $\bar{u}_z^{n+1} = (L^{n+1}/L^n)^2\, \bar{u}_z^n$ with $\bar{u}_z^2 = 0.025\ mm$. Note that this relation is based on an elastic beam theory without accounting for geometrical nonlinear effects.

The convergence rate of the global error η_{global} (see **Fig. 14**) obtained for the mixed approach with nonlinear localization is quite independent of the number of substructures apart from the case with two substructures. Let us recall that numerical scalability studies are generally performed in the case of linear problem so that unbalanced nonlinear effects do not interfere. Such a study in the case of nonlinear problem is not obvious.

For the structure with 16 subdomains (see **Fig. 15**), the speed-up is about 3.3 for 4 processors (one processor per substructure) and 6.4 for 8 processors, which is not optimal. Further improvements can be done specially in the data communication between processors. This work is currently under progress.

5.3. Stiffened panel under compressive load

5.3.1. Comparison of the three strategies

A stiffened panel under compressive load is studied here (**Fig. 16**). This test case is quite representative of aircraft fuselage parts. Due to the longitudinal and transverse stiffeners, it exhibits both local skin buckling and global buckling. The interaction between local and global buckling phenomena is particularly difficult to predict and cause many nonlinear solution strategies with or without continuation methods to fail. The reader can refer to [30, 31, 32] if interested in the simulation of this type of problem without domain decomposition strategies. This example allows to illustrate two aspects: a) the benefit of nonlinear localization strategies and b) the influence of domain decomposition.

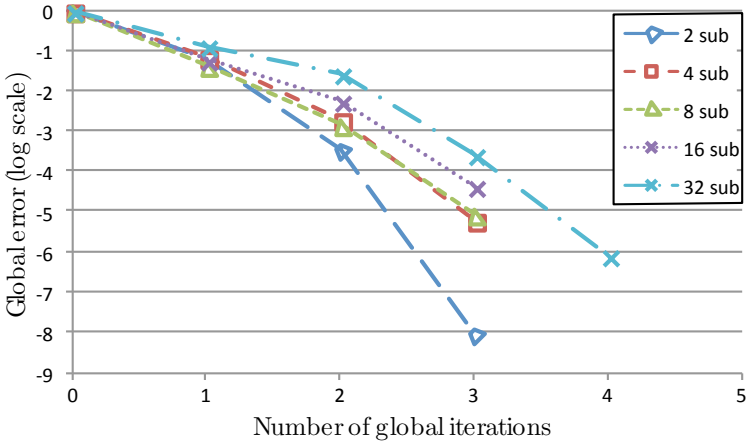
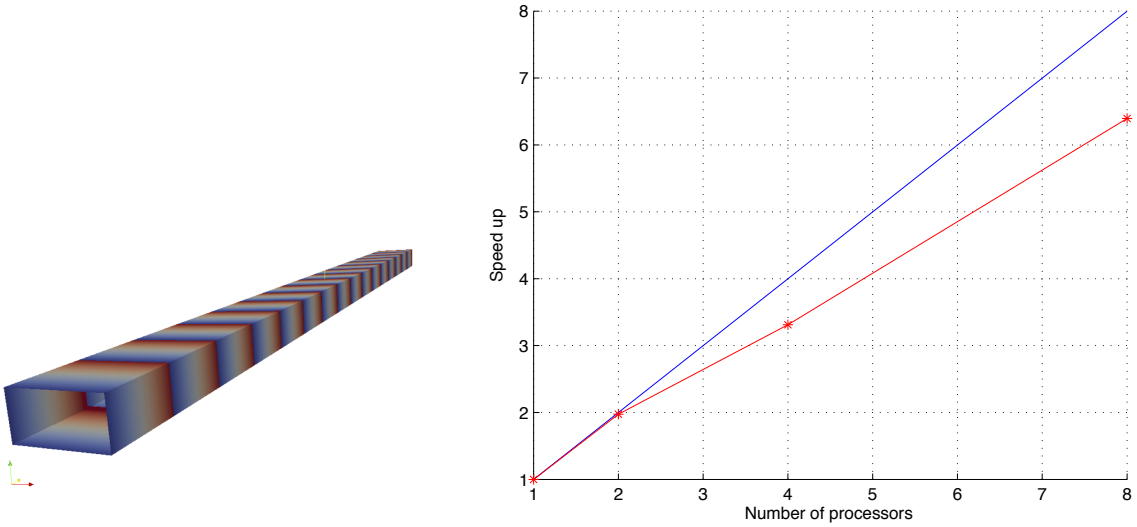


Figure 14: Global error evolution for an increasing number of substructures



(a) Decomposition into 16 subdomains (b) Speed-up curve

Figure 15: Speed-up curve for a decomposition into 16 subdomains

The structure is clamped on one side and submitted to a 18 *mm* prescribed longitudinal displacement along x-direction on the opposite edge. Displacement along z-direction at the extremities of the two transverse stiffeners is set to zero. Thicknesses of components are given in **Fig. 16**.

A first decomposition into 23 subdomains corresponding to the technological components (plates and stiffeners) is "natural" (**Fig. 17(a)**). Each substructure has 2 250 degrees of freedom on average leading to a model with about 50 000 unknowns.

Fig. 18 illustrates the compressive behavior of the structure. Skin buckling occurred for a prescribed displacement of 3 *mm*. At about 7 *mm*, longitudinal stiffeners buckle which weakens the structure stiffness.

Tab. 8 shows that the classical NKS approach fails to pass the skin buckling even by halving the displacement increment when divergence happens. Primal and mixed approaches with nonlinear localization succeed in following the equilibrium path in spite of a large number of displacements increments. Nonlinear localization strategies seems clearly to help convergence.

However, the primal and the mixed versions have the same behavior. They both lead to the same number of global and local iterations and require quite small increments. The explanation is that

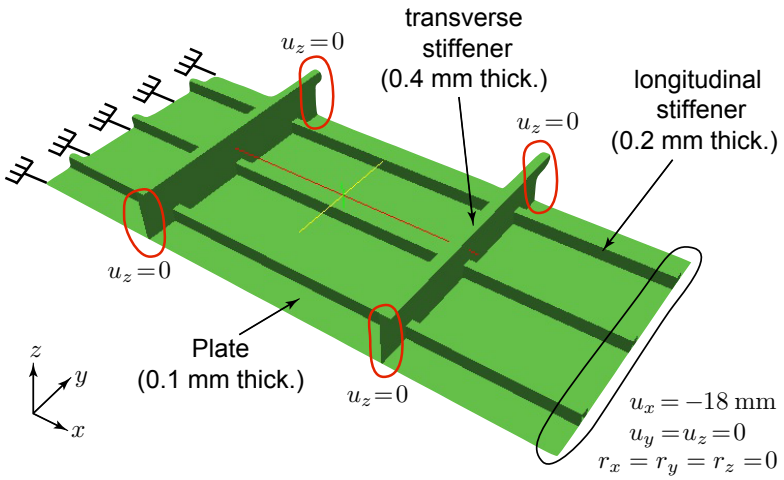
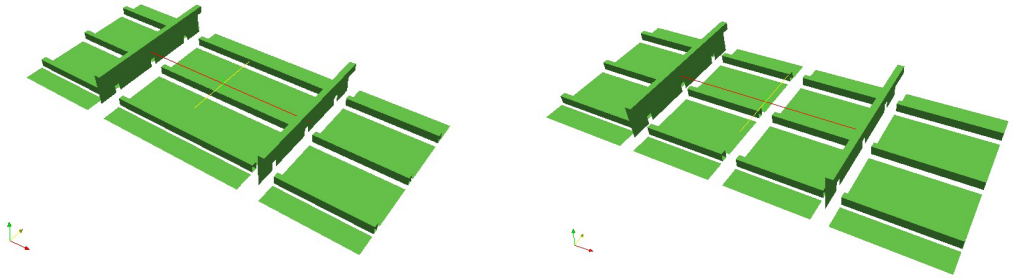


Figure 16: Geometry and boundary conditions



(a) 23 subdomains (b) 30 subdomains

Figure 17: Panel decompositions into 23 and 30 subdomains

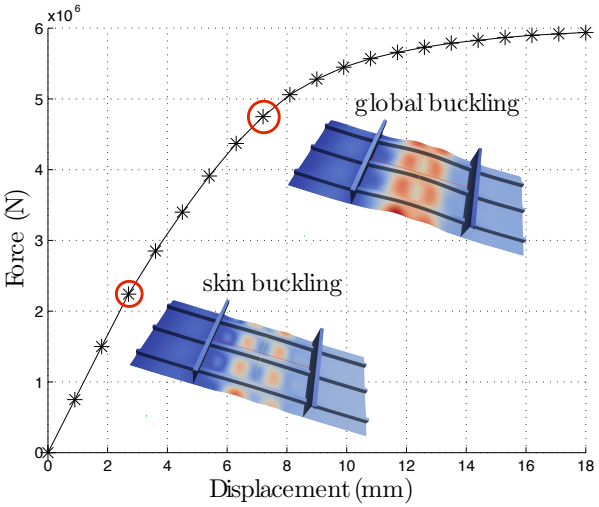


Figure 18: Compressive behavior of the panel

the chosen Robin operator $\mathbf{k}^s$ is too stiff in this application. Indeed, interfaces between subdomains coincide with the stiffener bases. Consequently, the strip band approximation for interface stiffness $\mathbf{k}^s$ (**Fig. 11**) is not suitable and too stiff. One could refer to [33] which proposes a two-scale approximation and to [34] which discusses the choice of this behavior for slender structures.

NKS Clas.		NKS-P		NKS-M	
Displ. inc. (mm)	No. global. it. (loc.)	Displ. inc. (mm)	No. global. it. (loc.)	Displ. inc. (mm)	No. global. it. (loc.)
-18	diver.	-18	diver.	-18	diver.
-9	diver.	-9	diver.	-9	diver.
-4,5	diver.	-4,5	diver.	-4,5	diver.
-2,25	3 (30)	-2,25	2 (162)	-2,25	2 (155)
-2,25	diver.	-2,25	diver.	-2,25	diver.
-1,125	3 (30)	-1,125	2 (184)	-1,125	2 (169)
-1,125	3 (30)	-1,125	2 (154)	-1,125	2 (141)
-1,125	diver.	-1,125	2 (138)	-1,125	2 (136)
-0,563	diver.	-1,125	2 (136)	-1,125	2 (136)
-0,281	diver.	-1,125	2 (140)	-1,125	2 (136)
-0,140	diver.	-1,125	2 (143)	-1,125	2 (138)
		-1,125	2 (137)	-1,125	2 (134)
		-1,125	2 (122)	-1,125	2 (128)
		-1,125	2 (132)	-1,125	2 (135)
		-1,125	2 (120)	-1,125	2 (122)
-4,5	9 (90)	**-18**	22 (1568)	**-18**	22 (1530)

Table 8: Total numbers of global and local iterations for the three approaches

5.3.2. Influence of the decomposition choice

Post-buckling analysis of complex structures exhibits bifurcations of equilibrium paths. In practice, the introduction of defects in the geometry or in the loading enables one to follow one given path. Mesh perturbation (Node shaking, dissymmetry) can also help. In this section, it is shown how the decomposition choice can lead to different equilibrium paths depending on the followed "numerical" path.

Decomposition into 30 subdomains is here considered (**Fig. 17(b)**). In this case, the central part of the panel is split so that skin buckling and global buckling spread over several subdomains. Simulation is performed with the mixed strategy with nonlinear localization (NKS-M). In this case, the interface contribution to search direction $\mathbf{k}^s$ at the interfaces located on the middle transverse symmetry plan has been multiplied by 1000 to favor the displacement and rotation continuities.

Fig. 19 represents the deformed shape when skin buckling and global buckling occur. The decomposition into 30 subdomains (left column) leads to a 4-lobes skin buckling whereas a 5-lobes skin buckling happens with the 23-subdomains decomposition (right column). Actually, for the new decomposition, iterate solutions oscillate between the two solutions and finally converge to the 4-lobes one. Equilibrium path are consequently different and the global buckling deformed shape are different as well as the global compressive behavior (**Fig. 20**).

The choice of the decomposition is consequently crucial regarding robustness. A "technological" decomposition that respects the components and the buckling mechanisms is preferable. In this case, taking advantage from this "physical" decomposition, bifurcation analysis to explore the different equilibrium paths could be investigated by introducing geometrical defects (buckling mode, node shaking) independently in each subdomain.

6. Conclusion and perspectives

In this paper, domain decomposition methods with nonlinear localization have been investigated in order to improve the robustness of parallel computation in buckling and post-buckling analyses. The problem of convergence is indeed of main importance at the industrial level. This work was an extension of the study proposed in [1], to structures that exhibit a snap-through or a snap-back behavior. Another contribution is the parallel implementation of the strategy to deal with large problems.

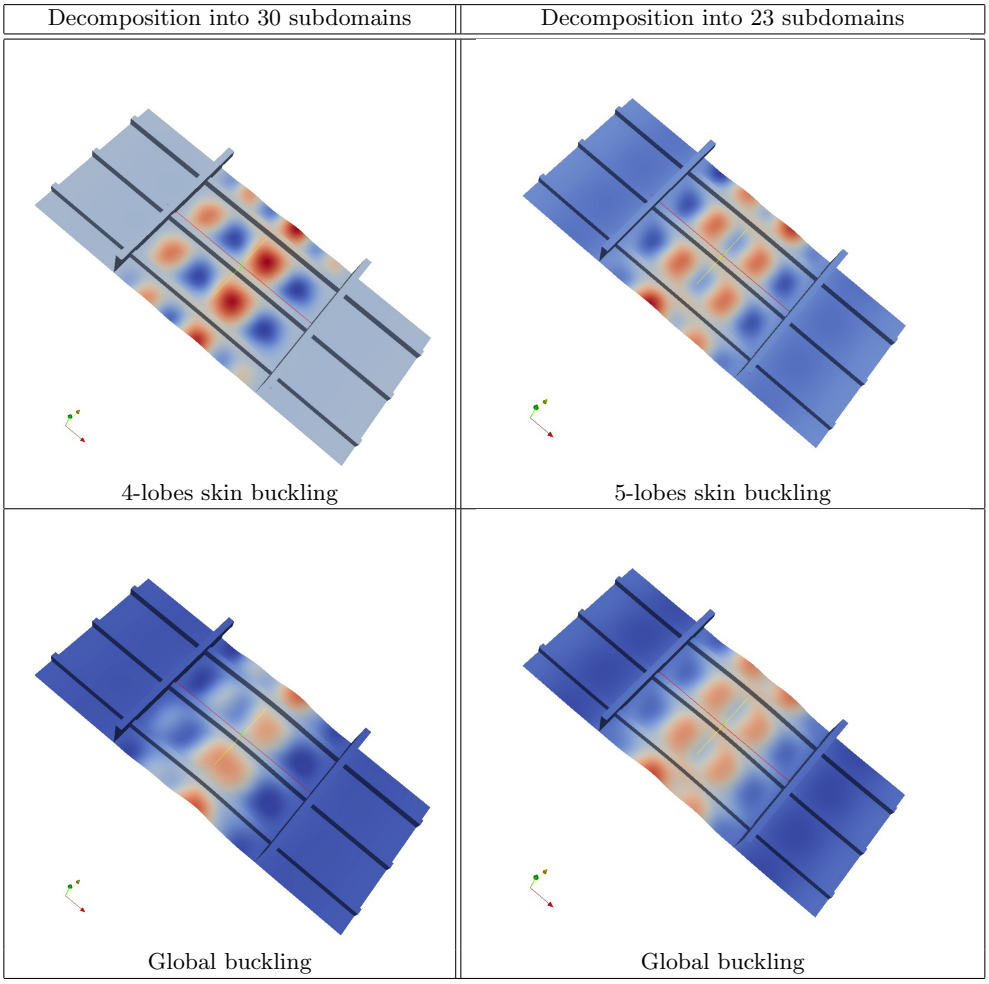


Figure 19: Skin and global buckling deformed shapes for the two decompositions

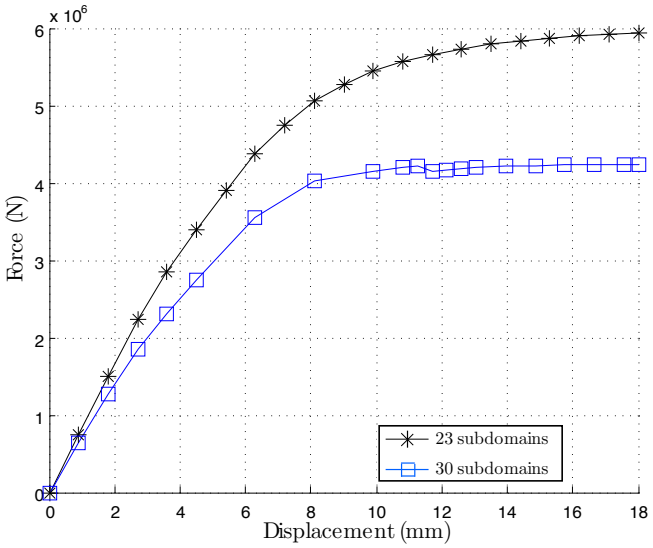


Figure 20: Compressive behaviors for the two decompositions of **Fig. 17**

A mixed domain decomposition method which favors nor interface displacement continuity, which is a too stiff condition, nor the interface equilibrium, but a combination (Robin-like condition)

has been compared with a primal version and the classical primal NKS approach. Two remarkable results have been illustrated through simple beam structures as well as on more complex 3D structures closed to industrial applications. The first is that nonlinear localization strategies can deal with larger load increments than the classical NKS approach, which reduces the number of global iterations and, consequently, the amount of exchanged data between processors. The second is that the mixed approach can use even larger increments and can pass limit points (snap-through or snap-back) more easily without resorting to continuation methods. Indeed, for the resulting condensed interface problem, this mixed scheme shares similar features with path following methods to control the algorithm convergence.

The parallel computation on structures closed to aeronautical applications, a boxed structure and a stiffened panel, enabled one to exhibit two practical issues. The first one concerns the choice of the Robin operator (interface stiffness) for the mixed approach. More precisely, it was shown that when substructure interfaces coincide with the stiffener bases, the strip band approximation for this operator was not suitable since too stiff. It is consequently important to put an effort on the choice of dedicated Robin operators for common industrial features so that the gain of the mixed approach is recovered. The second issue is about the influence of the domain decomposition. It was shown that a "technological" decomposition that respects the components and the buckling mechanisms is preferable.

Acknowledgements

This research is supported by EADS Corporate Research Center.

References

[1] P. Cresta, O. Allix, C. Rey, S. Guinard, Nonlinear localization strategies for domain decomposition methods: Application to post-buckling analyses, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 196 (2007) 1436–1446.
[2] Y.-H. De Roeck, P. Le Tallec, M. Vidrascu, A domain-decomposed solver for nonlinear elasticity, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 99 (1992) 187–207.
[3] C. Farhat, M. Lesoinne, K. Pierson, A scalable dual-primal domain decomposition method, Numer. Linear Algebra Appl. 7 (2000) 687–714.
[4] C. Farhat, K. Pierson, M. Lesoinne, The second generation feti methods and their application to the parallel solution of large-scale linear and geometrically non-linear structural analysis problems, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 184 (2-4) (2000) 333 – 374. doi:DOI: 10.1016/S0045-7825(99)00234-0.
[5] J. Pebrel, C. Rey, P. Gosselet, A nonlinear dual domain decomposition method: application to structural problems with damage, International Journal of Multiscale Computational Engineering 6 (3) (2008) 251–262.
[6] J. Hinojosa, O. Allix, P.-A. Guidault, P. Cresta, Newton-krylov-schur method with a nonlinear localization: Parallel implementation for post-buckling analysis of large structures, in: P. Iványi, B. H. V. Topping (Eds.), Proceedings of the Second International Conference on Parallel, Distributed, Grid and Cloud Computing for Engineering, Civil-Comp Press, Stirlingshire, UK, 2011, paper 6, doi:10.4203/ccp.95.6.
[7] A. Cardona, M. Geradin, A beam finite element non-linear theory with finite rotations, International Journal for Numerical Methods in Engineering 26 (1988) 2403–2438.
[8] B. Nour-Omid, C. C. Rankin, Finite rotation analysis and consistent linearization using projectors, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 93 (3) (1991) 353–384.
[9] C. A. Felippa, B. Haugen, A unified formulation of small-strain corotational finite elements: I. theory, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 194 (21-24) (2005) 2285–2335.
[10] P. Wriggers, Nonlinear finite element methods, Springer, 2008.
[11] P. Gosselet, C. Rey, Non-overlaping domain decomposition methods in structural mechanics, Archives of computational methods in engineering 13 (4) (2006) 515–572.
[12] P. Le Tallec, Y. H. D. Roeck, M. Vidrascu, Domain decomposition methods for large linearly elliptic three-dimensional problems, Journal of Computational and Applied Mathematics 34 (1) (1991) 93 – 117. doi:DOI: 10.1016/0377-0427(91)90150-I.
[13] J. Mandel, Balancing domain decomposition, Communication in Applied Numerical Methods 9 (1993) 233–241.
[14] J. Mandel, M. Brezina, Balancing domain decomposition for problems with large jumps in coefficients, Mathematics of Computation 65 (216) (1996) 1387–1401.

[15] C. Farhat, F.-X. Roux, A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm, International Journal for Numerical Methods in Engineering 32 (1991) 1205–1227.
[16] C. Farhat, F. X. Roux, An unconventional domain decomposition method for an efficient parallel solution of large-scale finite element systems, SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing 13 (1) (1992) 370–396.
[17] C. Farhat, A saddle-point principle domain decomposition method for the solution of solid mechanics problems, in: D. E. Keyes, T. F. Chan, G. Meurant, J. S. Scroggs, R. G. Voigt (Eds.), Domain decomposition methods for partial differential equations, SIAM, 1992, pp. 271–292.
[18] P. Ladevèze, Sur une famille d'algorithmes en mécanique des structures, Compte rendu de l'académie de Sciences 300 (2) (1985) 41–44.
[19] P. Ladevèze, A. Nouy, O. Loiseau, A multiscale computational approach for contact problems, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 191 (2002) 4869–4891.
[20] P. Ladevèze, A. Nouy, On a multiscale computational strategy with time and space homogeneization for structural mechanics, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 192 (2003) 3061–3087.
[21] P.-A. Guidault, O. Allix, L. Champaney, C. Cornuault, A multiscale extended finite element method for crack propagation, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 197 (5) (2008) 381–399.
[22] P. Kerfriden, O. Allix, P. Gosselet, A three-scale domain decomposition method for the 3d analysis of debonding in laminates, Computational Mechanics 44 (2009) 343–362.
[23] R. Glowinski, P. Le Tallec, Augmented lagrangian interpretation of the nonoverlapping schwartz alternating method, in: Third International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations, SIAM, Philadelphia, PA, 1990, pp. 224–231.
[24] L. Series, F. Feyel, F.-X. Roux, Une méthode de décomposition de domaine avec deux multiplicateurs de lagrange, application au calcul des structures, cas du contact, in: Actes du Sixième Colloque National en Calcul des Structures, Vol. III, 2003, pp. 373–380.
[25] M. Barboteu, P. Alart, M. Vidrascu, A domain decomposition strategy for nonclassical frictional multi-contact problems, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 190 (37-38) (2001) 4785–4803. doi:DOI: 10.1016/S0045-7825(00)00347-9.
[26] X.-C. Cai, D. Keyes, Nonlinearly preconditioned inexact newton algorithms, SIAM J. Sci. Comput 24 (2002) 183–200.
[27] P.-A. Guidault, O. Allix, L. Champaney, J.-P. Navarro, A two-scale approach with homogenization for the computation of cracked structures, Computers and Structures 85 (17-18) (2007) 1360–1371.
[28] R. Paz, M. Storti, An interface strip preconditioner for domain decomposition methods: application to hydrology, International Journal for Numerical Methods in Engineering 62 (13) (2005) 1873–1894.
[29] C. R. Dohrmann, A preconditioner for substructuring based on constrained energy minimization, SIAM Journal on Scientific Computing 25 (1) (2003) 246 – 258.
[30] B. G. Falzon, D. Hitchings, Capturing mode-switching in postbuckling composite panels using a modified explicit procedure, Composite Structures 60 (2003) 447–453.
[31] M. Cerini, B. G. Falzon, Use of arc-length method for capturing mode jumping in postbuckling aerostuctures, AIAA Journal 43 (3).
[32] B. G. Falzon, M. Cerini, An automated hybrid procedure for capturing mode-jumping in postbuckling composite structures, Composite Structures 73 (2006) 186–195.
[33] L. Gendre, O. Allix, P. Gosselet, A two-scale approximation of the schur complement and its use for non-intrusive coupling, International Journal for Numerical Methods in Engineering 87 (9) (2011) 889–905.
[34] K. Saavedra, O. Allix, P. Gosselet, On a multiscale strategy and its optimization for the simulation of combined delamination and buckling, International Journal for Numerical Methods in Engineering 91 (7) (2012) 772–798.

PREPRINT

4

M. Cremonesi, D. Néron, P.-A. Guidault and P. Ladevèze. A PGD-based homogenization technique for solving nonlinear multiscale problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 267:275–292, 2013.

A PGD-based homogenization technique for the resolution of nonlinear multiscale problems

M. Cremonesi[a], D. Néron[b], P.-A. Guidault[b], P. Ladevèze[b]

[a] *Department of Structural Engineering (Politecnico di Milano)*
Piazza Leonardo da Vinci, 32, 20133 Milano, Italy
[b] *LMT-Cachan (ENS Cachan/CNRS/UPMC/PRES UniverSud Paris)*
61 avenue du Président Wilson, 94235 Cachan CEDEX, France

Abstract

This paper deals with the offline resolution of nonlinear multiscale problems leading to a PGD-reduced model from which one can derive microinformation which is suitable for design. Here, we focus on an improvement to the Proper Generalized Decomposition (PGD) technique which is used for the calculation of the homogenized operator and which plays a central role in our multiscale computational strategy. This homogenized behavior is calculated offline using the LATIN multiscale strategy, and PGD leads to a drastic reduction in CPU cost. Indeed, the multiscale aspect of the LATIN method is based on splitting the unknowns between a macroscale and a microcomplement. This macroscale is used to capture the homogenized behavior of the structure and then to accelerate the convergence of the iterative algorithm. The novelty of this work lies in the reduction of the computation cost of building the homogenized operator. In order to do that, the problems defined within each subdomain are solved using a new PGD representation of the unknowns in which the separation of the unknowns is performed not only in time and in space, but also in terms of the interface macrodisplacements. The numerical example presented shows that the convergence rate of the approach is not affected by this new representation and that a significant reduction in computation cost can be achieved, particularly in the case of nonlinear behavior. The technique used herein is then particularly important to enhance the performances of the LATIN strategy but is not limited to this method. The more general path which is followed in this paper is to solve the microproblems arising in the homogenization for all the configurations that can be encountered in the calculation. An additional and novel benefit of this approach is that it includes the calculation of the homogenized tangent operator which gives, over the whole time interval and for any cell, the relation between the perturbation in terms of macroforces and the perturbation in terms of macrodisplacements. In linear viscoelasticity, this operator represents the homogenized behavior of the structure exactly.

Keywords: Homogenization, Proper Generalized Decomposition, Multiscale, Nonlinear, LATIN, Parallel computing

1. Introduction

In engineering design, the numerical simulation of very large multiscale models is becoming increasingly important because of the need to describe realistic scenarios and derive tools to facilitate the virtual design of new structures.

In the context of such huge calculations, multiscale approaches based on domain decomposition methods [1] or on model superposition [2, 3] are widely used. Another popular family of strategies is based on computational homogenization, *i.e.* the definition of a homogenized model of the behavior of a heterogenous material by replacing the microscopic description of a representative volume element by an equivalent volume filled with a homogenized material. A very common approach in the case of linear periodic media consists in applying the homogenization theory initiated by Sanchez-Palencia [4, 5]. Further developments and related computational approaches can be found in [6, 7, 8, 9, 10, 11]. Besides periodicity, the fundamental assumption is that the ratio of the characteristic length of the small scale to that of the large scale is small. Boundary zones, in which the material cannot be homogenized, require special treatment [6, 12, 13]. Other computational strategies using homogenization techniques based on the Hill-Mandel conditions [14] have also been proposed [15, 16]. The extension of homogenization theory to nonlinear problems, such as viscoplasticity and damage, leads to what is called the FE^2 method. Among the main references, one can mention [6, 17, 18, 7, 9, 10, 19].

A general issue in computational homogenization is that the construction of the homogenized behavior requires the resolution of microscopic problems for each macroscopic state. This can lead to high CPU costs, especially in the case of time-dependent nonlinear models. The objective of this paper is to propose a dedicated strategy for the reduction of the offline computation cost of the homogenized behavior of nonlinear models by using Reduced-Order Modeling (ROM) techniques. Basically, ROM consists in seeking an approximate solution of the problem in a reduced space (of significantly smaller dimension than the original) defined by what is known as a Reduced-Order Basis (ROB). Model reduction methods can be categorized according to the way the ROB is defined and constructed. In a first group of methods, the ROB is defined in an offline phase, which can be CPU-intensive, by solving a slightly simplified version of the original problem (e.g. using a coarser mesh or a smaller time interval) or the highly refined original problem itself, but with different sets of parameters. Once the ROB has been defined, the original problem can be solved online at a lower cost which is expected to recoup the cost of the offline phase [20, 21, 22, 23, 24, 25, 26]. The use of this type of techniques to address homogenization is discussed in [27]. A second group of methods does not require the generation of a ROB up front because the ROB is calculated online progressively during the resolution of the problem. Proper Generalized Decomposition (PGD), which is used in this paper, is an example of such a method. Basically, PGD consists in a separated-variable representation of the unknowns. This technique, introduced in [28] under the name "radial loading approximation", was originally limited to the separation of time and space variables (see [29]). Subsequently, a number of extensions were proposed, such as the separation of coordinate variables in [30], the separation of spatial and stochastic parameters in [31] or the separation of the time axis in a multidimensional time space [32]. Another possibility offered by the PGD framework is to solve multiparametric models by introducing a model's parameters (e.g. boundary conditions, initial conditions, material parameters or geometric parameters) as additional coordinates [33, 34]. The interested reader is referred to [35] for a review of these types of techniques. In these works, both the separated representation of the solution and the relevant ROB are built using iterative algorithms. At each iteration, the previously calculated ROB is used first, leading to a reduced-order model and a new approximation of the solution. If this approximation is not good enough, the ROB is enriched by defining a new functional product using a greedy power algorithm [29].

The resolution method used in this work is the multiscale computational strategy based on a PGD technique described in [36, 37]. This approach relies on a mixed domain decomposition method whose solver is the LATIN iterative algorithm [28], which provides a very convenient framework for the development of PGD-based algorithms. Some extensions of the LATIN method coupled with the XFEM approach can be found in [38, 39]. The generalization of domain decomposition to the decomposition between physics in coupled problems has been investigated in [40, 41]. The method has also shown promising performances to deal with parametrized prob-

lems [42]. The physical domain of the problem is divided into subdomains and interfaces. The multiscale strategy involves two types of problems: a "coarse" problem (called the macroproblem), defined on the interface level and built using a homogenization technique, whose purpose is to accelerate the convergence of the iterative algorithm, and a series of problems (called the microproblems) defined within each subdomain. At each iteration, in accordance with the LATIN method, the macroproblem and the microproblems are solved over the whole time-space domain.

The strategy can be summarized as follows. Each interface quantity is split between two scales (a macroscale and a microcomplement). The macroproblem, defined in terms of these macroscopic interface unknowns, leads to a reduced interface problem. At each iteration, this solution scheme requires the resolution of a large number of microproblems defined within each subdomain and over the time interval, which leads to high computation costs. Previous works have shown that the use of both temporal and spatial PGD reduces the computation time and the storage cost of these microproblems significantly [36, 43, 37, 44]. The macroproblem is defined through a homogenized operator which is assembled from a set of homogenized operators on the subdomain level which map the interface macrodisplacements to interface macroforces. In the nonlinear case, updating this homogenized operator throughout the iterative process can result in huge computation costs. Even in the academic example used in this paper to test the feasibility of the method, this process can take more than 30% of the total computation time, but in more complex problems with many subdomains, such as that presented in [37], this cost can account for most of the total computation time; so it is imperative to reduce it.

The novelty of this paper is that the reduction in the computation cost of this operator is achieved by extending the PGD technique already used on the microscale. In order to do that, the problems on the subdomain level which are used to build the homogenized operator are solved using a new PGD representation of the unknowns in which the separation of the unknowns is carried out not only in time and in space, but also in terms of the interface macroquantities. The technique which is used herein is then particularly important to enhance the performances of the LATIN strategy but is not limited to this method. The more general path which is followed in this paper is to solve the microproblems arising in the homogenization for all the configurations that can be encountered in the calculation. A similar procedure has been described in [45], where the use of PGD to achieve computational homogenization was investigated for thermal problems with materials whose microstructure can be described by a microscopic representative elementary volume (an assumption which is not required in our work). The issue of the multiscale analysis of structures using the PGD technique has also been addressed in [46] where the PGD method was used in a FE2 technique to solve the problems defined at the level of the RVE for any possible sets of geometry, material properties and boundary conditions. This work has been developed in the case of linear elasticity, which allowed to compute the homogenized behavior only once, in a preliminary phase that can be performed offline, whereas the aim of the present paper is to address nonlinear behaviors.

Once the algorithm has converged, the homogenized operator can be viewed as the homogenized tangent operator which, over the time interval and for each subdomain, links a small macrodisplacement perturbation to a small macroforce perturbation. In the case of viscoelastic materials, this operator characterizes the local macroscopic behavior of the structure.

The paper is organized as follows. 2 introduces the reference problem. The main features of the LATIN multiscale technique, including a brief description of the PGD method, are presented in 3. 4 focuses on the new algorithm and the determination of the PGD representation of the homogenized operator. Finally, 5 presents a numerical example which shows that the use of PGD in the macroproblem does not affect the convergence rate of the approach and leads to a reduction in the total computation time.

2. Description of the reference problem

Let us consider, under the assumption of small perturbations, the quasi-static and isothermal evolution of a structure defined in time-space domain $I \times \Omega$, where $I = [0, T]$ and $\Omega \in \mathbb{R}^D$ ($D = 2, 3$

being the spatial dimension). Boundary $\partial\Omega$ is assumed to be divided into two non-overlapping parts $\partial_1\Omega$ and $\partial_2\Omega$ such that $\partial_1\Omega \cup \partial_2\Omega = \partial\Omega$ and $\partial_1\Omega \cap \partial_2\Omega = \emptyset$. Surface forces $\underline{F}_d$ are applied over boundary $\partial_2\Omega$ and a displacement $\underline{u}_d$ is prescribed over $\partial_1\Omega$. The structure is also subjected to a body force $\underline{f}_d$ (see Figure 1).

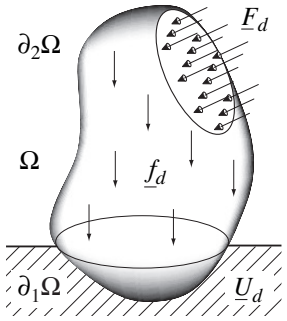


Figure 1: The reference problem

Let ε be the strain associated with displacement $\underline{u}$ and let $\boldsymbol{\sigma}$ be the Cauchy stress. The strain can be divided into an elastic strain ε_e and an inelastic strain ε_p so that $\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_p$. The elastic strain ε_e is related to the stress through the state law:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{K}\varepsilon_e \tag{1}$$

where $\mathbf{K}$ is Hooke's tensor. The inelastic strain is related to the stress through the evolution law:

$$\dot{\varepsilon}_p = \mathbf{B}(\boldsymbol{\sigma}) \tag{2}$$

where $\mathbf{B}$ is a differential operator which can be time-dependent and nonlinear. In the numerical examples of 5, two behaviors will be investigated: a linear viscoelastic behavior $\dot{\varepsilon}_p = \mathbf{K}^{-1}/\eta\,\boldsymbol{\sigma}$ and a nonlinear time-dependent behavior $\dot{\varepsilon}_p = \mathbf{K}^{-1}/(E\eta(t))\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{\sigma}$. All these quantities are defined at each time-space point $(t,\underline{x}) \in I \times \Omega$ and assigned initial values at time $t = 0$. Thus, the state of the structure is defined by the set $\mathbf{s} = (\dot{\varepsilon}_p, \boldsymbol{\sigma})$.

Such a representation of a material's behavior is typical of a viscoelastic constitutive law expressed using what is called a "normal formulation" [28]. Other types of constitutive laws, such as elastic-viscoplastic behavior, which requires the introduction of internal variables, can be found in [47, 48]. Dealing with such laws does not require any change in the strategy which will be developed in this paper.

3. The LATIN multiscale method

In this section, only the main characteristics of the LATIN multiscale method are reviewed. Additional details can be found in AppendixA. The interested reader can also refer to [37].

3.1. Decomposition of the domain

The domain Ω which is occupied by the structure is divided into subdomains and interfaces. Each subdomain Ω_E has its own variables ($\dot{\varepsilon}_{pE}$ and $\boldsymbol{\sigma}_E$) and is subjected, over its boundary $\partial\Omega_E$, to the action of its environment (the neighboring interfaces) defined by a displacement distribution $\underline{W}_E$ and a force distribution $\underline{F}_E$. Thus, the state of subdomain Ω_E is described by the set $\mathbf{s}_E = (\dot{\varepsilon}_{pE}, \underline{\dot{W}}_E, \boldsymbol{\sigma}_E, \underline{F}_E)$. In order to formulate the reference problem, we need to introduce some functional subspaces. Hereafter, $\mathscr{X}^\star$ will denote the vector space associated with a given affine space $\mathscr{X}$.

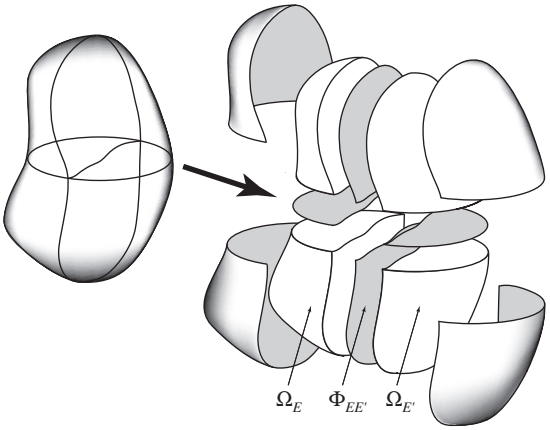


Figure 2: Decomposition of the domain

Over boundary $\partial\Omega_E$, displacement $\underline{u}_E$ must be equal to the interface displacement $\underline{W}_E$ and must satisfy the initial condition at $t = 0$:

$$\underline{u}_{E|\partial\Omega_E} = \underline{W}_E \quad \text{and} \quad \underline{u}_{E|t=0} = \underline{u}_{E0} \tag{3}$$

The corresponding space of the kinematically admissible displacement fields $(\underline{u}_E, \underline{W}_E)$ is denoted $\mathscr{U}_E$. On every element Ω_E the weak form of the equilibrium equation must be enforced: the stress field $\boldsymbol{\sigma}_E$ must balance interface forces $\underline{F}_E$ over $\partial\Omega_E$ and body forces $\underline{f}_d$ in Ω_E: $\forall\,(\underline{u}^*_E, \underline{W}^*_E) \in$

$\mathscr{U}_E^*$,

$$\forall \left(\underline{u}_E^*, \underline{W}_E^*\right) \in \mathscr{U}_E^*, \quad \int_{\Omega_E \times I} \boldsymbol{\sigma}_E : \varepsilon^*(\underline{\dot{u}}_E)\, d\Omega\, dt$$
$$= \int_{\Omega_E \times I} \underline{f}_d \cdot \underline{\dot{u}}_E^*\, d\Omega\, dt + \int_{\partial\Omega_E \times I} \underline{F}_E \cdot \underline{\dot{W}}_E^*\, dS\, dt \quad (4)$$

Condition (4) defines the space $\mathscr{S}_E$ of the statically admissible fields $(\boldsymbol{\sigma}_E, \underline{F}_E)$. Let $\mathscr{S}$ denote the extension of $\mathscr{S}_E$ to the entire problem: $\mathscr{S} = \bigotimes_{\Omega_E \subset \Omega} \mathscr{S}_E$.

The strain rate $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_E$ should derive directly from the symmetric part of the gradient of an admissible displacements $(\underline{u}_E, \underline{W}_E) \in \mathscr{U}_E$: $\forall \left(\boldsymbol{\sigma}_E^*, \underline{F}_E^*\right) \in \mathscr{S}_E^*$,

$$\int_{\Omega_E \times I} \boldsymbol{\sigma}_E^* : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_E\, d\Omega\, dt = \int_{\partial\Omega_E \times I} \underline{F}_E^* \cdot \underline{\dot{W}}_E\, dS\, dt \quad (5)$$

Condition (5) defines the space $\mathscr{E}_E$ of the kinematically admissible fields $(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_E, \underline{\dot{W}}_E)$.

Finally, one introduces the space $\mathbf{A}_{dE}$ of the $\mathbf{s}_E$ in which $(\boldsymbol{\sigma}_E, \underline{F}_E)$ is statically admissible, $\boldsymbol{\sigma}_E$ and $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{pE}$ satisfy the state law (2) and $(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_E, \underline{\dot{W}}_E)$ is kinematically admissible. These conditions read:

$$(\boldsymbol{\sigma}_E, \underline{F}_E) \in \mathscr{S}_E, \quad (\mathbf{K}^{-1}\dot{\boldsymbol{\sigma}}_E + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_E, \underline{\dot{W}}_E) \in \mathscr{E}_E \quad (6)$$

Concerning the interfaces, in the set $\mathscr{N}_E$ of the interfaces between subdomain Ω_E and other subdomains, let $\Phi_{EE'}$ denote the interface between Ω_E and subdomain $\Omega_{E'}$. This interface is characterized by the restrictions $(\underline{W}_{EE'}, \underline{W}_{E'E})$ of displacement field $(\underline{W}_E, \underline{W}_{E'})$ and $(\underline{F}_{EE'}, \underline{F}_{E'E})$ of force field $(\underline{F}_E, \underline{F}_{E'})$ to $\Phi_{EE'}$. A constitutive relation for every interface $\Phi_{EE'}$ must also be introduced in the form:

$$\mathbf{b}_{EE'}(\underline{\dot{W}}_{EE'}, \underline{\dot{W}}_{E'E}, \underline{F}_{EE'}, \underline{F}_{E'E}) = 0 \quad (7)$$

For instance, a perfect interface can be described by $\underline{\dot{W}}_{EE'} = \underline{\dot{W}}_{E'E}$ and $\underline{F}_{EE'} + \underline{F}_{E'E} = \underline{0}$. Other possible types of behavior (contact, contact with friction ...) can be found in [37].

3.2. Multiscale description of the interface unknowns

Two different descriptions of the interface unknowns (displacements and forces) are introduced: a macroscale description (denoted with superscript ^{M}) and a microcomplement (denoted with superscript ^{m}). Over an interface $\Phi_{EE'}$ between subdomains Ω_E and $\Omega_{E'}$, one has:

$$\underline{\dot{W}}_{EE'} = \underline{\dot{W}}^M_{EE'} + \underline{\dot{W}}^m_{EE'} \qquad \underline{F}_{EE'} = \underline{F}^M_{EE'} + \underline{F}^m_{EE'} \quad (8)$$

The choice of the spaces of the macrodisplacements and macroforces, denoted respectively $\mathscr{W}^M_{EE'}$ and $\mathscr{F}^M_{EE'}$, is arbitrary, but has a strong influence on the scalability of the method. A major point of the strategy, which grants it its multiscale character, is that the set of the macroforces is required to verify the transmission conditions at the interfaces *a priori* at each iteration. This assumption is called the "admissibility of the macroforces" and is detailed in AppendixA.1.

3.3. The LATIN solver

The governing equations of the problem are divided into two groups: the linear equations and the local equations. First, let $\mathbf{A}_d$ be the space of the solutions of the linear equations (defined globally in the spatial domain) whose elements $\mathbf{s} = (\mathbf{s}_E)_{\Omega_E \subset \Omega}$ verify:

- the admissibility condition (6) for every $\Omega_E \subset \Omega$: $\mathbf{s}_E \in \mathbf{A}_{dE}$
- the admissibility of the macroforces (see (A.4,A.5) for details)

Then, let $\boldsymbol{\Gamma}$ be the space of the solutions $\hat{\mathbf{s}} = (\mathbf{s}_E)_{\Omega_E \subset \Omega}$ of the local (possibly nonlinear) equations whose elements satisfy:

- the evolution law (2) for every $\Omega_E \subset \Omega$: $\forall (t, \underline{x}) \in I \times \Omega_E$, $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{pE} = \mathbf{B}(\boldsymbol{\sigma}_E)$
- the interface behavior (7) over every interface $\Phi_{EE'}$

The solution of the problem $\mathbf{s}_{ref} = \mathbf{A}_d \cap \boldsymbol{\Gamma}$ is built by using the LATIN method. This method is an iterative scheme between two stages called the "local stage" and the "linear stage", repeated alternatively until convergence. At Iteration $n+1$, in the local stage detailed in AppendixA.2, one seeks a solution $\hat{\mathbf{s}}_{n+1/2}$ of the local nonlinear equations in space $\boldsymbol{\Gamma}$; in the linear stage detailed in AppendixA.3, one seeks a solution $\mathbf{s}_{n+1}$ of the global linear equations in space $\mathbf{A}_d$. The introduction of search directions enables one to switch back and forth between space $\boldsymbol{\Gamma}$ and space $\mathbf{A}_d$. The convergence of the algorithm is checked

using the criterion described in AppendixA.4. This two-search-direction algorithm is quite similar to that described in [49] for non-overlapping domain decomposition methods in linear elasticity.

3.4. The linear stage: a series of microproblems and a macroproblem

The linear stage detailed in AppendixA.3 leads to a series of microproblems defined in each time-space subdomain $I \times \Omega_E$ along with a macroproblem defined over the entire time interval I and for the whole set of interfaces. These problems are defined in the following.

3.4.1. The series of microproblems

Introducing the weak form of search direction (A.8,A.10) into Equation (A.12), one gets the following microproblem for each subdomain Ω_E:

$$\begin{aligned}\text{Find } \left(\boldsymbol{\sigma}_E, \underline{F}_E\right) \in \mathscr{S}_E \text{ such that } \forall \left(\boldsymbol{\sigma}_E^*, \underline{F}_E^*\right) \in \mathscr{S}_E^* \\ \int_{\Omega_E \times I} \left(\mathbf{K}^{-1}\dot{\boldsymbol{\sigma}}_E + \mathbf{H}\boldsymbol{\sigma}_E\right) : \boldsymbol{\sigma}_E^* \, d\Omega \, dt \\ + \int_{\partial\Omega_E \times I} \mathbf{h}\underline{F}_E \cdot \underline{F}_E^* \, dS \, dt \\ = \int_{\Omega_E \times I} \left(\mathbf{H}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_E - \hat{\dot{\varepsilon}}_{pE}\right) : \boldsymbol{\sigma}_E^* \, d\Omega \, dt \\ + \int_{\partial\Omega_E \times I} \left(\mathbf{h}\hat{\underline{F}}_E + \hat{\underline{W}}_E + \dot{\underline{W}}_E^M\right) \cdot \underline{F}_E^* \, dS \, dt \end{aligned} \quad (9)$$

Problem (9) is linear and depends on the hat quantities ($\hat{\mathbf{s}}_E$), which are known from the previous local stage, and on Lagrange multiplier $\dot{\underline{W}}_E^M$, which is a new unknown of the problem. Therefore, the solution can be divided into two parts:

$$\mathbf{s}_E = \hat{\mathbf{s}}_E + \bar{\mathbf{s}}_E(\dot{\underline{W}}_E^M) \quad (10)$$

where $\hat{\mathbf{s}}_E$ is the solution of Problem (9) when $\dot{\underline{W}}_E^M$ is equal to zero, and $\bar{\mathbf{s}}_E(\dot{\underline{W}}_E^M)$ depends linearly on Lagrange multiplier $\dot{\underline{W}}_E^M$ through a linear operator. Relation (10) can also be written in terms of the macroforces:

$$\underline{F}_E^M = \hat{\underline{F}}_E^M + \bar{\underline{F}}_E^M \qquad \text{with} \qquad \bar{\underline{F}}_E^M = \mathbf{L}_E^F(\dot{\underline{W}}_E^M) \quad (11)$$

where $\hat{\underline{F}}_E^M$ represents the macroforces corresponding to $\hat{\mathbf{s}}_E$, and $\mathbf{L}_E^F$ is a homogenized operator defined over the space-time domain $\Omega_E \times I$. The details of the calculation of the homogenized operator in both the linear case and the nonlinear case will be given in 4.

3.4.2. The macroproblem

In order to obtain the value of Lagrange multiplier $\dot{\underline{W}}_E^M \in \mathscr{W}_{ad}^M$, homogenized operator (11) is introduced into the admissibility condition of the macroquantities (A.11), leading to a problem defined on the macroscale: $\forall \dot{\underline{W}}_E^{M*} \in \mathscr{W}_{ad}^{M*}$,

$$\begin{aligned}\sum_{\Omega_E \subset \Omega} \int_{\partial\Omega_E \times I} \dot{\underline{W}}_E^{M*} \cdot \left(\mathbf{L}_E^F(\dot{\underline{W}}_E^M) + \hat{\underline{F}}_E^M\right) dS \, dt \\ = \sum_{\Omega_E \subset \Omega} \int_{\partial\Omega_E \cap \partial_2\Omega} \dot{\underline{W}}_E^{M*} \cdot \underline{F}_d \, d\Gamma \, dt \end{aligned} \quad (12)$$

This macroproblem boils down to a linear homogenized problem in space and time defined over the whole set of interfaces and the entire time interval.

3.4.3. Resolution of the linear stage

The linear stage consists in solving a series of microproblems (9) defined in each time-space subdomain $I \times \Omega_E$ along with macroproblem (12) defined over the entire time interval I and for the whole set of interfaces, leading to Lagrange multiplier $\dot{\underline{W}}_E^M$. One can note that parallel resolution of these microproblems is possible, which reduces the computation cost.

3.5. Proper Generalized Decomposition

As described in AppendixA.3, many microproblems defined on the subdomain level must be solved during the linear stage. This stage can be very time-consuming and requires a significant amount of storage. This difficulty is addressed thanks to the introduction of the Proper Generalized Decomposition (PGD) technique. PGD was originally introduced into the LATIN method as part of the solver under the name "radial approximation" [28]. It has been shown in previous works that PGD leads to a significant reduction in computation time [36, 37, 44].

The main idea consists in representing a generic function of time and space $q = q(t, \underline{x})$ using separated variables:

$$\forall (t, \underline{x}) \in I \times \Omega_E \quad q(t, \underline{x}) \simeq \sum_{k=1}^{m} \lambda_k(t) \Lambda_k(\underline{x}) \quad (13)$$

where $\lambda_k(t)$ are functions of time alone and $\Lambda_k(\underline{x})$ are functions of space alone. The PGD representation is introduced into the LATIN scheme in order to describe the unknowns of microproblems (9). At the beginning of an iteration, if a

Reduced-Order Basis (ROB) is known, it is used to build a first reduced-order model to solve the new microproblem. If the quality of the solution is insufficient, the ROB is enriched by adding new PGD functions using a greedy power algorithm based on the minimization of a functional built from the verification of the search direction (A.8,A.10). Further details on the introduction of PGD into the microproblems and examples showing the ability of the method to reduce the computation cost of the microproblems can be found in [37, 44, 48].

The novelty of the present work lies in the reduction of the computation and storage cost of the homogenized operator by extending the use of the PGD technique to its construction.

4. Construction of the homogenized operator

4.1. The classical procedure for building the homogenized operator

As mentioned in 3.4.1, the homogenized operator $\mathbf{L}_E^F$ of subdomain Ω_E maps $\underline{\tilde{W}}_E^M$ to $\underline{F}_E^M$ through the relation:

$$\underline{F}_E^M = \underline{\hat{F}}_E^M + \underline{\bar{F}}_E^M \qquad \text{with} \qquad \underline{\bar{F}}_E^M = \mathbf{L}_E^F(\underline{\dot{W}}_E^M) \quad (14)$$

Classically in the multiscale LATIN method (see, e.g., [43, 37]), $\mathbf{L}_E^F$ is obtained by solving the following microproblem: $\forall \left(\boldsymbol{\sigma}_E^*, \underline{F}_E^*\right) \in \mathscr{S}_E^*$,

$$\int_{\Omega_E \times I} \left(\mathbf{K}^{-1}\dot{\boldsymbol{\sigma}}_E + \mathbf{H}\boldsymbol{\sigma}_E\right) : \boldsymbol{\sigma}_E^* \, d\Omega \, dt + \int_{\partial\Omega_E \times I} \mathbf{h}\underline{F}_E \cdot \underline{F}_E^* \, dS \, dt = \int_{\partial\Omega_E \times I} \underline{\dot{W}}_E^M \cdot \underline{F}_E^* \, dS \, dt \quad (15)$$

which corresponds to (9) in which the hat quantities ($\hat{\mathbf{s}}_E$) have been zeroed.

In this paper, as mentioned previously, the separation of the macroscale from the microscale is carried out only in space, but one should note that a coarse discretization of $I = [0, T]$ can also be used (see [50]). Then, Lagrange multiplier $\underline{\dot{W}}_E^M$ becomes:

$$\underline{\dot{W}}_E^M(t, \underline{x}) = \sum_{i=1}^{d} \dot{\alpha}_i(t) \underline{\beta}_i(\underline{x}) \quad (16)$$

where $\{\underline{\beta}_i(\underline{x})\}_{i=1,\dots,d}$ is the spatial macrobasis for each of the r interfaces of the subdomain (see [37] and Figure 3 for a macrobasis which extracts the linear part; other choices can be found in [51].) $\{\alpha_i(t)\}_{i=1,\dots,d}$ are the time functions, which are unknown when building the homogenized operator. Each of these time functions can be written using, for example, a finite element basis with shape functions $\{\varphi^j(t)\}_{i=1,\dots,N+1}$ (where N denotes the number of time steps in the discretization of I): $\alpha_i(t) = \sum_{j=1}^{N+1} \varphi^j(t) c_i^j$, leading to:

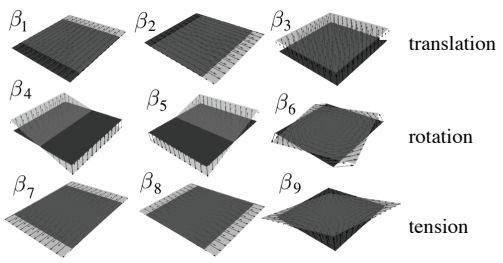


Figure 3: Macrobasis $\{\underline{\beta}_i(\underline{x})\}_{i=1,\dots,d}$ for the extraction of the linear part of a plane interface ($d = 9$)

$$\underline{\dot{W}}_E^M(t, \underline{x}) = \sum_{i=1}^{d} \dot{\alpha}_i(t) \underline{\beta}_i(\underline{x}) = \sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{N+1} c_i^j \left(\dot{\varphi}^j(t) \underline{\beta}_i(\underline{x})\right) \quad (17)$$

which can be rewritten as:

$$\underline{\dot{W}}_E^M(t, \underline{x}) = \sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{N+1} c_i^j \, \underline{w}_i^j(t, \underline{x}) \quad (18)$$

where the $d(N+1)$ vectors $\underline{w}_i^j(t, \underline{x}) = \dot{\varphi}^j(t) \underline{\beta}_i(\underline{x})$ represent the time-space macrobasis associated with each of the r interfaces of the problem, and coefficients c_i^j are unknown at this stage (they will be determined later by solving macroproblem (12) once the homogenized operator has been built.)

In our previous works, the homogenized operator was obtained by solving $rd(N+1)$ equations similar to (15) in which $\underline{\dot{W}}_E^M$ was taken to be equal to vectors $\underline{w}_i^j(t, \underline{x})$ for each of the r interfaces successively. Each of these resolutions was carried out using a PGD representation of stress tensor $\boldsymbol{\sigma}_E$ with separated time and space:

$$\boldsymbol{\sigma}_E = \boldsymbol{\sigma}_E(t, \underline{x}) \simeq \sum_{k=1}^{M} A_k(t) \mathbf{B}_k(\underline{x}) \quad (19)$$

The details of this technique can be found in [43, 37]. The corresponding computation effort is discussed in 4.3.

4.2. A new algorithm for building the homogenized operator

The novelty of the present work is that the computation cost is reduced by avoiding the treatment of $rd(N+1)$ equations (15) thanks to an extension of the PGD representation. In order to do that, (18) is rewritten as:

$$\begin{aligned}\underline{\dot{W}}_E^M(t,\underline{x}) &= \sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{N+1} c_i^j\, \underline{w}_i^j(t,\underline{x}) \\ &= \sum_{i=1}^{d} \left[\underline{w}_i^1(t,\underline{x}) \dots \underline{w}_i^{N+1}(t,\underline{x})\right] \underline{c}_i\end{aligned} \tag{20}$$

where $\underline{c}_i$ are the vectors which collect the quantities of interest over time. In a more compact form and using obvious notations, this equation reads:

$$\underline{\dot{W}}_E^M(t,\underline{x}) = \dot{\mathbf{w}}_E^M(t,\underline{x})\,\underline{c}_E \tag{21}$$

where $\underline{c}_E = [\underline{c}_1 \dots \underline{c}_d]^T$ concatenates all the values which are unknown in the definition of $\underline{\dot{W}}_E^M(t,\underline{x})$, and $\dot{\mathbf{w}}_E^M(t,\underline{x})$ is fixed through the choice of the macrobasis. Expression (21) of the Lagrange multiplier is introduced into Microproblem (15), leading to: $\forall \left(\boldsymbol{\sigma}_E^*, \underline{F}_E^*\right) \in \mathscr{S}_E^*$,

$$\begin{aligned}&\int_{\Omega_E\times I} \left(\mathbf{K}^{-1}\dot{\boldsymbol{\sigma}}_E + \mathbf{H}\boldsymbol{\sigma}_E\right) : \boldsymbol{\sigma}_E^*\, d\Omega\, dt \\ &+ \int_{\partial\Omega_E\times I} \mathbf{h}\underline{F}_E\cdot\underline{F}_E^*\, dS\, dt = \int_{\partial\Omega_E\times I} \dot{\mathbf{w}}_E^M\, \underline{c}_E\cdot\underline{F}_E^*\, dS\, dt\end{aligned} \tag{22}$$

whose solution is now sought using a PGD representation of stress tensor $\boldsymbol{\sigma}_E$ in which not only time and space, but also the variable which defines the Lagrange multiplier are separated:

$$\boldsymbol{\sigma}_E = \boldsymbol{\sigma}_E(t,\underline{x},\underline{c}_E) \simeq \sum_{k=1}^{M} A_k(t)\mathbf{B}_k(\underline{x})C_k(\underline{c}_E) \tag{23}$$

The objective of this choice is to build the homogenized operator at each time t, at each point $\underline{x}$ and for each value of the Lagrange multiplier defined by $\underline{c}_E$. The triplets $\{A_k, \mathbf{B}_k, C_k\}$ of PGD representation (23) are obtained by means of Power Algorithm 1, which is based on the rewriting of Problem (22) as the minimization of the error:

$$e^2 = \|\mathbf{K}^{-1}\dot{\boldsymbol{\sigma}}_E + \mathbf{H}\boldsymbol{\sigma}_E\|_{\mathbf{M}}^2 + \|\mathbf{h}\underline{F}_E - \dot{\mathbf{w}}_E^M\,\underline{c}_E\|_{\mathbf{m}}^2 \tag{24}$$

with the introduction of the norms:

$$\|\square\|_{\mathbf{M}}^2 = \int_{\Omega_E\times I\times\mathscr{C}} \square : \mathbf{M}\square\, d\Omega\, dt\, d\mathscr{C} \tag{25}$$

and

$$\|\square\|_{\mathbf{m}}^2 = \int_{\partial\Omega_E\times I\times\mathscr{C}} \square : \mathbf{m}\square\, dS\, dt\, d\mathscr{C} \tag{26}$$

$\mathbf{M}$ and $\mathbf{m}$ are symmetric, positive definite operators (which, in the following numerical example, will be chosen as $\mathbf{M} = \mathbf{H}^{-1}$ and $\mathbf{m} = \mathbf{h}^{-1}$) and $\mathscr{C}$ is the space of parameters $\underline{c}_E$. The calculation of norms (**??**) requires the evaluation of integrals over the space $\mathscr{C}$ of definition of parameters $\underline{c}_E$. The bounds of this space are *a priori* unknown and, at this stage in our development, are chosen to be large enough for $\boldsymbol{\sigma}_E$ to be known for a range of $\underline{c}_E$ which is sufficient to satisfy Macroproblem (12). The optimization of this choice will be the subject of future developments, but it has little impact on the global computation cost.

Algorithm 1 to find a new triplet $\{A_M, \mathbf{B}_M, C_M\}$ given $\{A_k, \mathbf{B}_k, C_k\}_{k=1,\dots,M-1}$

initialization: $A_M^0(t) = A_{M-1}(t)$ and $C_M^0(\underline{c}_E) = C_{M-1}(\underline{c}_E)$
for $\ell = 1, \dots, \ell_{max}$ **do**
  spatial problem: given functions $A_M^{\ell-1}$ and $C_M^{\ell-1}$, calculate $\mathbf{B}_M^\ell$ which minimizes e^2
  temporal problem: given functions $\mathbf{B}_M^\ell$ and $C_M^{\ell-1}$, calculate A_M^ℓ which minimizes e^2
  problem of the macroquantities: given functions A_M^ℓ and $\mathbf{B}_M^\ell$, calculate C_M^ℓ which minimizes e^2
end for

Finally, the procedure enables one to build the homogenized operator $\mathbf{L}_E^F$ which maps $\underline{\dot{W}}_E^M$ onto macroforces $\underline{F}_E^M = \hat{\underline{F}}_E^M + \bar{\underline{F}}_E^M$, where $\bar{\underline{F}}_E^M = \mathbf{L}_E^F(\underline{\dot{W}}_E^M)$. The corresponding operation can be written formally as:

$$\mathbf{L}_E^F : \left| \begin{array}{ccc} \mathscr{W}_E^M & \longrightarrow & \mathscr{F}_E^M \\ \underline{\dot{W}}_E^M(t,\underline{x}) = \dot{\mathbf{w}}_E^M(t,\underline{x})\,\underline{c}_E & \longmapsto & \bar{\underline{F}}_E^M \end{array} \right. \tag{27}$$

with

$$\bar{\underline{F}}_E^M = \sum_{k=1}^{M} a_k(t)\underline{b}_k(\underline{x})c_k(\underline{c}_E) \tag{28}$$

where triplets $(a_k, \underline{b}_k, c_k)$ are deduced easily from triplets $(A_k, \mathbf{B}_k, C_k)$ by using the fact that $\bar{\underline{F}}_E^M$ is the macropart of $\boldsymbol{\sigma}_E\underline{n}_E$ at the boundary of Ω_E (with $\underline{n}_E$ being the outer unit normal to boundary $\partial\Omega_E$). Let us note that, due to the linearity of (22) with respect to $\underline{c}_E$, functions c_k are also linear in $\underline{c}_E$.

4.3. Discussion of the computation and storage costs

At enrichment step M of Algorithm 1, the construction of a new triplet $\{A_M, \mathbf{B}_M, C_M\}$ given $\{A_k, \mathbf{B}_k, C_k\}_{k=1,\dots,M-1}$ requires the minimization of a problem which couples time, space and macroquantities. This problem is solved using a fixed-point algorithm with ℓ_{max} iterations. Thus, step M involves ℓ_{max} resolutions of D-dimensional spatial problems ($D = 2,3$) for function $\mathbf{B}_M$, ℓ_{max} resolutions of 1-dimensional ODEs for function A_M, and ℓ_{max} resolutions of 1-dimensional problems for function C_M. The complexity of this procedure lies almost entirely in the ℓ_{max} D-dimensional steady-state problems (compared to which the cost of the 1-dimensional problems is negligible). In our numerical tests, the initialization of $A_0(t)$ and $C_0(\underline{c}_E)$ did not affect the convergence of the algorithm significantly and, in practice, only a few iterations of the algorithm were necessary to converge. Therefore, the calculation of a new triplet was linked to the resolution of $rd\ell_{max}$ spatial microproblems and the global computation cost of the homogenized operator was in the order of that of $Mrd\ell_{max}$ spatial microproblems.

In the examples presented in the next section, following [37], the number of iterations was arbitrarily set to a small value ($\ell_{max} = 2$). Even if the convergence of the fixed-point algorithm is not reached, the quality of the decomposition is enhanced by the next triplets. It is known that the convergence can be slower than in the case of two variables decompositions but, in the numerical examples investigated in the paper, this issue does affect the global convergence rate of the strategy. Further investigations should be necessary for other material behaviors. The number M of triplets required to describe the homogenized operator was small. In the case of linear behavior, such as in viscoelasticity, the tangent search direction $\mathbf{H} = \partial\mathbf{B}/\partial\sigma|_{\hat{\sigma}}$ is constant. Therefore, fixed search directions $\mathbf{H}$ and $\mathbf{h}$ were used throughout the iterations and the homogenized operator needed to be calculated only once at the beginning of the iterative process. Usually, in that case, $M = 2$ triplets are enough. Conversely, in the case of nonlinear behavior, parameters $\mathbf{H}$ and $\mathbf{h}$ are recalculated throughout the iterations and the homogenized operator must be updated [48]. In practice, the search directions are recalculated only for the first iterations, then remain fixed when their variations become negligible. However, we did not use this technique in our work in order to simplify the discussion about the computation cost in the general case. Therefore, M was set to be equal to the number of iterations of the LATIN method which were necessary to reach a given error. This number can also be decreased significantly if one reuses the already known triplets as a reduced-order basis when performing a given iteration: then, the values of $\mathbf{B}_k$ and C_k are fixed and the recalculation of time function A_k alone suffices to find a better representation of the operator without solving any D-dimensional problem. Then, one introduces a criterion in order to add a new triplet if, and only if, the given reduced-order basis turns out to be insufficient.

The global cost of the $Mrd\ell_{max}$ spatial problems required to build the homogenized operator must be compared to the cost of the classical procedure described in 4.1. Let us recall that this procedure consists in solving $rd(N+1)$ equations (15) using a time-space PGD-separated form of the unknowns. Such a resolution is very close to that described in Algorithm 1 and the same computation cost evaluation applies. This cost is in the order of that of $M\ell_{max}$ spatial problems for each of the $rd(N+1)$ equations, which corresponds to the global cost of $Mrd(N+1)\ell_{max}$ D-dimensional spatial problems. Therefore, the advantage of our procedure is obvious because its cost is independent of the number of time steps. In terms of storage cost, our procedure requires the storage of only the M triplets (whose cost is associated mainly with the spatial functions) compared to the storage of $N+1$ spatial operators (one for each of the times considered) with the classical procedure.

4.4. The macroproblem

The macroproblem is solved at each linear stage to obtain the Lagrange multiplier. The introduction of the PGD representation of the homogenized operator leads to the problem:

$\forall \dot{\underline{W}}_E^{M*} \in \mathscr{W}_{ad}^{M*}$,

$$\forall \dot{\underline{W}}_E^{M*} \in \mathscr{W}_{ad}^{M*}, \quad \sum_{\Omega_E \subset \Omega} \int_{\partial\Omega_E \times I} \dot{\underline{W}}_E^{M*} \cdot \left(\hat{\underline{F}}_E^M + \sum_{k=1}^{M} a_k(t) \underline{b}_k(\underline{x}) c_k(\underline{c}_E) \right) dS\, dt = \sum_{\Omega_E \subset \Omega} \int_{\partial\Omega_E \cap \partial_2\Omega} \dot{\underline{W}}_E^{M*} \cdot \underline{F}_d \, d\Gamma\, dt \quad (29)$$

where the only unknown is $\underline{c}_E$, the vector of the parameters. Due to the linearity of functions c_k in $\underline{c}_E$, the resolution of (29) is straightforward and very inexpensive. Let us recall that once coefficients $\underline{c}_E$ have been calculated, Lagrange multiplier $\dot{\underline{W}}_E^M$ is completely known.

4.5. Step-by step summary

The complete solution process can be summarized as follows:

1. **Initialization of the homogenized operator:** calculate operator $\mathbf{L}_E^F = \mathbf{L}_E^F(t, \underline{x}, \underline{c}_E)$ using PGD-based Algorithm 1;
2. **Local stage:** defined in AppendixA.2;
3. **Linear stage:**
   (a) **Microproblem 1**: resolution of Equation (9) with $\dot{\underline{W}}_E^M = \underline{0}$ using PGD (see [37] for details);
   (b) **Microproblem 2**: resolution of Equation (22) for each value of $\dot{\underline{W}}_E^M$, if necessary by updating homogenized operator $\mathbf{L}_E^F = \mathbf{L}_E^F(t, \underline{x}, \underline{c}_E)$ (if $\mathbf{H}$ and $\mathbf{h}$ have changed) using PGD-based Algorithm 1;
   (c) **Macroproblem**: resolution of Equation (29) to obtain coefficients $\underline{c}_E$, leading to Lagrange multiplier $\dot{\underline{W}}_E^M$;
   (d) **Completion of the whole solution** at this stage by summing up the solutions of (a) and (b), the latter being evaluated with the known values of coefficients $\underline{c}_E$.
4. **Check convergence** using error indicator (A.13);
5. **Repeat** steps 2, 3 and 4 until convergence.

For linear problems, the best possible approximation of the homogenized operator is calculated in the first step of this solution scheme. Usually, two triplets are sufficient to guarantee the same convergence rate as the standard technique. Conversely, if the problem is nonlinear, only one triplet is calculated in the first step, then other triplets are added automatically in Step 3(b).

4.6. Interpretation of the homogenized operator

If $\mathbf{H}$ is the tangent search direction (*i.e.* $\mathbf{H} = \partial\mathbf{B}/\partial\sigma|_{\hat{\sigma}}$), a physical interpretation can be given to the homogenized operator. Let us recall that homogenized operator $\mathbf{L}_E^F$ maps Lagrange multiplier $\dot{\underline{W}}_E^M$ to macroforce $\dot{\underline{F}}_E^M = \mathbf{L}_E^F(\dot{\underline{W}}_E^M)$ in subdomain Ω_E, so that:

$$\underline{F}_E^M = \hat{\underline{F}}_E^M + \mathbf{L}_E^F(\dot{\underline{W}}_E^M) \quad (30)$$

This relation can be rewritten in terms of macroforce $\underline{F}_E^M$ and macrodisplacement $\underline{W}_E^M$ at the interface, leading to a linear relation between the small perturbations of these quantities in the form:

$$\Delta\underline{F}_E^M = \mathbf{L}_E^W \Delta\dot{\underline{W}}_E^M \quad (31)$$

Relation (31) means that once the algorithm has converged $\mathbf{L}_E^W$ can be viewed as the local macrobehavior near the calculated solution, defined over $I = [0, T]$ and in each subdomain Ω_E. This behavior establishes a relation between a small perturbation in terms of macrodisplacements and a small perturbation in terms of macroforces.

In the particular case of a linear problems, such as in viscoelasticity, the tangent search direction is independent of the solution being sought. Therefore, it is calculated only once at the beginning of the algorithm and then remains constant throughout the iterations. Thus, the previous interpretation is valid throughout the iterations.

If search direction $\mathbf{H}$ is not tangent to subspace $\mathbf{\Gamma}$, the algorithm bears some similarities to a quasi-Newton scheme and no obvious physical interpretation can be given to the homogenized operator.

5. Numerical examples

Now, the strategy presented in the previous sections will be validated by introducing some numerical tests in order to show that the PGD representation of the homogenized operator guarantees the same order of convergence as

the standard technique while leading to a significant reduction in the computation time when the operator needs to be updated.

Under the assumption of plane strain, we considered the evolution over $I = [0, T]$ ($T = 2$ s) of a two-dimensional L-shaped structure made of 12 heterogenous cells (see Figure 4). Each cell was a 0.5 m × 0.5 m square with an inclusion of radius 0.15 m. The matrix and the inclusion were made of two different materials denoted respectively Material 1 (shown in light grey) and Material 2 (shown in dark grey). The structure was clamped at the bottom and subjected along its right side to a prescribed pressure $\underline{F}_d(t) = F_0 \sin 2\pi t/T \ \underline{x}$ with $F_0 = 100$ MPa. The domain was divided into 12 subdomains, each corresponding to a cell. In two dimensions, the spatial macrobasis consists of $d = 4$ vectors. The number of interfaces to be taken into account for the construction of the homogenized operator was $r = 16$. Each subdomain was discretized into linear triangular finite elements, leading to a total of 3,675 DOFs (see Figure 5(a)). The time interval I was discretized into N time steps. A Euler implicit integration scheme was used. We studied the influence of N on the cost of the resolution assuming that the convergence of the algorithm is achieved when the error indicator η defined in AppendixA.4 becomes less than 10^{-5}. Since our example is relatively simple, it was possible to build a reference solution using a direct incremental approach and to plot the actual error η_{ref} defined in AppendixA.4.

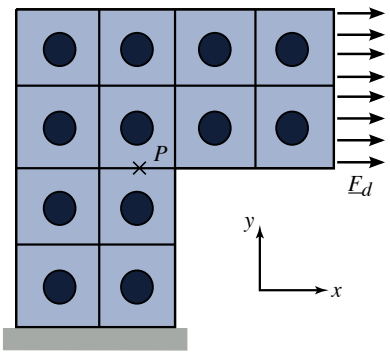


Figure 4: The L-shaped heterogenous structure

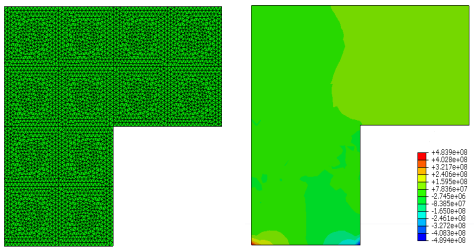
5.1. *Linear viscoelastic behavior*

First, we assumed for Material 1 and Material 2 linear viscoelastic behavior, such that:

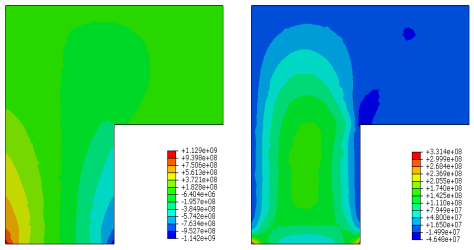
$$\dot{\varepsilon}_p = \frac{\mathbf{K}_i^{-1}}{\eta_i}\boldsymbol{\sigma} \tag{32}$$

where $\mathbf{K}_i$ denotes the Hooke's tensor of Material i. The Poisson's ratio was the same for both materials ($\nu_1 = \nu_2 = 0.3$) but the Young's moduli and the viscosity parameters were different: $E_1 = 50$ GPa, $E_2 = 200$ GPa and $\eta_1 = 10$ s, $\eta_2 = 1,000$ s.

Figures 5(b), 5(c) and 5(d) show the stress components at time $t = 3T/4$. In order to validate these results, a first comparison with a classical direct incremental scheme is given by Figure 6, which shows the horizontal displacement of interface point P (see Figure 4). One can observe that the solution obtained with the direct incremental method (dotted line) and the solution obtained using our new strategy (continuous line) match perfectly.



(a) Finite element mesh (b) Stress component σ_{xx}



(c) Stress component σ_{yy} (d) Stress component σ_{xy}

Figure 5: The finite element mesh and the components of the stress tensor at $t = 3T/4$

Figures 7 and 8 enable one to study the convergence of the procedure. The continuous line represents the convergence curve of our approach (LATIN method + PGD representation of the homogenized operator). The convergence of the standard approach (LATIN method + standard

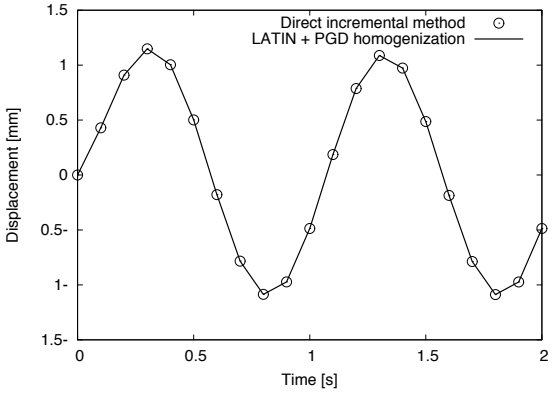


Figure 6: The displacement of point P as a function of time

homogenized operator [37]) is represented by circles. The two convergence curves match perfectly, which shows that the introduction of PGD into the representation of the homogenized operator did not affect the convergence of the approach. If not enough triplets had been used in the PGD description, a bad representation of the homogenized operator would have been obtained, leading to a poor convergence rate.

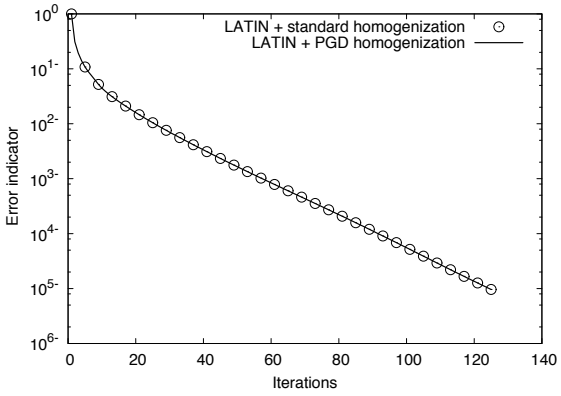


Figure 7: Comparison of the convergence curves of error indicator η without and with the PGD representation of the homogenized operator

Now, in order to compare the two approaches in terms of their performance, we will consider the computation cost of generating the homogenized operator. Let us observe that, due to the linearity of the problem in this example, the search direction operators $(\mathbf{H}, \mathbf{h})$ are independent of time and remain constant throughout the iterations, which enabled the homogenized operator to be calculated only once at the beginning of the analysis. The CPU costs were compared in terms of the number of linear spatial microproblems

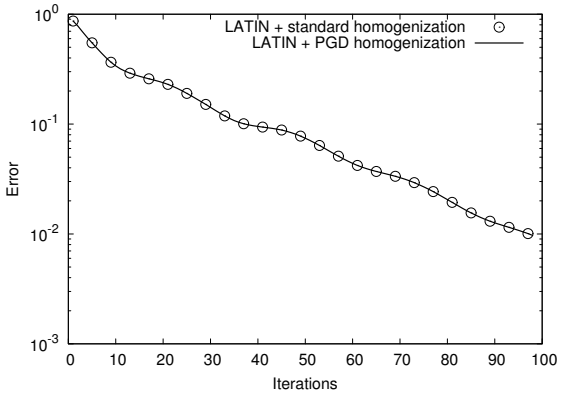


Figure 8: Comparison of the convergence curves of error η_{ref}, without and with the PGD representation of the homogenized operator

(defined on the subdomain scale) which had to be solved to build the homogenized operator. In our example, the 12 subdomains were identical and had the same number of DOFs. Thus, all the spatial microproblems had the same computation cost, denoted $t.u.$ (time unit).

The following study focuses on the influence of the number N of time steps in the discretization. For the sake of generality, we assumed the temporal discretization to be non-uniform, thus requiring the resolution of a linear system at each time step. (In the particular case of a uniform discretization, the linear system would have been factorized only once at the beginning.)

The results are summarized in Table 1, which shows that the number of linear systems to be solved is independent of the number of time steps when using our technique, but increases proportionately to $N+1$ when using the standard method. The gain achieved with the new method is significant, especially when the number N of time steps increases.

Time steps N	LATIN + stand. homogen. (t.u.)	LATIN + PGD homogen. (t.u.)	Gain
10	1,408	256	5.5
20	2,688	256	10.5
30	3,968	256	15.5
40	5,248	256	20.5

Table 1: Comparison of the computation costs in terms of the number of spatial microproblems (t.u.) solved to build the homogenized operator

5.2. Nonlinear time-dependent behavior

Now, in order to study the behavior of the new procedure in the case of a nonlinear problem, let us consider that the behavior of Material 1 and Material 2 is described as:

$$\dot{\varepsilon}_p = \frac{\mathbf{K}_i^{-1}}{E_i \eta_i(t)} \mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{\sigma} \tag{33}$$

where $\mathbf{K}_i$ and E_i are the same as before, but the viscosity parameters are time-dependent: $\eta_1 = \eta_2 = \eta_0 \sin t/2\pi$ with $\eta_0 = 100$ s.

The search direction operators $(\mathbf{H}, \mathbf{h})$ could have been considered to be independent of time and constant throughout the iterations (using, for example, time-averaged pseudo-tangent operators), leading to a unique homogenized operator, but this would have potentially resulted in a poor convergence rate due to the nonlinearity of the problem. In order to guarantee rapid convergence, the search direction operators needed to be updated to recalculate the tangent search direction. As mentioned earlier, practical criteria could be set up in order to avoid updating the operators when their variations are small, but this feature was not introduced in this study so the discussion on the computation cost would be simpler. Therefore, we assumed that the time-dependent homogenized operator had to be recalculated at each iteration.

Two variants of the strategy were considered: the first variant, hereafter labeled '(constant)', consisted in calculating the homogenized operator only once at the beginning; the second variant, hereafter labeled '(tangent)', consisted in updating the operator at each iteration.

The results are shown in Figures 9 and 10. Figure 9 shows the comparison of the convergence rates of these two variants without and with the new PGD-based construction of the homogenized operator. As expected, the use of an updated tangent search direction improved the convergence rate of the method and, like in the linear behavior case, the PGD representation did not affect the convergence of the strategy. However, the more interesting point concerns the performance of the approach in terms of the computation cost of the homogenized operator. Using the same notations as in Table 1, Tables 2 and 3 demonstrate the gain obtained using our strategy with either a constant or a tangent (updated at each iteration) search direction.

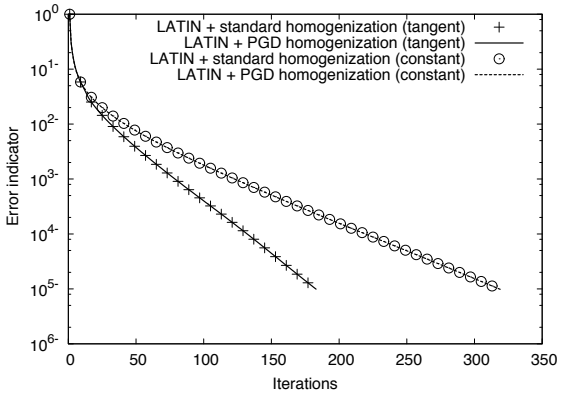


Figure 9: Comparison of the convergence curves of error indicator η without and with the PGD representation of the homogenized operator

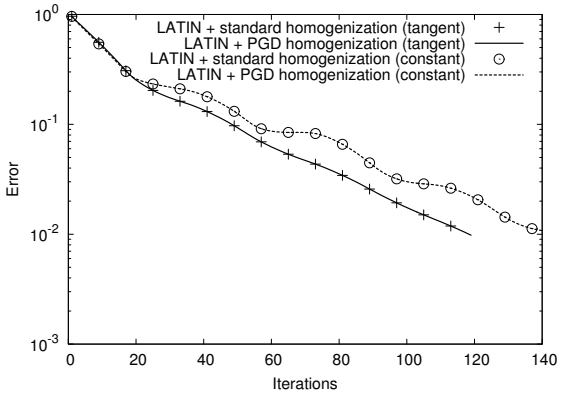


Figure 10: Comparison of the convergence curves of error η_{ref} without and with the PGD representation of the homogenized operator

Time steps N	LATIN + stand. homogen. (t.u.)	LATIN + PGD homogen. (t.u.)	Gain
10	1,408	576	2.44
20	2,688	576	4.66
30	3,968	578	5.17
40	5,248	768	6.84

Table 2: Comparison of the computation costs in terms of the number of spatial microproblems (t.u.) to be solved in order to build the homogenized operator (using a constant operator)

Concerning Table 2, one can observe that the computation cost of the standard technique is the same as in the linear case. Indeed, since the homogenized operator is calculated only once at the beginning of the algorithm, its computation time depends only on the number of time steps. When the PGD representation is introduced, the computation cost is higher than in the linear case

Time steps N	LATIN + stand. homogen. (t.u.)	LATIN + PGD homogen. (t.u.)	Gain
10	233,728	47,808	4.88
20	478,464	46,603	10.26
30	730,112	54,350	13.44
40	981,376	55,236	17.76

Table 3: Comparison of the computation costs in terms of the number of spatial microproblems (t.u.) to be solved in order to build the homogenized operator (using a tangent operator)

because a few more triplets are necessary to describe the operator due to this complex behavior. However, the gain is still significant and goes up to about 7 in the case of 40 time steps.

Conversely, in Table 3, one can see that in the case of a tangent search direction the operator is recalculated at each iteration and, therefore, the number of iterations needed to reach convergence affects the computation cost. The gain can go up to about 18 in the case of 40 time steps. Figure 11 summarizes these results by showing the evolution of the gain afforded by the PGD-based homogenization technique compared to the standard approach as a function of the number of time steps. The continuous line corresponds to a fixed homogenized operator and the dashed line corresponds to a variable tangent search direction.

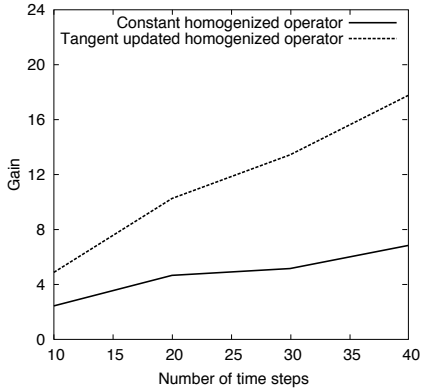


Figure 11: Evolution of the gain as a function of the number N of time steps

Let us recall that the objective of this numerical example was to evaluate the PGD-based construction of the homogenized operator. That is the reason why the performance comparison has been presented only in terms of the number of global resolutions (spatial microproblems) which are necessary to build the operator. In our example, the number of subdomains was small and the construction of the homogenized operator represented only 30% of the total computation time. In more complex situations, such as in the problems addressed in [37] in which the number of subdomains is large, the computation cost of the homogenized operator can account for most of the total computation time. In that case, a gain of 18 in the calculation of the homogenized operator would be all the more significant in terms of the overall cost of the analysis.

6. Conclusions

This paper is based on the LATIN multiscale computational strategy, which enables one to use the PGD model order reduction technique to reduce the computation cost. The multiscale nature of the strategy is based on the separation of the interface unknowns according to a macroscale and a microscale. The macroscale is used to represent the homogenized behavior of the structure and to accelerate the convergence of the iterative algorithm. In previous works based on this strategy, the PGD technique was used to reduce the computation cost of the problems defined on the microscale and to build a reduced-order model of the microscopic behavior.

The novelty of this paper is that it extends the use of the PGD representation to the construction of the homogenized operator. The numerical example shows that the convergence rate of the approach is unaffected by this new PGD representation, but a significant reduction in computation cost can be achieved, especially in the case of nonlinear behavior. The proposed strategy enables a reduced-order model of the homogenized behavior of structures made of nonlinear materials to be calculated offline and at reasonable cost. This homogenized behavior, which characterizes the local macroscopic behavior of the structure and is defined over the whole time interval and in each subdomain, establishes a relation between a small perturbation in terms of macrodisplacements and a small perturbation in terms of macroforces. Once this homogenized behavior has been calculated and stored, it can be used online to calculate the response of the structure rapidly for new loading cases.

Acknowledgments

The support of this work by the French National Research Agency as part of the SIMDREAM project (ANR-2010-COSI-006) is gratefully acknowledged.

References

[1] P. Gosselet and C. Rey. Non-overlapping domain decomposition methods in structural mechanics. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 13:515–572, 2006.

[2] T.J.R. Hughes, G.R. Feijoo, L. Mazzei, and J.B. Quincy. The variational multiscale—a paradigm for computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 166:3–24, 1998.

[3] H. Ben Dhia and G. Rateau. The Arlequin method as a flexible engineering design tool. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 62:1442–1462, 2005.

[4] E. Sanchez-Palencia. Comportement local et macroscopique d'un type de milieux physiques hétérogènes. *International Journal for Engineering Science*, 12:231–251, 1974.

[5] E. Sanchez-Palencia. Non homogeneous media and vibration theory. *Lecture Notes in Physics*, 127:Springer–Verlag, 1980.

[6] F. Devries, H. Dumontet, G. Duvaut, and F. Léné. Homogenization and damage for composite structures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 27(2):285–298, 1989.

[7] T.I. Zohdi, J.T. Oden, and G.J. Rodin. Hierarchical modeling of heterogeneous bodies. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 138(1-4):273–298, 1996.

[8] J.T. Oden, K. Vemaganti, and N. Moës. Hierarchical modeling of heterogeneous solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 172(1-4):3–25, 1999.

[9] J. Fish, K. Shek, M. Pandheeradi, and M. S. Shephard. Computational plasticity for composite structures based on mathematical homogenization: Theory and practice. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 148:53–73, 1997.

[10] M. Lefik and B.A. Schrefler. Modelling of nonstationary heat conduction problems in micro-periodic composites using homogenisation theory with corrective terms. *Archives of Mechanics*, 52(2):203–223, 2000.

[11] D. Dureisseix and D. Néron. A multiscale computational approach with field transfer dedicated to coupled problems. *International Journal For Multiscale Computational Engineering*, 6(3):233–250, 2008.

[12] H. Dumontet. Homogénéisation et effets de bords dans les composites. Thèse d'état, Université Pierre et Marie Curie, 1990.

[13] M. Haboussi, H. Dumontet, and J.-L. J.L. Billoët. On the modelling of interfacial transition behaviour in composite materials. *Computational Materials Science*, 20:251–266, 2001.

[14] C. Huet. Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 38(6):813–841, 1990.

[15] V.G. Kouznetsova, M.G.D. Geers, and W.A.M. Brekelmans. Multi-scale constitutive modelling of heterogeneous materials with a gradient-enhanced computational homogenization scheme. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 54:1235–1260, 2002.

[16] T. Zohdi and P. Wriggers. *Introduction to computational micromechanics*. Springer Verlag, 2005.

[17] F. Feyel. A multilevel finite element method (FE^2) to describe the response of highly nonlinear structures, using generalized continua. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192:3233–3244, 2003.

[18] S. Ghosh, K. Lee, and S. Moorthy. Two scale analysis of heterogeneous elastic-plastic materials with asymptotic homogenization and voronoï cell finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 132:63–116, 1996.

[19] R. Niekamp, D. Markovic, A. Ibrahimbegovic, H. G. Matthies, and R. L. Taylor. Multi-scale modeling of heterogeneous structures with inelastic constitutive behaviour—part ii: Software coupling and implementation aspects. *Engineering Computations*, 26:6–28, 2009.

[20] Y. Maday and E. M. Ronquist. The reduced-basis element method: application to a thermal fin problem. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 26(1):240–258, 2004.

[21] K. Kunisch and L. Xie. Pod-based feedback control of the burgers equation by solving the evolutionary hjb equation. *Computers & Mathematics With Applications*, 49(7-8):1113–1126, 2005.

[22] T. Lieu, C. Farhat, and A. Lesoinne. Reduced-order fluid/structure modeling of a complete aircraft configuration. *Computer Methods In Applied Mechanics and Engineering*, 195(41-43):5730–5742, 2006.

[23] M. D. Gunzburger, J. S. Peterson, and J. N. Shadid. Reduced-order modeling of time-dependent pdes with multiple parameters in the boundary data. *Computer Methods In Applied Mechanics and Engineering*, 196(4-6):1030–1047, 2007.

[24] M. Bergmann and L. L. Cordier. Optimal control of the cylinder wake in the laminar regime by trust-region methods and pod reduced-order models. *Journal of Computational Physics*, 227(16):7813–7840, 2008.

[25] G. Rozza. Reduced basis approximation and error bounds for potential flows in parametrized geometries. *Communications In Computational Physics*, 9(1):1–48, 2011.

[26] K. Carlberg, C. Bou-Mosleh, and C. Farhat. Efficient nonlinear model reduction via a least-squares petrov-galerkin projection and compressive tensor approximations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 86(2):155–181, 2011.

[27] J.A. Hernández, J. Oliver, A.E. Huespe, M.A. Caicedo, and J.C. Cante. Application of high-performance model reduction techniques to multi-scale homogenization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Submitted, 2013.

[28] P. Ladevèze. *Nonlinear computational structural mechanics - new approaches and non-incremental methods of calculation.* Springer-Verlag, 1999.

[29] A. Nouy. A priori model reduction through proper generalized decomposition for solving time-dependent partial differential equations. *Computer Methods In Applied Mechanics and Engineering*, 199(23-24):1603–1626, 2010.

[30] B. Bognet, F. Bordeu, F. Chinesta, A. Leygue, and A. Poitou. Advanced simulation of models defined in plate geometries: 3D solutions with 2D computational complexity. *Computational Methods in Applied Mechanical Engineering*, 201:1–12, 2012.

[31] A. Nouy. Recent developments in spectral stochastic methods for the numerical solution of stochastic partial differential equations. *Archives of Computational Methods In Engineering*, 16(3):251–285, 2009.

[32] Amine Ammar, Francisco Chinesta, Elías Cueto, and Manuel Doblaré. Proper generalized decomposition of time-multiscale models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 90(5):569–596, 2012.

[33] Ch. Ghnatios, F. Masson, A. Huerta, A. Leygue, E. Cueto, and F. Chinesta. Proper generalized decomposition based dynamic data-driven control of thermal processes. *Computational Methods in Applied Mechanical Engineering*, 213:29–41, 2012.

[34] D. Gonzalez, F. Masson, F. Poulhaon, A. Leygue, E. Cueto, and F. Chinesta. Proper Generalized Decomposition based dynamic data driven inverse identification. *Mathematics and Computers in Simulation*, 82(9):1677–1695, 2012.

[35] F. Chinesta, P. Ladevèze, and E. Cueto. A short review on model order reduction based on proper generalized decomposition. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 18(4):395–404, 2011.

[36] P. Ladevèze and A. Nouy. On a multiscale computational strategy with time and space homogenization for structural mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(28-30):3061–3087, 2003.

[37] P. Ladevèze, J.-C. Passieux, and D. Néron. The latin multiscale computational method and the proper generalized decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(21-22):1287–1296, April 2010.

[38] J Dolbow, N Moes, and T Belytschko. An extended finite element method for modeling crack growth with frictional contact. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(51-52):6825–6846, 2001.

[39] R. Ribeaucourt, M.-C. Baietto-Dubourg, and A. Gravouil. A new fatigue frictional contact crack propagation model with the coupled X-FEM/LATIN method. *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(33-34):3230–3247, 2007.

[40] D. Néron and D. Dureisseix. A computational strategy for poroelastic problems with a time interface between coupled physics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 73(6):783–804, 2008.

[41] D. Néron and D. Dureisseix. A computational strategy for thermo-poroelastic structures with a time-space interface coupling. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 75(9):1053–1084, 2008.

[42] Ch. Heyberger, P.-A. Boucard, and D. Néron. A rational strategy for the resolution of parametrized problems in the PGD framework. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 259:40–49, 2013.

[43] A. Nouy and P. Ladevèze. Multiscale computational strategy with time and space homogenization: A radial-type approximation technique for solving microproblems. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 2(4):557–574, 2004.

[44] D. Néron and P. Ladevèze. Proper generalized decomposition for multiscale and multiphysics problems. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 17(4):351–372, 2010.

[45] H. Lamari, A. Ammar, P. Cartraud, G. Legrain, F. Chinesta, and F. Jacquemin. Routes for efficient computational homogenization of nonlinear materials using the proper generalized decompositions. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 17(4):373–391, 2010.

[46] F. El Halabi, D. González, A. Chico, and M. Doblaré. FE2 multiscale in linear elasticity based on parametrized microscale models using proper generalized decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 257:183 – 202, 2013.

[47] N. Relun, D. Néron, and P.A. Boucard. Multiscale elastic-viscoplastic computational analysis: a detailed example. *European Journal of Computational Mechanics*, 20(7-8):379–409, 2012.

[48] N. Relun, D. Néron, and P.-A. Boucard. A model reduction technique based on the PGD for elastic-viscoplastic computational analysis. *Computational Mechanics*, 51(1):83–92, 2013.

[49] R. Glowinski and P. Le Tallec. Augmented lagrangian interpretation of the nonoverlapping schwartz alternating method. In *Third International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*, pages 224–231. Philadelphia, SIAM, 1990.

[50] J-C Passieux, P Ladevèze, and D Néron. A scalable time–space multiscale domain decomposition method: adaptive time scale separation,. *Computational Mechanics*, 46(4):621–633, 2010.

[51] P. A. Guidault, O. Allix, L. Champaney, and C. Cornuault. A multiscale extended finite element method for crack propagation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(5):381–399, 2008.

AppendixA. The LATIN multiscale solver in details

AppendixA.1. Multiscale description of the interface unknowns

Two different descriptions of the interface unknowns (displacements and forces) are introduced: a macroscale description (denoted with superscript ^{M}) and a microcomplement (denoted with superscript ^{m}). Over an interface $\Phi_{EE'}$ be-

tween subdomains Ω_E and $\Omega_{E'}$, one has:

$$\underline{\dot{W}}_{EE'} = \underline{\dot{W}}^M_{EE'} + \underline{\dot{W}}^m_{EE'} \qquad \underline{F}_{EE'} = \underline{F}^M_{EE'} + \underline{F}^m_{EE'} \tag{A.1}$$

The choice of the spaces of the macrodisplacements and macroforces, denoted respectively $\mathcal{W}^M_{EE'}$ and $\mathcal{F}^M_{EE'}$, is arbitrary, but has a strong influence on the scalability of the method. In practice, in the spatial domain, the macropart is chosen to be the linear part of the forces and displacements, which guarantees the scalability of the domain decomposition method in space, but other possible choices are discussed in [51]. Scalability in time is more difficult to achieve and requires an adaptive generation of the temporal macrobasis. A detailed analysis of this question was presented in [50]. Here, the separation of the macroscale from the microscale is carried out only in space, which means that the temporal microscale and macroscale are identical. The extension to the multiscale temporal case is straightforward.

Once spaces $\mathcal{W}^M_{EE'}$ and $\mathcal{F}^M_{EE'}$ have been defined, the macropart of the displacement field can be defined as:

$$\forall \underline{F}^* \in \mathcal{F}^M_{EE'}, \qquad \int_{\Phi_{EE'}\times I} \left(\underline{\dot{W}}^M_{EE'} - \underline{\dot{W}}_{EE'}\right)\cdot \underline{F}^* \, dS\, dt = 0 \tag{A.2}$$

and the macropart of the force field can be defined as:

$$\forall \underline{\dot{W}}^* \in \mathcal{W}^M_{EE'}, \qquad \int_{\Phi_{EE'}\times I} \left(\underline{F}^M_{EE'} - \underline{F}_{EE'}\right)\cdot \underline{\dot{W}}^* \, dS\, dt = 0 \tag{A.3}$$

The spaces of the interface quantities can be extended to the other interfaces $\mathcal{N}_E$ of subdomain Ω_E as: $\mathcal{W}^M_E = \bigotimes_{\Phi_{EE'}\in\mathcal{N}_E} \mathcal{W}^M_{EE'}$. $\mathcal{F}^M_E = \bigotimes_{\Phi_{EE'}\in\mathcal{N}_E} \mathcal{F}^M_{EE'}$. The extension to the whole set of the subdomains of Ω leads to $\mathcal{W}^M$ and $\mathcal{F}^M$. The micropart of the displacements and forces can be derived from (8).

Over the interfaces, the macroforces are assumed to verify the transmission conditions:

$$\underline{F}^M_{EE'} + \underline{F}^M_{E'E} = \underline{0} \quad \text{over}\, \Phi_{EE'} \tag{A.4}$$

$$\underline{F}^M_E + \underline{F}^M_d = \underline{0} \quad \text{over}\, \partial\Omega_E \cap \partial_2\Omega \tag{A.5}$$

This assumption is called the "admissibility of the macroquantities".

The corresponding subspace is defined as $\mathcal{F}^M_{ad}$. Now let us introduce the space $\mathcal{W}^M_{ad}$ of the displacements which are continuous at the interfaces and equal to the macropart of prescribed displacement $\underline{u}_d$ over $\partial_1\Omega$. The spaces whose elements have their macroparts in $\mathcal{W}^M_{ad}$ and $\mathcal{F}^M_{ad}$ are denoted $\mathcal{W}_{ad}$ and $\mathcal{F}_{ad}$.

AppendixA.2. The local stage

At iteration n+1, given $\mathbf{s}_n \in \mathbf{A}_d$, the local stage leads to an approximation of the solution $\hat{\mathbf{s}}_{n+1/2}$ in space $\boldsymbol{\Gamma}$ such that $(\hat{\mathbf{s}}_{n+1/2} - \mathbf{s}_n)$ belongs to search direction $\mathbf{E}^+$. Skipping the subscripts for the sake of clarity, in each subdomain $\Omega_E \subset \Omega$, $\mathbf{E}^+$ is defined by:

$$\mathbf{H}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_E - \boldsymbol{\sigma}_E) + (\hat{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}_{pE} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{pE}) = 0 \tag{A.6}$$

$$\mathbf{h}(\underline{\hat{F}}_E - \underline{F}_E) - (\underline{\hat{\dot{W}}}_E - \underline{\dot{W}}_E) = 0 \tag{A.7}$$

where $\mathbf{H}$ and $\mathbf{h}$ are symmetric, positive definite operators which have an influence on the convergence rate of the algorithm, but do not affect the solution. The solution $\hat{\mathbf{s}}$ of the local stage is the "intersection" of spaces $\mathbf{E}^+$ and $\boldsymbol{\Gamma}$. This leads to a set of equations which are defined locally in space.

AppendixA.3. The linear stage

The linear stage consists, given the solution $\hat{\mathbf{s}}_{n+1/2} \in \boldsymbol{\Gamma}$ of the local stage, in finding a solution $\mathbf{s}_n \in \mathbf{A}_d$ such that $(\mathbf{s}_{n+1} - \hat{\mathbf{s}}_{n+1/2})$ belongs to search direction $\mathbf{E}^-$. Skipping the subscripts, $\mathbf{E}^-$ is defined by:

$$\forall \boldsymbol{\sigma}^* \in \mathcal{S}, \quad \sum_{\Omega_E\subset\Omega} \int_{\Omega_E\times I} (\mathbf{H}(\boldsymbol{\sigma}_E - \hat{\boldsymbol{\sigma}}_E) - (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{pE} - \hat{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}_{pE})) : \boldsymbol{\sigma}^* \, d\Omega\, dt = 0 \tag{A.8}$$

and

$$\forall \underline{F}^* \in \mathcal{F}_{ad}, \quad \sum_{\Omega_E\subset\Omega} \int_{\partial\Omega_E\times I} \left(\mathbf{h}(\underline{F}_E - \underline{\hat{F}}_E) + (\underline{\dot{W}}_E - \underline{\hat{\dot{W}}}_E)\right)\cdot \underline{F}^* \, dS\, dt = 0 \tag{A.9}$$

which is written in a weak sense in order to take into account the admissibility of the macroforces (A.4,A.5).

In [28], it was shown that an optimal choice of $\mathbf{H}$ in terms of the convergence rate consists in defining the manifold $\mathbf{E}^-$ as the vector space

which is tangent to $\mathbf{\Gamma}$ in $\hat{\mathbf{s}}$. This requires the calculation of $\mathbf{H} = \partial\mathbf{B}/\partial\sigma|_{\hat{\sigma}}$ at each iteration (or, at least, every few iterations) as in a classical Newton algorithm. $\mathbf{h}$ can be viewed as a "viscosity" effect at the interface. The choice of this parameter is discussed in [37].

The admissibility of the macroforces $\underline{F}^* \in \mathscr{F}_{ad}$ in (A.9), which expresses that macropart $\underline{F}^{M*}$ belongs to $\mathscr{F}^M_{ad}$, is enforced by introducing a Lagrange multiplier $\dot{\underline{W}}^M_E \in \mathscr{W}^M_{ad}$. Then, (A.9) is defined locally in each subdomain Ω_E as:

$$\forall \underline{F}^* \in \mathscr{F} \quad \int_{\partial\Omega_E\times I} \Big(\mathbf{h}(\underline{F}_E - \hat{\underline{F}}_E) + (\dot{\underline{W}}_E - \hat{\dot{\underline{W}}}_E) - \dot{\underline{W}}^M_E\Big)\cdot \underline{F}^*\, dS\, dt = 0 \quad \text{(A.10)}$$

Conversely, the problem of the admissibility of the macroquantities is defined on the global interface level by:

$$\forall \dot{\underline{W}}^{M*}_E \in \mathscr{W}^{M*}_{ad} \quad \sum_{\Omega_E\subset\Omega} \int_{\partial\Omega_E\times I} \dot{\underline{W}}^{M*}_E \cdot \underline{F}_E\, dS\, dt - \int_{\partial\Omega_E\cap\partial\Omega_2\times I} \dot{\underline{W}}^{M*}_E \cdot \underline{F}_d\, dS\, dt = 0 \quad \text{(A.11)}$$

Moreover, kinematic admissibility and the state law lead to the following condition for each subdomain:

$$\forall \left(\boldsymbol{\sigma}^*_E, \underline{F}^*_E\right) \in \mathscr{S}^*_E \quad \int_{\Omega_E\times I} \left(\mathbf{K}^{-1}\dot{\boldsymbol{\sigma}}_E + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{pE}\right) : \boldsymbol{\sigma}^*_E\, d\Omega\, dt = \int_{\partial\Omega_E\times I} \dot{\underline{W}}_E \cdot \underline{F}^*_E\, dS\, dt \quad \text{(A.12)}$$

AppendixA.4. Convergence of the algorithm

Under the assumption of perfect interfaces and a monotonous operator $\mathbf{B}$ for the description of the constitutive law, the algorithm presented above converges toward the reference solution $\mathbf{s}_{ref}$ (see [28] for proof of the convergence). In order to check the convergence of the iterative scheme, one introduces the following error indicator:

$$\eta = \frac{\|\mathbf{s}_{n+1} - \hat{\mathbf{s}}_{n+1/2}\|}{\frac{1}{2}\|\mathbf{s}_{n+1} + \hat{\mathbf{s}}_{n+1/2}\|} \quad \text{(A.13)}$$

where the norm is defined as:

$$\|\mathbf{s}\|^2 = \sum_{\Omega_E\subset\Omega} \int_{\Omega_E\times I} (\boldsymbol{\sigma}_E : \mathbf{H}\boldsymbol{\sigma}_E + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{pE} : \mathbf{H}^{-1}\dot{\mathbf{e}}_{pE})\, d\Omega\, dt + \int_{\partial\Omega_E\times I} (\underline{F}_E \cdot \mathbf{h}\underline{F}_E + \dot{\underline{W}}_E \cdot \mathbf{h}^{-1}\dot{\underline{W}}_E)\, dS\, dt \quad \text{(A.14)}$$

Let us note that if the reference solution $\mathbf{s}_{ref}$ is available one can also introduce the actual relative error η_{ref}:

$$\eta_{ref} = \frac{\|\mathbf{s}_{n+1} - \mathbf{s}_{ref}\|}{\|\mathbf{s}_{ref}\|} \quad \text{(A.15)}$$

PREPRINT

5

M. Capaldo, P.-A. Guidault, D. Néron and P. Ladevèze. The Reference Point Method, a "hyperreduction" technique: application to PGD-based nonlinear model reduction. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 322:483–514, 2017.

The Reference Point Method, a "hyperreduction" technique: application to PGD-based nonlinear model reduction

M. Capaldo[a], P.-A. Guidault[b], D. Néron[b], P. Ladevèze[b]

[a] *EDF R&D, THEMIS/R22, 7, Boulevard Gaspard Monge, 91120 Palaiseau, France*
[b] *LMT, ENS Paris-Saclay, CNRS, Université Paris-Saclay, 61 avenue du Président Wilson, 94235 Cachan CEDEX, France*

Abstract

A new approximation technique, called Reference Point Method (RPM), is proposed in order to reduce the computational complexity of algebraic operations for constructing reduced-order models in the case of time dependent and/or parametrized nonlinear partial differential equations. Even though model reduction techniques enables one to decrease the dimension of the initial problem in the sense that far fewer degrees of freedom are needed to represent the solution, the complexity of evaluating the nonlinear terms and assembling the low dimensional operator associated with the reduced-order model still scales with the size of the original high-dimensional model. This point can be critical, especially when the reduced-order basis changes throughout the solution strategy as it is the case for model reduction techniques based on Proper Generalized Decomposition (PGD). Based on the concept of spatial, parameter/time reference points and influence patches, the RPM defines a *compressed* version of the data from which an approximate low-rank separated representation by patch of the operators can be constructed by explicit formulas at low-cost without resorting to SVD-based techniques. An application of the RPM to PGD-based model reduction for a nonlinear parametrized elliptic PDE previously studied by other authors with reduced-basis method and EIM is proposed. It is shown that computational complexity to construct the reduced-order model can be divided in practice by one order of magnitude compared with the classical PGD approach.

Keywords: RPM, nonlinear model reduction, PGD, reduced basis, LATIN method, hyperreduction

1. Introduction

Numerical simulation has been playing an increasingly important role in science and engineering due to the need to describe realistic scenarios and derive tools to facilitate the virtual design of new structures while reducing the use of real prototypes. Most of the time, engineers are interested into specific quantities called *outputs* (e.g. forces, critical stresses, pressure drops...) in some particular zones, rather than into the description of the model at each point of the considered domain. These outputs are functions of the system parameters, called *inputs* (e.g. geometry parameter, material properties, boundary conditions and loadings...), that define a particular configuration

of the model. The evaluation of these outputs needs the solution of the underlying PDE that requires a computational cost which, in some engineering fields, can be very high, especially when the simulations concern nonlinear analyses of complex high-fidelity models. Moreover, engineering design and optimization may require thousands of these evaluations, sometimes in real-time. A challenging issue would be to provide engineers with a kind of *Virtual Chart* constructed during an *offline* stage that can be CPU intensive. Once constructed, it can be used *online* to solve real-time or many queries simulations. Despite of the continuing progress in computer speeds and hardware capabilities, the construction of those charts would be hardly tractable with classical numerical approaches.

Model reduction techniques aim at circumventing this obstacle by seeking the solution of a given problem in a reduced-order basis (ROB), whose dimension is much smaller than the size of the original high-dimensional model. These techniques take advantage of the redundancy of information that usually exists when describing the solution. In applied mathematics, the first proposed model reduction technique was the Proper Orthogonal Decomposition (see [1, 2, 3, 4, 5] or the review [6] for more examples). Techniques based on POD involve a learning phase which consists in solving the problem at some particular time instants and/or parameter values arbitrarily chosen, either from the full-order model in space or, sometimes, from a simplified model. These solutions, called snapshots, can be CPU-expensive. A ROB is subsequently formed by considering only the most relevant POD modes of these snapshots. The reduced-order model (ROM) is then classically generated by Galerkin projection onto the ROB and solved for the entire time and/or parameter domain, but other approaches such as Petrov-Galerkin or minimization techniques can also be used. The strong point of these techniques is the fact that, the number of the most relevant POD modes is often much lower than the size of the full-order model in space, however it is *case sensitive* [7]. For instance, in dynamics computations, changes in boundary conditions can drastically affect the POD accuracy and a high number of snapshots may be required [7, 8]. Since the 80's, the Reduced-Basis (RB) approach has been developed and consists in a greedy algorithm to select the most relevant calculations to be performed on the parametric space in order to enrich the ROB [9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17]. In this technique, snapshots are selected by a greedy algorithm such that the new $(n+1)^{th}$ snapshot minimizes the residue, associated with a chosen norm, of the solution achieved by solving the original problem projected onto the n-order reduced basis. In that way, this strategy ensures the quality of the reduced-order basis for the construction of the ROM and palliates the *case-sensitivity* of POD.

Another appealing family of model reductions which has received a growing interest during the last decade is based on the Proper Generalized Decomposition (PGD). This technique does not need to solve the full-order model since it does not require snapshots to build up the ROB. Basically, PGD consists in seeking the solution of a problem in a relevant ROB which is generated automatically and on-the-fly by a greedy or power iterations algorithm. The interested reader is referred to [18] for a review on PGD-based techniques and to the book [19] for a handbook on separated representations and model reduction techniques. A valuable survey on the use of separated representations for solving parametric models can also be found in [20]. In the field of computational mechanics, PGD was used in [21] under the name of *radial loading approximation* as one of the fundamental ingredients of the LATIN (Large Time Increment) method [22], a non-incremental solution strategy for nonlinear evolution problems. By an alternating-direction scheme, the strategy generates approximations of the solution on the entire time-space domain by successive corrections and, consequently, is likely appropriate for time-space separated representation. In this context, PGD enabled to circumvent efficiently storage issue of iterates defined on the whole time-space domain while saving drastically the computational time. One of the significant improvements of the strategy concerns the introduction of a *Preliminary step*, which consists in first updating the time functions at each LATIN iteration by using the ROB generated at the previous iteration in order to compute a new iterate [23, 24, 25, 26, 27, 28]. Called *Update step* in [29, 30] with Newton-like solution strategies, this step has proved efficiency to reduce the number of PGD

functions generated while keeping the most relevant ones to produce the best approximate separated representation of the solution. However, this step can be time consuming in practice and may represent between fifty and seventy percent of the total CPU time [31].

More generally, model reduction techniques are particularly efficient when the ROM needs to be constructed only once or when this step can be performed offline, prior to the online resolution of this model which can then be very fast. This is the case of parametrized time-invariant systems [32], linear stationary and quasi-stationary systems whose operators are affine functions of the input parameters [16]. On the contrary, when the projection is applied to linear dynamics or stationary systems with non-affine parameter dependence, or general nonlinear problems, the resulting ROM is costly to assemble, decreasing the efficiency of reduced-order modeling. Indeed, for any model reduction technique based on the projection of the problem on a given reduced-order basis, the computational complexity of evaluating the nonlinear terms (Jacobian or residue of the solution strategy) and assembling the ROM's low dimensional operator scales with the size of the original high-dimensional model. This point can be critical especially when the reduced-order basis changes throughout the solution strategy as it is the case for model reduction techniques based on Proper Generalized Decomposition (PGD). This makes the bottleneck of model reduction strategies applied to nonlinear problems.

Several techniques have been introduced in the literature in order to tackle this issue, especially for model reduction techniques based on a learning stage (POD-Galerkin or reduced basis method for instance). Among them, the Empirical Interpolation Method (EIM) is probably one of the most popular. It has been developed in particular for linear elliptic problems with non-affine parameter dependence [33] as well as for nonlinear elliptic and parabolic problems [15]. Several variants can be found in the literature. To name a few, one can cite the Best Interpolation Point Method (BPIM) [34] or the Discrete EIM (DEIM) [35]. Another family of techniques that tackles nonlinear reduced-order modeling is the one that belongs to the Gappy-POD application, as the A priori Hyper-Reduction (APHR) [36], the Missing Point Estimation (MPE) [37], the Gauss Newton with approximated tensors (GNAT) [38]. More recently, [39] has introduced the Energy-Conserving Sampling and Weighting (ECSW), allowing not only to focus on the accuracy of the approximated function, but also to preserve the energetic aspect of the solution.

Concerning PGD-based model reduction, techniques to overcome the aforementioned bottleneck seems to be by far less numerous. As previously said, the possibility to enrich the reduced-order basis throughout the computation is definitely an advantage to tackle nonlinear problems efficiently. However the fact that ROB changes quite often makes the previous techniques such as EIM less suitable in the context of PGD, a priori. Indeed, for a fixed number of best/magic interpolation points the error in the coefficient functions used to interpolate the nonlinear terms ultimately dominates when the size of the ROB increases [15]. Adding more magic points may be necessary as long as the ROB evolves. Such an adaptative strategy can obviously be derived but it may be not very efficient in this context, at least in the LATIN framework.

In the present article, a more pragmatic approach is proposed. Based on the concept of spatial, time and parameter reference points associated to influence patches, the Reference Point Method (RPM) defines a *compressed* version of the data from which an approximate low-rank separated representation by patch of operators can be constructed by explicit formulas at low-cost. In this work, RPM is applied to PGD-based nonlinear model reduction with the LATIN solution strategy. More precisely, it is used at each LATIN iteration to solve the *Preliminary step*, which consists in an update of the reduced model from the current ROB. As previously said, this step is time consuming and may represent up to seventy percents of the total CPU time. In practice, the RPM enables to decrease the cost of this stage of one order of magnitude to make it represent less than ten percents of the total computational time, which is very promising. It is important to note that contrary to an interpolation technique, it is rather an approximation technique of the integrals involved in the ROM construction similarly to quadrature techniques in classical finite element methods. The key point is that, even though the integral computations are not enough accurate,

the PGD-model reduction technique can anyway improve it by adding new correction functions to the ROB at the next LATIN iterations, which ensures the convergence of the whole process.

The article is structured as follows. A reference problem previously investigated by other authors by reduced-basis techniques with EIM [15] or POD with DEIM [35] is first presented in Section 2. The studied nonlinear parametrized elliptic PDE is solved by the LATIN-PGD method and the aforementioned bottleneck of nonlinear model reduction is illustrated. The Reference Point Method is presented in Section 3 and its basic features (reference points, patches, generalized components) are introduced. It is shown that the space of generalized components provides a framework that presents interesting properties dealing with the elementary algebraic operations [40], which simplifies the evaluation of integrands. The way to reconstruct by explicit formulas an approximate low-rank separated representation by patch of operators is also detailed. Keeping a separated representation of the quantities and operators without resorting to SVD-based techniques is indeed a great advantage regarding integral computation by separation of variables. A comparison between the RPM applied to PGD-based nonlinear model reduction and EIM with reduced-order basis technique is proposed in Section 4 in order to appreciate and illustrate the performances of the RPM.

2. PGD-based model reduction of a nonlinear parametrized elliptic PDE

The reference problem that motivates the study is first presented in **Section 2.1**. It was previously investigated through EIM with reduced-basis technique in [15] and DEIM with POD in [35]. In these works, a Newton-based nonlinear solution strategy was used. Here, an alternating-direction scheme, the LATIN method, is used as detailed in **Appendix A**. The LATIN iterative scheme generates approximations of the solution on the entire space-parameter domain by successive corrections and, consequently, is likely appropriate for space-parameter separated representation. A PGD-based model reduction is introduced within the LATIN method as detailed in **Section 2.2**. The issue of computational complexity of nonlinear model reduction is discussed in **Section 2.3**.

2.1. Reference problem formulation

Let us consider as a reference problem, the nonlinear parametrized elliptic PDE first studied in [15, 35] defined on a spatial domain $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ and a parameter domain $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2$ and stated as follows:

Problem 1 (Strong form). *Find $u(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu})$ with $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2) \in \Omega =]0,1[^2$ and $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2) \in \mathcal{D} = [0.01, 10]^2$ and homogeneous Dirichlet boundary condition on $\partial\Omega \times \mathcal{D}$, such that:*

$$\left\{ \begin{array}{rcll} -\nabla^2 u + g(u;\boldsymbol{\mu}) & = & f(\boldsymbol{x}) & \text{on} \quad \Omega \times \mathcal{D} \\ u & = & 0 & \text{on} \quad \partial\Omega \times \mathcal{D} \end{array} \right.$$

with:

$$g(u;\boldsymbol{\mu}) = \frac{\mu_1}{\mu_2}\,(e^{\mu_2 u} - 1) \quad \text{and} \quad f(\boldsymbol{x}) = 100\,\sin(2\pi x_1)\,\sin(2\pi x_2)$$

This problem can be interpreted as a stationary diffusion problem with a parametrized nonlinear interior heat source term.

A space weak formulation of **Problem 1** can be proposed. In this case, the solution u is identified with a function defined on $\mathcal{D}$ with values in Hilbert space $\mathcal{V} = H^1_0(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega);\ u = 0 \text{ on } \partial\Omega\}$, i.e. $u(\boldsymbol{\mu}) : \boldsymbol{x} \mapsto u(\boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{x}) \approx u(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu})$, and **Problem 1** can be stated as follows:

Problem 2 (Space weak form). *Given $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{D}$, find $u : \mathcal{D} \to \mathcal{V}$ such that:*

$$\forall\, v \in \mathcal{V}, \quad a(u,v) + \int_\Omega g(u;\boldsymbol{\mu})\, v \,\mathrm{d}x = l(v)$$

where $a(\cdot,\cdot)$ is a bilinear form on $\mathcal{V}$ and $l(\cdot)$ is a linear form on $\mathcal{V}$ defined by:

$$a(u,v) = \int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v \, \mathrm{d}x \quad \textit{and} \quad l(v) = \int_\Omega f(\boldsymbol{x})\, v \, \mathrm{d}x$$

Term $g(u;\boldsymbol{\mu})$ is a nonaffine nonlinear function of the parameter $\boldsymbol{\mu}$, spatial coordinate $\boldsymbol{x}$, and field variable $u(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu})$. Bilinear term $a(u,v)$ and linear term $l(v)$ are $\mathcal{V}$-continuous bounded functionals and are parameter-independent. It is shown in [15] that **Problem 2** is well-posed and that it admits a unique solution $u \in \mathcal{V}$.

A space-parameter weak formulation of **Problem 1** can also be proposed. The following function space is introduced:

$$\mathcal{S} = L^2(\mathcal{D},\mathcal{V}) = \{\ u\ : \mathcal{D} \to \mathcal{V},\ \int_{\mathcal{D}} \|u\|_{\mathcal{V}}^2 \, \mathrm{d}\mu\ <\ \infty\ \}$$

where $\|\cdot\|_{\mathcal{V}}$ is a norm on $\mathcal{V}$. A space-parameter weak formulation of **Problem 2** can be defined by the following problem:

Problem 3 (Space-parameter weak form). *Find $u \in \mathcal{S}$ such that:*

$$\forall\, v \in \mathcal{S}, \quad A(u,v) + G(u,v) = L(v)$$

where A and L are bilinear and linear forms defined by:

$$A(u,v) = \int_{\mathcal{D}} a(u(\boldsymbol{\mu}), v(\boldsymbol{\mu}))\, \mathrm{d}\mu \quad \textit{and} \quad L(v) = \int_{\mathcal{D}} l(v(\boldsymbol{\mu}))\, \mathrm{d}\mu$$

The nonlinear form G is defined by:

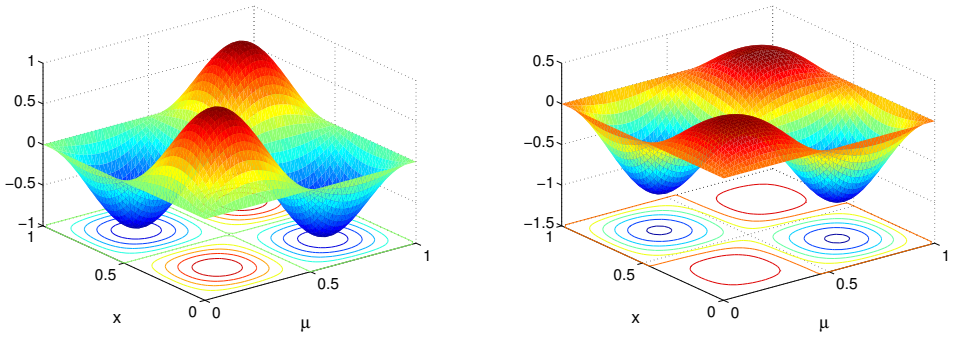
$$G(u,v) = \int_{\mathcal{D}\times\Omega} g(u;\boldsymbol{\mu})\, v \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}\mu$$

Problem 2 can be easily solved by introducing a finite element approximation space $\mathcal{V}_h \in \mathcal{V}$ of u and by using a Newton-based nonlinear solution strategy. In the following, the reference solution refers to the solution obtained by a finite element mesh of 50×50 bilinear quadrilateral elements leading to a finite element approximation space of dimension $N = 2601$. The approximate solution u_h of u for two sets of parameters, $\boldsymbol{\mu} = (0.01, 0.01)$ and $\boldsymbol{\mu} = (10, 10)$, is given in **Figure 1**. It can be seen that the parameter μ_1 controls the strength of the sink term whereas μ_2 changes the strength of the nonlinearity, the exponential function $\mu_1\, e^{\mu_2 u}$ increasing more the peak magnitude of the negative part of u than the magnitude of the positive one.

2.2. The LATIN-PGD method

In order to solve **Problem 3**, the LATIN method is used as a nonlinear solution strategy (see **Appendix A** for further details). By an alternating-direction scheme, the strategy generates approximations of the solution on the entire space-parameter domain by successive corrections. In this case, it shares similar features with alternating-direction nonlinear solution strategy and augmented Lagrangian methods [41].

The LATIN iterative scheme generates approximations of the solution on the entire space-parameter domain by successive corrections and, consequently, is likely appropriate for space-parameter separated representation. By denoting $\mathcal{P} = L^2(\mathcal{D};\mathbb{R}^2) := L^2(\mathcal{D})$ and by identifying the space $\mathcal{S} = L^2(\mathcal{D},\mathcal{V})$ with the tensor product space $\mathcal{V}\otimes\mathcal{P}$, the correction $\delta u^{(n+1)}$ of the global stage



(a) $\boldsymbol{\mu} = (0.01, 0.01)$ (b) $\boldsymbol{\mu} = (10, 10)$

Figure 1: Solution of **Problem 2** for different parameter values and a finite element mesh of 50×50 bilinear quadrilateral elements ($N = 2601$)

(see **Problem 6** in **Appendix A**) is sought in $\mathcal{V} \otimes \mathcal{P}$. The following approximation of order k of the iterate $u^{(n+1)}$ is proposed:

$$u^{(n+1)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}) \approx u_k^{(n+1)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}) = u^{(0)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}) + \sum_{i=1}^{k} \Phi_i(\boldsymbol{x}) \; \lambda_i(\boldsymbol{\mu}) \tag{1}$$

where $u^{(0)} \in \mathbf{A}_d$ is an initial approximation of the solution that verifies the boundary conditions and which can be possibly given under separated representation provided that it is admissible. Each PGD pair $(\lambda_i, \Phi_i) \in \mathcal{P} \times \mathcal{V}$ is unknown and determined throughout the computation by a *greedy algorithm*. The construction of a new space function Φ_i is by far the most expensive step of this process. Thus, at a given iteration $n+1$ of the nonlinear solver, it is advantageous to first reuse the reduced-order basis $\mathcal{W}_k = \{\Phi_i\}_{1 \leqslant i \leqslant k}$ generated up to iteration n by updating the parameter functions $\{\lambda_i\}_{1 \leqslant i \leqslant k}$ [27]. One proceeds with the *global stage* at the iteration $n+1$ of the nonlinear solver as follows:

1. *Preliminary step*: reuse of the current reduced-order basis [23, 24, 25, 26, 27, 30]. This step consists in building an approximation of the solution, denoted by $\breve{s}^{(n+1)} = (\breve{u}^{(n+1)}, \breve{w}^{(n+1)})$, thanks to the ROB generated at the previous iteration n of the nonlinear iterative scheme. This is similar to what is done during the *online* stage of classical reduced-order basis techniques. The main difference comes from the fact that here the ROB evolves throughout the iterations which makes pre-computations of operators inefficient. Due to the bilinearity and linearity of forms involved in (A.7) associated to global stage (see **Problem 5** in **Appendix A**), one seeks an approximation of order k of the correction $\delta u^{(n+1)}$ such that:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \breve{u}^{(n+1)} & = & u^{(n)} + \delta u^{(n+1)} \\ \\ \delta u^{(n+1)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}) & \approx & \delta u_k^{(n+1)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}) \approx \displaystyle\sum_{i=1}^{k} \Phi_i(\boldsymbol{x}) \; \delta\lambda_i(\boldsymbol{\mu}) \end{array} \right. \tag{2}$$

   Assuming that an approximation of order k of $u^{(n)}$ is available from the previous iteration n of the nonlinear iterative scheme, an approximation of $\breve{u}^{(n+1)}$ can be deduced as follows :

$$\breve{u}^{(n+1)} \approx u^{(n)} + \delta u_k^{(n+1)} = u^{(0)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}) + \sum_{i=1}^{k} \Phi_i(\boldsymbol{x}) \; (\lambda_i(\boldsymbol{\mu}) + \delta\lambda_i(\boldsymbol{\mu})) \tag{3}$$

   Here, the only unknowns are the functions $\{\delta\lambda_i\}_{1 \leqslant i \leqslant k}$ depending on the parameters. Given a ROB of space functions $\mathcal{W}_k = \{\Phi_i\}_{1 \leqslant i \leqslant k}$, one seeks the best linear combination of this

ROB which solves **Problem 6** defined in **Appendix A**. By choosing for test function $v = \Phi_j(\boldsymbol{x})\ \lambda^*(\boldsymbol{\mu})$ with $1 \leqslant j \leqslant k$, the *Preliminary step* problem reads:

Problem 4 (Preliminary/update step). *Find parameter corrections* $\{\delta\lambda_i\}_{1\leqslant i\leqslant k}$ *such that*

$$1 \leqslant j \leqslant k,\ \forall\, \lambda^* \in \mathcal{P},$$
$$\sum_{i=1}^{k} \int_{\mathcal{D}} \lambda^* \left(a(\Phi_i, \Phi_j) + \int_{\Omega} \Phi_i\ \mathbf{H}^-(u^{(n)}; \boldsymbol{\mu})\ \Phi_j\ \mathrm{d}x \right) \delta\lambda_i\ \mathrm{d}\mu = -\int_{\mathcal{D}} \lambda^*\ \mathcal{R}(u^{(n)}, \Phi_j; \boldsymbol{\mu})\ \mathrm{d}\mu \tag{4}$$

It is worth noting at the fact that terms $a(\Phi_i, \Phi_j)$ are parameter-independent and can be computed once for all parameter values provided that the ROB does not change. However, nonlinear terms $\Phi_i\ \mathbf{H}^-(u^{(n)}; \boldsymbol{\mu})\ \Phi_j$ and residue $\mathcal{R}(u^{(n)}, \Phi_j\ \lambda^*; \boldsymbol{\mu})$ depend on $g(u^{(n)}; \boldsymbol{\mu})$ and have to be evaluated for each new parameter value and iterate $u^{(n)}$ anyway. As shown in **Section 2.3**, this results in a computational cost that scales with the size of the original high-dimensional model.

2. *Preliminary step performance indicator*: The preliminary step produces a first approximation $\breve{u}^{(n+1)} \approx u^{(n)} + \delta u_k^{(n+1)}$ of **Problem 6** (see **Appendix A**) at the iteration $n+1$ by seeking the solution in the span of the already existing ROB, generated at the previous iteration n (see (2)). In order to appreciate the improvement of the solution between two consecutive LATIN iterations thanks to the preliminary step, the following performance indicator [42], based on LATIN error indicator δ_L (see (A.9)), is proposed:

$$\eta_0 = \frac{e_1 - e_2}{e_1} \geqslant 0 \quad \text{with} \quad e_1 = \frac{\|u^{(n)} - \hat{u}^{(n-1/2)}\|}{\frac{1}{2}\ \|u^{(n)} + \hat{u}^{(n-1/2)}\|} \quad \text{and} \quad e_2 = \frac{\|\breve{u}^{(n+1)} - \hat{u}^{(n+1/2)}\|}{\frac{1}{2}\ \|\breve{u}^{(n+1)} + \hat{u}^{(n+1/2)}\|} \tag{5}$$

Due to the particular choice made for search direction $\mathbf{H}^+$ (see (A.2)), one has:

$$\begin{cases} e_1 &= \dfrac{\|u^{(n)} - u^{(n-1)}\|}{\frac{1}{2}\ \|u^{(n)} + u^{(n-1)}\|} = \dfrac{\|\delta u^{(n)}\|}{\frac{1}{2}\ \|u^{(n)} + u^{(n-1)}\|} = \delta_L^{(n)} \\ \\ e_2 &= \dfrac{\|\breve{u}^{(n+1)} - u^{(n)}\|}{\frac{1}{2}\ \|\breve{u}^{(n+1)} + u^{(n)}\|} = \dfrac{\|\delta u_k^{(n+1)}\|}{\frac{1}{2}\ \|\breve{u}^{(n+1)} + u^{(n)}\|} \end{cases} \tag{6}$$

If the value of η_0 is higher than a given threshold, the correction $\delta u_k^{(n+1)}$ is significant and the global stage at the iteration $n+1$ is considered to be solved. One can proceed to a new LATIN iteration, that is to say to a new local stage. Otherwise, one proceeds to the generation of a new PGD pair as described hereafter.

3. *Generation of a new PGD pair*: The prediction $\breve{u}^{(n+1)} \approx u^{(n)} + \delta u_k^{(n+1)}$ previously computed during the preliminary step is considered to be known but it is not good enough and the performance indicator (5) is lower than a given threshold. Then a new PGD pair is sought to enrich the previous approximation by solving **Problem 6** (see **Appendix A**) by a progressive Galerkin PGD procedure. The new PGD pair is generated to approximate the correction $\delta u^{(n+1)} = u^{(n+1)} - u^{(n)}$ of the LATIN iteration $n+1$ (see (2)). Let assume that a decomposition $\delta u_k^{(n+1)}$ (denoted by δu_k in the following to alleviate the notations) of order k is known. Thus, a new approximation of $u^{(n+1)}$ can be defined as:

$$u^{(n+1)} \approx u_{k+1}^{(n+1)} = u^{(n)} + \delta u_k^{(n+1)} + \Phi\lambda = u^{(n)} + \delta u_{k+1}^{(n+1)} \tag{7}$$

The progressive definition of a new couple $(\Phi, \lambda) \in \mathcal{V} \otimes \mathcal{P}$ is defined as the one that verifies the following Galerkin orthogonality condition :

$$\forall \lambda^* \in \mathcal{V}, \forall \lambda^* \in \mathcal{P},$$
$$\int_{\mathcal{D}} a(\delta u_k + \Phi\lambda, \Phi\lambda^* + \Phi^*\lambda)\,\mathrm{d}\mu + \int_{\mathcal{D}\times\Omega} \mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{\mu})(\delta u_k + \Phi\lambda)(\Phi\lambda^* + \Phi^*\lambda)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu = \ldots$$
$$\ldots - \int_{\mathcal{D}} \mathcal{R}(u^{(n)}, \Phi\lambda^* + \Phi^*\lambda;\boldsymbol{\mu})\,\mathrm{d}\mu \quad (8)$$

That is to say:

$$\forall \Phi^* \in \mathcal{V}, \forall \lambda^* \in \mathcal{P},$$
$$\int_{\mathcal{D}} a(\Phi\lambda, \Phi\lambda^* + \Phi^*\lambda)\,\mathrm{d}\mu + \int_{\mathcal{D}\times\Omega} \mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{\mu})\ \Phi\lambda\ (\Phi\lambda^* + \Phi^*\lambda)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu = \ldots$$
$$\ldots - \int_{\mathcal{D}} \breve{\mathcal{R}}(u^{(n)}, \delta u_k, \Phi\lambda^* + \Phi^*\lambda;\boldsymbol{\mu})\,\mathrm{d}\mu \quad (9)$$

where :

$$\begin{cases} \breve{\mathcal{R}}(u^{(n)}, \delta u_k, v;\boldsymbol{\mu}) &= \mathcal{R}(u^{(n)}, v;\boldsymbol{\mu}) + a(\delta u_k, v) + \displaystyle\int_\Omega \mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{\mu})\ \delta u_k\ v\,\mathrm{d}x \\ \\ \mathcal{R}(u^{(n)}, v;\boldsymbol{\mu}) &= a(u^{(n)}, v)\ -\ \displaystyle\int_\Omega f(\boldsymbol{x})\ v\ \mathrm{d}x\ +\ \int_\Omega g(u^{(n)};\boldsymbol{\mu})\ v\ \mathrm{d}x \end{cases}$$

The two following mappings are introduced:

Definition 1 (Space function mapping). *$S_{k+1} : \mathcal{P} \to \mathcal{V}$ is the application that maps a parameter function $\lambda \in \mathcal{P}$ into a space function $\Phi = S_{k+1}(\lambda) \in \mathcal{V}$ is defined as follows:*

$$\forall \Phi^* \in \mathcal{V},$$
$$a(\Phi, \Phi^*)\left(\int_{\mathcal{D}} \lambda^2\,\mathrm{d}\mu\right) + \int_{\mathcal{D}\times\Omega} \lambda\Phi\ \mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{\mu})\,\Phi^*\lambda\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu = -\int_{\mathcal{D}} \breve{\mathcal{R}}(u^{(n)}, \delta u_k, \Phi^*\lambda;\boldsymbol{\mu})\,\mathrm{d}\mu \quad (10)$$

Definition 2 (Parameter function mapping). *$P_{k+1} : \mathcal{V} \to \mathcal{P}$ is the application that maps a space function $\Phi \in \mathcal{V}$ into a parameter function $\lambda = P_{k+1}(\Phi) \in \mathcal{P}$ is defined as follows:*

$$\forall \lambda^* \in \mathcal{P},$$
$$a(\Phi, \Phi)\left(\int_{\mathcal{D}} \lambda\,\lambda^*\,\mathrm{d}\mu\right) + \int_{\mathcal{D}\times\Omega} \lambda\Phi\ \mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{\mu})\,\Phi\lambda^*\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu = -\int_{\mathcal{D}} \breve{\mathcal{R}}(u^{(n)}, \delta u_k, \Phi\lambda^*;\boldsymbol{\mu})\,\mathrm{d}\mu \quad (11)$$

Definition 3 (Progressive Galerkin PGD). *A couple $(\Phi, \lambda) \in \mathcal{V} \otimes \mathcal{P}$ verifies (8) if and only if $\Phi = S_{k+1}(\lambda)$ and $\lambda = P_{k+1}(\Phi)$, i.e. $\Phi = S_{k+1}(\lambda)$ and λ (resp. $\lambda = P_{k+1}(\Phi)$ and Φ) is a fixed point of mapping $G_{k+1} = P_{k+1} \circ S_{k+1}$ with $\lambda = G_{k+1}(\lambda)$ (resp. $G'_{k+1} = S_{k+1} \circ P_{k+1}$ with $\Phi = G'_{k+1}(\Phi)$).*

A power iterations algorithm that iteratively generates parameter function λ and space function Φ is used as shown in **Algorithm 1**. The interested reader could refer to [29, 22, 43] for further details. Once this new pair of parameter and space functions is computed, the $(k+1)^{th}$ space function is orthogonalized and added to the reduced-basis to form $\mathcal{W}_{k+1}$. In practice, only one new PGD pair is added per LATIN iteration to approximate correction $\delta u^{(n+1)}$ but nothing prevents one to generate more than one.

Algorithm 1 Progressive PGD to generate the $(k+1)^{th}$ new PGD pair (Power iterations algorithm)

1: $\lambda \leftarrow \lambda^{(0)}$ ▷ Initialize parameter function, e.g. $\lambda^{(0)} = a\mu_1 + b\mu_2$ with $(a,b) \in \mathbb{R}^2$
2: **for** $l = 1$ to l_{max} **do**
3: Compute $\Phi = S_{k+1}(\lambda)$ ▷ Solve problem of **Definition 1**
4: Normalize Φ
5: Compute $\lambda = P_{k+1}(\Phi)$ ▷ Solve problem of **Definition 2**
6: Check stagnation of λ ▷ Use for instance the $L^2(\mathcal{D})$ norm
7: **end for**
8: $\Phi_{k+1} \leftarrow \Phi$ and $\lambda_{k+1} \leftarrow \lambda$

The final algorithm of the LATIN-PGD nonlinear solution strategy is finally given in **Algorithm 2** of **Appendix B**.

Remark 1. *In the case of high-dimensional parametric models, different update strategies can be proposed [30]. More precisely, for a large number r of parameters* $(\boldsymbol{\mu}_1, ..., \boldsymbol{\mu}_r)$*, a separated variables representation of the solution under the form* $u(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}_1, \ldots, \boldsymbol{\mu}_r) \approx \sum_{i=1}^{k} \Phi_i(\boldsymbol{x}) \lambda_i^1(\boldsymbol{\mu}_1) ... \lambda_i^r(\boldsymbol{\mu}_r)$ *can be proposed similarly to* (1) *(see for instance [20]). Among others, a possible strategy consists in successive updates of the k functions* $\{\lambda_i^l\}_{1 \leqslant i \leqslant k}$ *along each selected dimension l according to a particular sequence [30]. In this case, the update of the k functions* $\{\lambda_i^l\}_{1 \leqslant i \leqslant k}$ *for a given dimension l with* $\lambda_i^l \in \mathcal{P}_l$ *can be stated as* ***Problem 4*** *whose dimension is* $k \times dim(\mathcal{P}_l)$*. Obviously, the updating step along a particular dimension l is affordable provided that* $dim(\mathcal{P}_l)$ *is reasonably small.*

2.3. Bottleneck of nonlinear model reduction – A brief complexity analysis

In order to illustrate the bottleneck of nonlinear model reduction and to explain why the construction of the reduced-order model involved during the preliminary step is CPU intensive, let come back to **Problem 4** solved at the preliminary step. By introducing a finite element approximation space $\mathcal{V}_h \in \mathcal{V}$, with:

$$\mathcal{V}_h = \left\{ v(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{N} v^i \varphi_i(\boldsymbol{x});\ \varphi_i \in \mathcal{V}, v^i \in \mathbb{R} \right\} \tag{12}$$

a space function $\Phi_i(\boldsymbol{x})$ can be approximated as follows : $\Phi_i(\boldsymbol{x}) \approx \sum_{j=1}^{N} \Phi_i^j \varphi_j(\boldsymbol{x}) = \Phi_i^j \varphi_j$ in indicial notation where repeated indices are summed over their range. Thus (4) can be discretized as follows:

$$1 \leqslant j \leqslant k,\ \forall\, \lambda^* \in \mathcal{P},$$
$$\sum_{i=1}^{k} \int_{\mathcal{D}} \lambda^*(\boldsymbol{\mu}) \left(\Phi_i^l\ \mathbf{A}_{lm}\ \Phi_j^m + \Phi_i^r\ \boldsymbol{G}_{rs}(u^{(n)}; \boldsymbol{\mu})\ \Phi_j^s \right) \delta\lambda_i(\boldsymbol{\mu})\ \mathrm{d}\mu = - \int_{\mathcal{D}} \lambda^*(\boldsymbol{\mu})\ \boldsymbol{R}_t(\boldsymbol{\mu})\ \Phi_j^t\ \mathrm{d}\mu \tag{13}$$

or:

$$1 \leqslant j \leqslant k,\ \forall\, \lambda^* \in \mathcal{P},$$
$$\sum_{i=1}^{k} \underbrace{\left(\Phi_i^l\ \mathbf{A}_{lm}\ \Phi_j^m \right) \left(\int_{\mathcal{D}} \lambda^*(\boldsymbol{\mu})\ \delta\lambda_i(\boldsymbol{\mu})\ \mathrm{d}\mu \right)}_{\text{First term}} + \underbrace{\Phi_i^r \left(\int_{\mathcal{D}} \lambda^*(\boldsymbol{\mu})\ \boldsymbol{G}_{rs}(u^{(n)}; \boldsymbol{\mu})\ \delta\lambda_i(\boldsymbol{\mu})\ \mathrm{d}\mu \right) \Phi_j^s}_{\text{Second term}} = \ldots$$
$$\ldots - \Phi_j^t \int_{\mathcal{D}} \lambda^*(\boldsymbol{\mu})\ \boldsymbol{R}_t(\boldsymbol{\mu})\ \mathrm{d}\mu \tag{14}$$

where $\mathbf{A}$ and $\boldsymbol{G}$ are $N \times N$ matrices whose entries are defined by :

$$\mathbf{A}_{ij} = a(\varphi_i, \varphi_j) \quad \text{and} \quad \boldsymbol{G}_{ij} = \int_\Omega \varphi_i \, \mathbf{H}^- \left(u^{(n)}; \boldsymbol{\mu} \right) \varphi_j \, \mathrm{d}x$$

Elements of the N-length vector $\boldsymbol{R}$ are given by: $\boldsymbol{R}_i = -\mathcal{R}(u^{(n)}, \varphi_i; \boldsymbol{\mu})$.

If a finite element approximation space $\mathcal{P}_h \in \mathcal{P}$ is now introduced, with:

$$\mathcal{P}_h = \left\{ \lambda(\boldsymbol{\mu}) = \sum_{i=1}^{p} \lambda^i \xi_i(\boldsymbol{\mu}); \; \xi_i \in \mathcal{P}, \lambda^i \in \mathbb{R} \right\} \tag{15}$$

a parameter function $\lambda_i(\boldsymbol{\mu})$ can be approximated as follows : $\lambda_i(\boldsymbol{\mu}) \approx \sum_{j=1}^{p} \lambda_i^j \xi_j(\boldsymbol{\mu}) = \lambda_i^j \xi_j$. By denoted by $[\Phi_i] \in \mathbb{R}^N$ (resp. $[\lambda_i] \in \mathbb{R}^p$) the nodal vector associated with the discretization of space function Φ_i (resp. parameter function λ_i) and by $\boldsymbol{W}_k = [[\Phi_1][\Phi_2] \dots [\Phi_k]]$ the $N \times k$ matrix of the discretized $k-$order reduced basis, the sum over i of first terms in (14) gives:

$$\left[\left(\underbrace{\boldsymbol{W}_k^T}_{k \times N} \underbrace{\mathbf{A}}_{N \times N} \underbrace{\boldsymbol{W}_k}_{N \times k} \right) \otimes \underbrace{\boldsymbol{M}}_{p \times p} \right] \underbrace{\begin{pmatrix} [\delta\lambda_1] \\ [\delta\lambda_2] \\ \vdots \\ [\delta\lambda_k] \end{pmatrix}}_{pk \times 1} \tag{16}$$

where $\otimes$ denotes the tensor product of matrices (Kronecker product) and $\boldsymbol{M}$ is a $p \times p$ matrix whose entries are defined by $\boldsymbol{M}_{ij} = \int_{\mathcal{D}} \xi_i \, \xi_j \, \mathrm{d}\mu$.

Projection of discretized operator $\mathbf{A}$ onto the discretized reduced-order basis $\boldsymbol{W}_k$ involves two matrix-matrix products resulting into a computational complexity that scales with $\mathcal{O}(Nk)$ (resp. $\mathcal{O}(N^2 \; k)$) if $\mathbf{A}$ is sparse (resp. full) to compute $\mathbf{A}\boldsymbol{W}_k$ and $\mathcal{O}(Nk^2)$ for left multiplication by $\boldsymbol{W}_k^T$. Complexity for evaluating tensor product is $\mathcal{O}(pk^2)$ if $\boldsymbol{M}$ is sparse. Thus, computational complexity for computing the $kp \times kp$ matrix $\left(\boldsymbol{W}_k^T \mathbf{A} \boldsymbol{W}_k\right) \otimes \boldsymbol{M}$ is $\mathcal{O}(Nk + Nk^2 + pk^2)$ (resp. $\mathcal{O}(N^2k + Nk^2 + p^2k^2)$) if $\mathbf{A}$ is sparse (resp. full). Since discretized operator $\mathbf{A}$ is parameter-independent, separation of variables is possible to compute the integrals over the space-parameter domain (Kronecker product). Consequently, provided that the ROB does not evolve, the $k \times k$ matrix $\boldsymbol{W}_k^T \mathbf{A} \boldsymbol{W}_k$ can be pre-computed and factorized, if needed, offline. This is the reason why model reduction techniques are particularly efficient and appealing for parametrized time-invariant systems [4] or linear stationary and quasi-stationary systems whose operators are affine functions of the input parameters [16].

On the contrary, the parameter-dependency of the discretized operator $\boldsymbol{G}$ in the second term of (14) prevents the separation of integrals. Separation of the operator as a tensor product is not straightforward. Moreover, it has to be evaluated for each new iterate $u^{(n)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu})$ at a computational complexity of $\mathcal{O}(pNk^2)$ (resp. $\mathcal{O}(pN^2k)$) if the discretized operator is sparse (resp. full) [15, 35]. One can also show that complexity for evaluating nonlinear residue (right-hand side member of (14)) is $\mathcal{O}(pNk)$. In short, the expected decrease in computational cost by using reduced-basis approximation is consequently quite modest whatever the dimension reduction $k \ll N$ is.

This bottleneck is clearly not specific to PGD-based model reduction but more generally to reduced-basis approximation in nonlinear model reduction. This problem arises due to the fact that: (i) Galerkin projection onto the ROB has to be performed as soon as the reduced-order basis evolves, (ii) non-linear terms (Jacobian and residue) have to be evaluated at each iteration of the solution strategy for each new iterate which prevents pre-computations of operators. Many works have already been done to tackle this issue as discussed in the introduction.

3. The Reference Point Method

The goal of the Reference Point Method described in this section, is to decrease the computational cost of integrals arising from Galerkin projection. For that two main features are introduced: (i) an approximation framework with the introduction of reference points to simplify the evaluation of integrands, (ii) a low-cost technique to reconstruct by explicit formulas an approximate low-rank separated representation by patch of operators without resorting to SVD-based techniques, which is a great advantage regarding integral computation by separation of variables. The motivations of the proposed technique are first presented in **Section 3.1**. The basics of the Reference Point Method are given in **Section 3.2** before being applied to **Problem 1** in **Section 3.3.1**. A brief computational complexity analysis is proposed in **Section 3.3.2** to estimate the expected gain in computational cost.

3.1. Motivations

Among the techniques introduced to tackle the aforementioned bottleneck, the Empirical Interpolation Method (EIM) [33] is probably one of the most popular. It proposes an inexpensive interpolation procedure of nonlinear terms based on the offline construction of a suitable additional reduced-basis approximation space. More precisely, EIM enables to provide an approximation of nonlinear function g as follows:

$$g(u^{(n)};\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu}) \approx g_M(u^{(n)};\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu}) = \sum_{m=1}^{M} \varphi_m^M(\boldsymbol{\mu})\, q_m(\boldsymbol{x}) \tag{17}$$

where M (with $M \ll N,p$) interpolation "Magic" points $\{\boldsymbol{x}_m^M\}_{1\leqslant m\leqslant M}$ of the space domain and M "Magic" points of the parameter domain $\{\boldsymbol{\mu}_m^M\}_{1\leqslant m\leqslant M}$ are computed by a greedy selection process in order to build the M interpolation functions $\{q_m(\boldsymbol{x})\}_{1\leqslant m\leqslant M}$ during an offline stage. For each iterate $u^{(n)}$, coefficient functions $\{\varphi_m^M(\boldsymbol{\mu})\}_{1\leqslant m\leqslant M}$ have to be updated online for the reduced-order model of $u^{(n)}$ evaluated at interpolation "Magic" points $\{\boldsymbol{x}_m^M\}_{1\leqslant m\leqslant M}$. Note that, according to [15], approximation function g_M is interpolant at the "Magic" spatial points, i.e. $g(u^{(n)};\boldsymbol{x}_m^M,\boldsymbol{\mu}) = g_M(u^{(n)};\boldsymbol{x}_m^M,\boldsymbol{\mu})$ for $1 \leqslant m \leqslant M$.

Let consider **Problem 4** involved at the preliminary step, which is nothing more than an update of the reduced model from the current ROB. Thanks to EIM, tangent operator can be approximated as follows:

$$\mathbf{H}^{-}(u^{(n)};\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu}) = \left.\frac{\partial g(u;\boldsymbol{\mu})}{\partial u}\right|_{u=u^{(n)}} \approx \mathbf{H}_M^{-}(u^{(n)};\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu}) = \sum_{m=1}^{M} \bar{\varphi}_m^M(\boldsymbol{\mu})\, q_m(\boldsymbol{x}) \tag{18}$$

where $\bar{\varphi}_m^M$ is the partial derivative of φ_m^M with respect to argument $\boldsymbol{\mu}$. Approximation of residue $\mathcal{R}$ with EIM is done accordingly but not detailed hereafter. Interested reader can refer to [15] for further details. Thus, (4) can be approximated with EIM as follows:

$$1 \leqslant j \leqslant k,\ \forall\, \lambda^* \in \mathcal{P},$$
$$\sum_{i=1}^{k} \int_{\mathcal{D}} \lambda^* \left(a(\Phi_i,\Phi_j) + \sum_{m=1}^{M} \bar{\varphi}_m^M(\boldsymbol{\mu}) \left(\int_{\Omega} \Phi_i\ q_m(\boldsymbol{x})\ \Phi_j\ \mathrm{d}x \right) \right) \delta\lambda_i\, \mathrm{d}\mu = -\int_{\mathcal{D}} \lambda^*\, \mathcal{R}(u^{(n)},\Phi_j;\boldsymbol{\mu})\, \mathrm{d}\mu \tag{}$$

Provided that the M functions $\{q_m(\boldsymbol{x})\}_{1\leqslant m\leqslant M}$ and reduced-order basis $\mathcal{W}_k = \{\Phi_i\}_{i=1\leqslant i\leqslant k}$ are known, terms $a(\Phi_i,\Phi_j)$ and $\int_\Omega\ \Phi_i\ q_m(\boldsymbol{x})\ \Phi_j\ \mathrm{d}x$ are parameter-independent and thus can be precomputed. In this case, it is shown in [15] that the computational complexity at each iteration for the Galerkin projection (resp. the determination of coefficient functions $\{\varphi_m^M(\boldsymbol{\mu})\}_{1\leqslant m\leqslant M}$) is

$\mathcal{O}(k^2M)$ (resp. $\mathcal{O}(M^2)$). Since $M, k \ll N$, the online complexity is consequently independent of N, the dimension of the underlying initial finite element approximation space.

EIM could be used to solve the preliminary step, however the fact that the ROB changes quite often throughout the iterations of the LATIN nonlinear solver makes of this technique less suitable. Indeed, for a fixed number M of best/magic interpolation points the error in the coefficient functions $\{\varphi_m^M(\boldsymbol{\mu})\}_{1\leqslant m\leqslant M}$ used to interpolate the nonlinear terms ultimately dominates when the size k of the ROB increases [15]. Adding more magic points may be necessary as long as the ROB evolves. Such an adaptative strategy could be derived but it may be not very efficient in this context, at least in the LATIN framework. Moreover, the determination of "Magic" parameter points $\{\boldsymbol{\mu}_m^M\}_{1\leqslant m\leqslant M}$ may be costly particularly for applications where nonlinear function g is time-dependent as for parabolic parametrized problem [15] or implicitly dependent to the field variable u for nonlinear problem as it is the case here.

The RPM proposes a more pragmatic approach. It is not based on the approximation of the nonlinear function g (i.e. tangent operator $\mathbf{H}^-$). On the contrary, it is rather an approximation technique of the integrals involved in the Galerkin projection similarly to quadrature techniques in classical finite element methods. More precisely, it aims to compute, at low-cost, each contribution to the ROM, i.e. each term/entry α_{ij}:

$$\alpha_{ij} = \int_{\mathcal{D}\times\Omega} \lambda^*(\boldsymbol{\mu})\, \Phi_i(\boldsymbol{x})\, \mathbf{H}^-(u^{(n)}; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu})\, \Phi_j(\boldsymbol{x})\, \delta\lambda_i(\boldsymbol{\mu})\, \mathrm{d}x\, \mathrm{d}\mu, \quad 1 \leqslant i, j \leqslant k \tag{20}$$

where repeated indices are not summed over their range. It is worth noting at the fact that RPM is used at each iteration of the LATIN method only to solve the preliminary step. Even though the integral computations are not enough accurate, the PGD-model reduction technique can improve it by adding new correction functions to the ROB throughout the LATIN iterations, which ensures the convergence of the whole process.

3.2. Basics of the RPM

The RPM aims at constructing an approximate low-rank separated representation by patch of integrand in (20). In this section, two main features are introduced: (i) an approximation framework with the introduction of reference points (see **Section 3.2.1**) to simplify the evaluation of integrands (see **Section 3.2.2**), (ii) a low-cost technique to reconstruct by explicit formulas an approximate low-rank separated representation by patch of integrands (see **Section 3.2.3**).

Integrand of (20) involves the product of several operands: the nonlinear function $\mathbf{H}^-(u^{(n)}; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu})$ pre and post multiplied by the terms $\lambda^*(\boldsymbol{\mu})\Phi_i(\boldsymbol{x})$ and $\Phi_j(\boldsymbol{x})\delta\lambda_i(\boldsymbol{\mu})$. For the sake of clarity, instead of integrand of (20), let consider the product of two scalar functions depending on two variables. This simple example will be much more convenient to figure the approximation procedure:

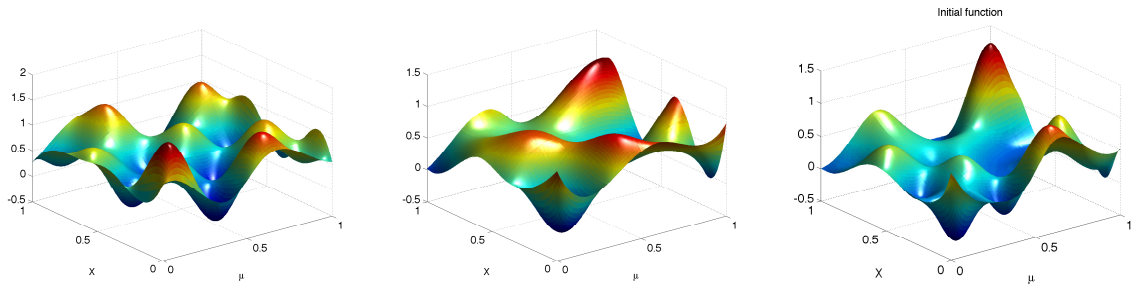
$$F(\mu, x) = f(\mu, x)\, f'(\mu, x) \tag{21}$$

where $f(\mu, x)$ and $f'(\mu, x)$ are two scalar functions of two variables, $\mu \in \mathcal{D} = [0, 1]$ and $x \in \Omega = [0, 1]$. An example of functions f and f' and their product F is given in **Figure 2**.

Let assume that f and f' are known under separated representation (even though separation property is not always satisfied for any quantity, like $\mathbf{H}^-$):

$$f(\mu, x) = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i(\mu)\Lambda_i(x) \qquad \text{and} \qquad f'(\mu, x) = \sum_{i=1}^{k'} \theta_i(\mu)\Theta_i(x). \tag{22}$$

Note that each evaluation of product F for a given value of x and μ involves $2(k + k') - 1$ multiplications and additions. If a separated representation of product F is needed – to benefit from



(a) Scalar function $f(\mu, x)$ (b) Scalar function $f'(\mu, x)$ (c) Product $F(\mu, x) = f(\mu, x)f'(\mu, x)$

Figure 2: Example of two scalar functions depending on two variables and their product

integral computation by separation of variables for instance – it would result into a M-term separated representation with $M = k \times k'$. This M-term representation is likely non-optimal and M may increase swiftly if terms are added to f and f' representations (k and k' increase). Performing a singular value decomposition of F may be necessary to achieve a separated representation of F with a reasonable number of terms. RPM follows a different path to avoid the artificial increasing of the number PGD modes. As described in the following, RPM enables one to build an approximate low-rank separated representation by patch of any quantity without resorting to SVD-based techniques.

3.2.1. Compressed format and generalized components

The RPM approximation framework is based on the concept of *reference points* and enables one to define a reduced representation of the data [40]. The parameter domain is split into m_μ sub-intervals $\mathcal{D}_i$ of size $\Delta\mu_i$. The center μ_i of sub-interval $\mathcal{D}_i$ is called *parameter reference point*. For the space domain, m_x points x_j are introduced and the domain Ω is divided into m_x sub-domains Ω_j of size $\Delta\omega_j$. The points x_j are called *spatial reference points*. These reference points are arbitrary and can be chosen independently of discretization spaces for unknown quantities (**Figure 3**).

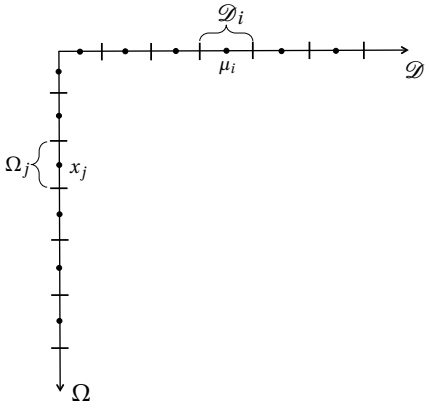


Figure 3: Parameter and spatial reference points for parameter domain $\mathcal{D} = [0, 1]$ and spatial domain $\Omega = [0, 1]$

An influence zone is defined around each reference point of the space-parameter domain defined by the coordinates of the spatial reference points x_j and parameter reference points μ_i. Part of the domain, $\mathcal{D}_i \times \Omega_j$, is called reference patch (i, j). Thus, the entire domain $\mathcal{D} \times \Omega$ is divided into $m_\mu \times m_x$ patches.

A function f defined on the domain $\mathcal{D} \times \Omega$ is represented by its *generalized components*, $\bar{f} :=$

$\{(\bar{a}_{ij}, \bar{b}_{ij})\}$, defined as follows. For $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ and $1 \leqslant j \leqslant m_x$:

$$\bar{f} := \left\{ \begin{array}{rclcl|rclcl} \bar{a}_{ij}(\mu) & = & f(\mu, x_j) & \text{if } \mu \in \mathcal{D}_i & | & \bar{b}_{ij}(x) & = & f(\mu_i, x) & \text{if } x \in \Omega_j \\ \bar{a}_{ij}(\mu) & = & 0 & \text{otherwise} & | & \bar{b}_{ij}(x) & = & 0 & \text{otherwise} \end{array} \right\} \tag{23}$$

The generalized components $\{\bar{a}_{ij}(\mu)\}_{i=1,...,m_\mu}$ related to spatial reference point x_j gives the description of function f at spatial point x_j over the entire parameter domain $\mathcal{D}$. Similarly, the generalized components $\{\bar{b}_{ij}(x)\}_{i=1,...,m_x}$ related to parameter value μ_i gives the description of function f at parameter value μ_i over the entire spatial domain Ω. Note that by construction, for $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ and $1 \leqslant j \leqslant m_x$:

$$\bar{a}_{ij}(\mu_i) = \bar{b}_{ij}(x_j) \tag{24}$$

If function f is expressed under separated representation, each pair of functions is described by their generalized components. Hence, for $f(\mu, x) = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i(\mu)\Lambda_i(x)$, it yields: for $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ and $1 \leqslant j \leqslant m_x$:

$$\bar{f} := \left\{ \begin{array}{lll|lll} \bar{a}_{ij}(\mu) = \sum_{l=1}^{k} \lambda_l(\mu)\Lambda_l(x_j) & \text{if } \mu \in \mathcal{D}_i & | \; \bar{b}_{ij}(x) = \sum_{l=1}^{k} \lambda_l(\mu_i)\Lambda_l(x) & \text{if } x \in \Omega_j \\ \bar{a}_{ij}(\mu) = 0 & \text{otherwise} & | \; \bar{b}_{ij}(x) = 0 & \text{otherwise} \end{array} \right\} \tag{25}$$

In a sense, generalized components provide a kind of *compressed format* of the quantities. **Figure 4** depicts surfaces defined by functions f and f' and their generalized components when $m_\mu = 10$ and $m_x = 10$. In this case, for a two-dimensional function, a generalized component associated with a spatial or parameter reference point is a quantity defined on a line. For higher dimensions, it corresponds more generally to hyperplanes, hypersurfaces or submanifolds of the domain accordingly. Some patches for functions f and f' are depicted in **Figure 6**. In two dimensions, these patches can be easily represented. In 3D, patches become volumes. For a scalar function of three variables ($f(\mu, \boldsymbol{x})$ with $\boldsymbol{x} = (X, Y)$), a patch (i, j) becomes a parallelepiped, generalized space components $\bar{b}_{ij}(\boldsymbol{x})$ are snapshots of the two-dimensional spatial solution for a given value of parameter μ_i and generalized parameter components $\bar{a}_{ij}(\mu)$ are lines (**Figure 5**).

The algorithm that partitions the domain into patches for an arbitrary number of reference points for each coordinate, can easily takes into account the geometry (holes, corners...) of the spatial domain by moving some spatial reference points where functions are not defined and by slightly adapting the patches according to the space domain geometry (**Figure 7**).

Remark 2. *For a multivariable function $f(\mu^1, ..., \mu^r, x)$, m_l reference points along a given dimension l can be introduced. The domain $\mathcal{D}_1 \times ... \times \mathcal{D}_r \times \Omega$ is divided into $m_{\mu^1} \times ... \times m_{\mu^r} \times m_x$ patches. The definition of a reference patch $(i_{\mu^1}, ..., i_{\mu^r}, j)$ with $1 \leqslant i_{\mu^l} \leqslant m_{\mu^l}$ and $1 \leqslant j \leqslant m_x$ defined on the part of the domain $\mathcal{D}_{i_{\mu^1}} \times ... \times \mathcal{D}_{i_{\mu^r}} \times \Omega_j$ and the definition of the generalized components similarly to* (23) *are straightforward.*

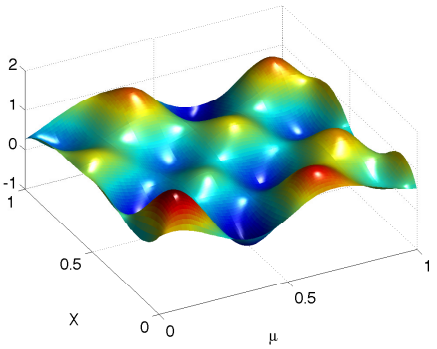
3.2.2. Algebra in the compressed framework

It is straightforward to show that the RPM framework shows interesting properties regarding elementary operations on quantities represented under their compressed formats (see **Table 1**). For instance, **Figure 8** illustrates the evaluation of the product F of two functions f and f' (see

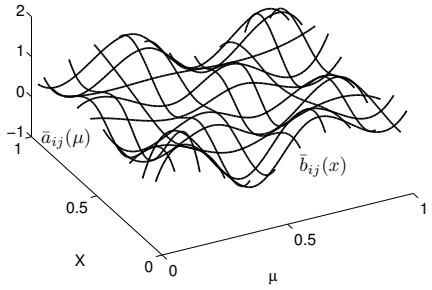
Addition	$\overline{f + f'}$	$=$	$\bar{f} + \bar{f}'$
Multiplication	$\overline{f\ f'}$	$=$	$\bar{f}\ \bar{f}'$
Derivative	$\overline{\partial f/\partial\mu}$	$=$	$\partial\bar{f}/\partial\mu$
Operator	$\overline{H\ f}$	$=$	$\bar{H}\ \bar{f}$

Table 1: Elementary operations in the compressed framework

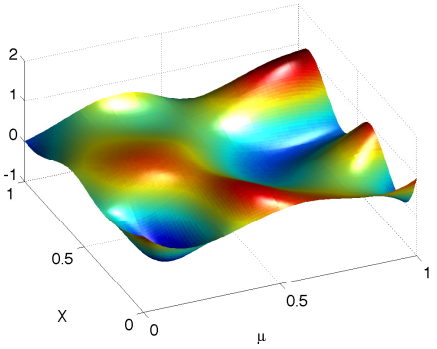
(21)) under their compressed formats. In order to evaluate the product all over the domain, a reconstruction of the product from the generalized components $\bar{F}$ of F has to be proposed as described in the following section.



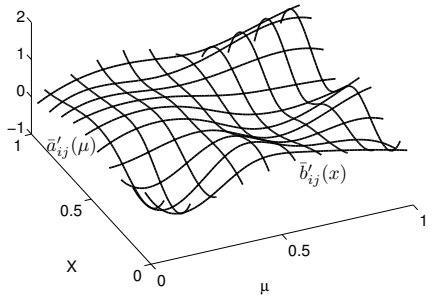
(a) Function $f(\mu, x)$



(b) Generalized components $\bar{f}$ of function $f(\mu, x)$

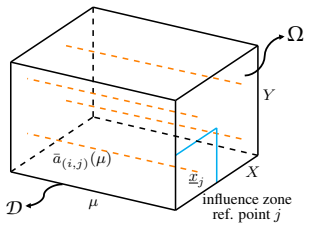


(c) Function $f'(\mu, x)$

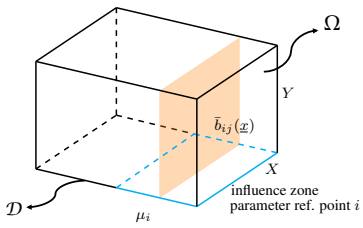


(d) Generalized components $\bar{f}'$ of function $f'(\mu, x)$

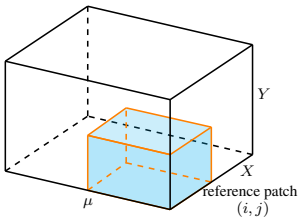
Figure 4: Generalized components of functions f and f' for $m_\mu = 10$ and $m_x = 10$



(a) Generalized parameter component $\bar{a}_{ij}(\mu)$ related to a spatial point x_j



(b) Generalized spatial component $\bar{b}_{ij}(\boldsymbol{x})$ related to parameter value μ_i



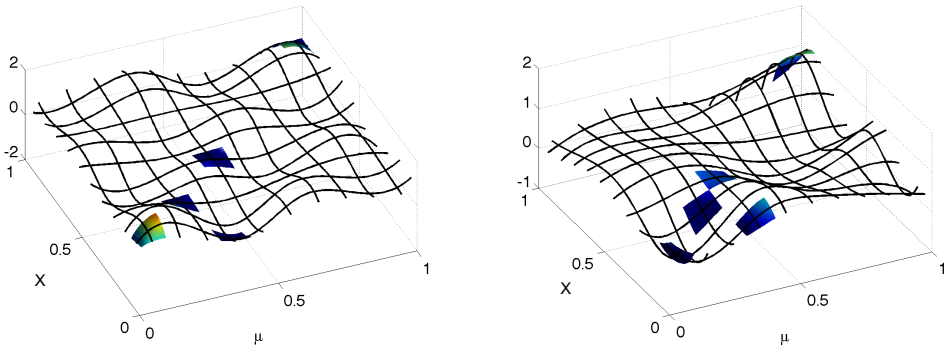
(c) Patch (i, j)

Figure 5: Generalized components and patch (i, j) for a scalar function of three variables ($f(\mu, \boldsymbol{x})$ with $\boldsymbol{x} = (X, Y)$)

3.2.3. Reconstruction of a low-rank separated representation by patch

In this section, the reconstruction procedure of a rank-one separated representation by patch of F is shown. Denoted by $\bar{\bar{F}}$, this reconstruction is obtained from the compressed format $\bar{F}$ by generating one product of functions per space-parameter patch $\mathcal{D}_i \times \Omega_j$: for $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ and $1 \leqslant j \leqslant m_x$:

$$\forall (\mu, x) \in \mathcal{D}_i \times \Omega_j, \quad F(\mu, x) \approx \bar{\bar{F}}(\mu, x) = a_{ij}(\mu)\, b_{ij}(x) \tag{26}$$



(a) Some patches for function $f(\mu, x)$ (b) Some patches for function $f'(\mu, x)$

Figure 6: Some of the space-parameter patches $\mathcal{D}_i \times \Omega_j$ of functions f and f' for $m_\mu = 10$ and $m_x = 10$

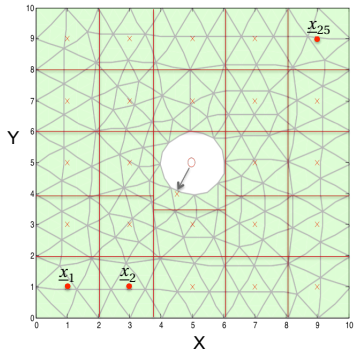


Figure 7: Correction of a spatial reference point located in a hole for a two-dimensional spatial domain and adaptation of the patches

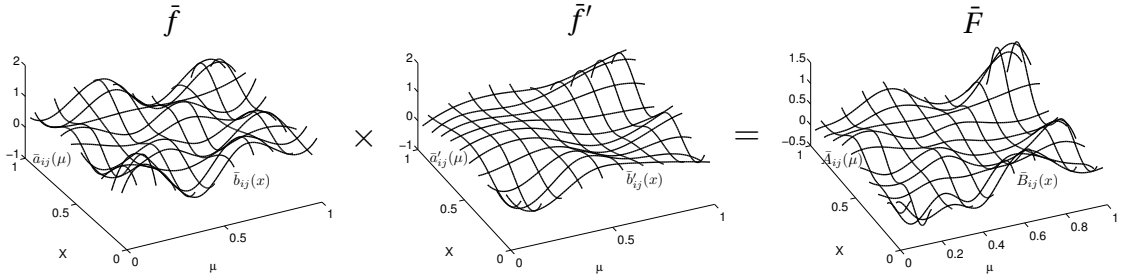


Figure 8: Compressed format $\bar{F} = \bar{f}\,\bar{f}'$ of product $F = f\,f'$

where products of functions $a_{ij}(\mu)b_{ij}(x)$ defined on each patch $\mathcal{D}_i \times \Omega_j$ are determined from the generalized components $\{(\bar{A}_{ij}(\mu), \bar{B}_{ij}(x))\}$ of $\bar{F}$ thanks to the minimization of the following functional:

$$1 \leqslant i \leqslant m_\mu,$$

$$J(\{(a_{ij}, b_{ij})\}_{1 \leqslant j \leqslant m_x}) = \sum_{k=1}^{m_x} \left[\Delta\omega_k \|(\bar{A}_{ik}(\mu) - a_{ik}(\mu)b_{ik}(x_k))\ \lambda_{ik}\|^2_{\mathcal{D}_i} + \Delta\mu_i \|\bar{B}_{ik}(x) - a_{ik}(\mu_i)b_{ik}(x)\|^2_{\Omega_k}\right.$$

(

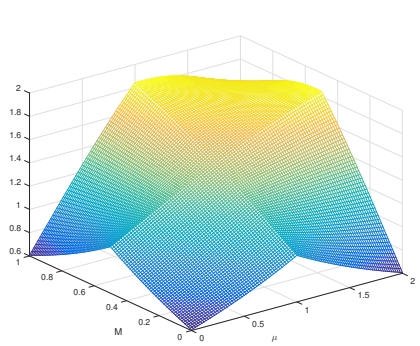
where $\|\cdot\|_{\mathcal{D}_i}$ and $\|\cdot\|_{\Omega_j}$ are the classical $L^2(\mathcal{D}_i)$ and $L^2(\Omega_j)$ norms. Term λ_{ik} is an influence coefficient which gives more importance to the neighboring patches of patch $\mathcal{D}_i \times \Omega_k$ along space coordinate. This functional measures the distance between the patch reconstruction and the generalized components. Minimization of functional (27) (see **Appendix C**) leads to the following explicit formulas: for $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ and $1 \leqslant j \leqslant m_x$:

$$a_{ij}(\mu) = \frac{\sum_{k=1}^{m_x} \Delta\omega_k \ \bar{A}_{ik}(\mu) \ \bar{A}_{ik}(\mu_i) \ \lambda_{ik}^2}{\sum_{k=1}^{m_x} \Delta\omega_k \ \bar{A}_{ik}(\mu_i)^2 \ \lambda_{ik}^2} \qquad \text{and} \qquad b_{ij}(x) = \bar{B}_{ij}(x) \tag{28}$$

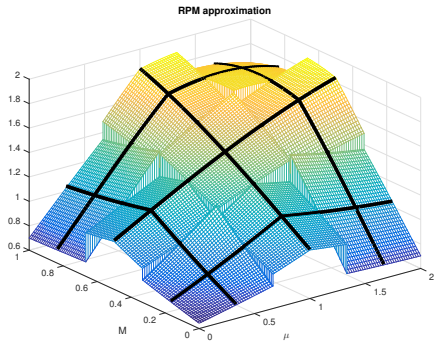
It can be noticed that space dimension and parameter dimension are not equally treated. Indeed, space domain is favored by holding all the information arising from the spatial generalized component $\bar{B}_{ij}(x)$. As illustrated on **Figure 9**, one can also see that: for $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ and $1 \leqslant j \leqslant m_x$:

$$\forall x \in \Omega, \quad \bar{\bar{F}}(x, \mu_i) \ = \ \bar{B}_{ij}(x)$$

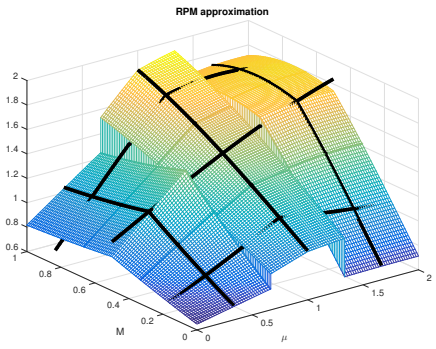
This choice is suitable for structural mechanics where the spatial gradients of quantities are usually stronger than their variations in parameter (or time) variable. Influence coefficients λ_{ik} have an influence on parameter function $a_{ij}(\mu)$ by weighting the values $\bar{A}_{ik}(\mu_i)$ $(= \bar{B}_{ik}(x_k)$ due to (24)) at the center of patches along space coordinate.



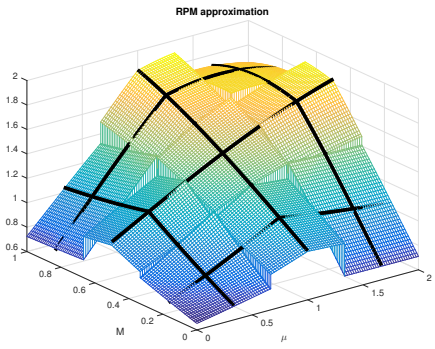
(a) Function F_1



(b) Independent minimizations by patch, $\lambda_{ik} = \delta_{ik}$ $(e = 2.08\%)$



(c) Uniform value, $\lambda_{ik} = 1$ $(e = 3.18\%)$



(d) Optimized value given by (31) $(e = 2.00\%)$

Figure 9: The function $F_1(x, \mu) = e^{-|(x-0.5)(\mu-1)|} + \sin(x\mu)$ and its approximation $\bar{\bar{F}}_1$ for $m_\mu = 3$ parameters and $m_x = 3$ spatial reference points and different choices of influence functions λ_{ik}

If one chooses $\lambda_{ik} = 1$ for $1 \leqslant k \leqslant m_x$ (uniform value), one obtains: for $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ and

$1 \leqslant j \leqslant m_x$:

$$a_{ij}(\mu) = \frac{\sum_{k=1}^{m_x} \Delta\omega_k \ \bar{A}_{ik}(\mu) \ \bar{A}_{ik}(\mu_i)}{\sum_{k=1}^{m_x} \Delta\omega_k \ \bar{A}_{ik}(\mu_i)^2} = \frac{\sum_{k=1}^{m_x} \Delta\omega_k \ \bar{A}_{ik}(\mu) \ \bar{B}_{ik}(x_k)}{\sum_{k=1}^{m_x} \Delta\omega_k \ \bar{B}_{ik}(x_k)^2} \qquad \text{and} \qquad b_{ij}(x) = \bar{B}_{ij}(x) \tag{29}$$

In this case, parameter functions $a_{ij}(\mu)$ are the same for any subdomain Ω_j for a given i. Reconstruction $\bar{\bar{F}}$ is continuous not only for $\mu = \mu_i$ but also for any $\mu \in \mathcal{D}_i$ with $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ (see **Figure 9(c)**). This may lead to high discontinuities between sub-intervals $\mathcal{D}_i$ if variations of product according to parameter variable are significant.

Another limit choice is to consider influence functions such that $\lambda_{ik} = 1$ only for $k = j$. This leads to minimizations by patch independent of each other and:

$$a_{ij}(\mu) = \frac{\bar{A}_{ij}(\mu)}{\bar{A}_{ij}(\mu_i)} = \frac{\bar{A}_{ij}(\mu)}{\bar{B}_{ij}(x_j)} \qquad \text{and} \qquad b_{ij}(x) = \bar{B}_{ij}(x) \tag{30}$$

Parameter function $a_{ij}(\mu)$ is normalized by the value $\bar{A}_{ij}(\mu_i) = \bar{B}_{ij}(x_j)$ (due to (24)) at the center of patch $\mathcal{D}_i \times \Omega_j$ and is consequently independent from one patch to another. Note that in this case, denominator of a_{ij} can be null and can lead to numerical difficulties. This may also happen for (28) and (29) but is by far less probable. In this situation, adding an appropriate constant value to generalized components before reconstruction and subtracting the same value subsequently to the reconstruction can easily palliate this issue. Reconstruction $\bar{\bar{F}}$ is discontinuous between sub-cells Ω_j for all $\mu \in \mathcal{D}_i$ except for $\mu = \mu_i$ with $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ (see **Figure 9(b)**).

An optimization of weight functions λ_{ik} with compact support along spatial coordinate between the two extreme situations leading to (29) (uniform weight) and (30) (independent minimizations by patch) has to be done according to the variations of the function F which is approximated by the RPM (see **Figure 9(d)**). For all the numerical examples presented hereafter, one chose for (28):

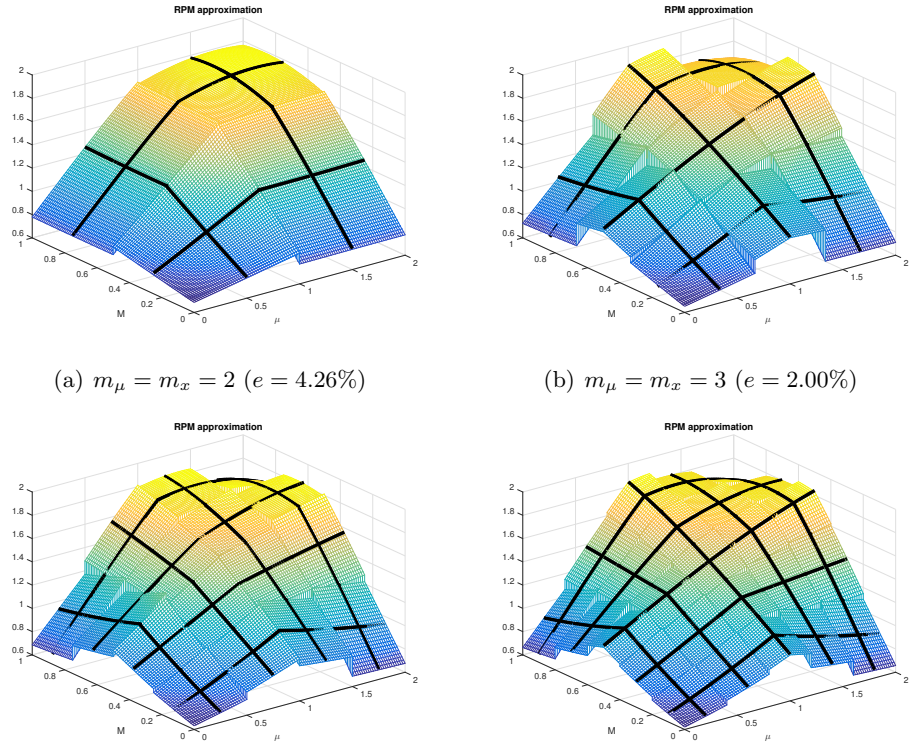
$$\lambda_{ik}^2 = \begin{cases} 1 & \text{if } k = j \\ 0.1 & \text{for } k = j-1 \text{ and } k = j+1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{31}$$

This optimized value of λ_{ik} has been obtained by numerical experiments and is suitable for most of the functions that have been tested in the present works. **Figure 10** shows different approximations $\bar{\bar{F}}_1$ of function $F_1(x,\mu) = e^{-|(x-0.5)(\mu-1)|} + \sin(x\mu)$ for increasing numbers of reference points and the optimized value of λ_{ik} given by (31).

The reconstruction of product F (see **Figure 2**) thanks to its generalized components depicted in **Figure 4** is shown in **Figure 11** for an arbitrary regular grid of $m_\mu = 10$ parameter reference points and $m_x = 10$ spatial reference points. This leads to an error of $e = 5\%$ with respect to the exact function F. Error e is defined as follows:

$$e = \frac{\|F - \bar{\bar{F}}\|_{\mathcal{D}\times\Omega}}{\|\bar{\bar{F}}\|_{\mathcal{D}\times\Omega}} \quad \text{with} \quad \|F\|_{\mathcal{D}\times\Omega}^2 = \int_{\mathcal{D}\times\Omega} F^2 \, dx \, d\mu = \sum_{i=1}^{m_\mu} \sum_{j=1}^{m_x} \int_{\mathcal{D}_i\times\Omega_j} F^2 \, dx \, d\mu \tag{32}$$

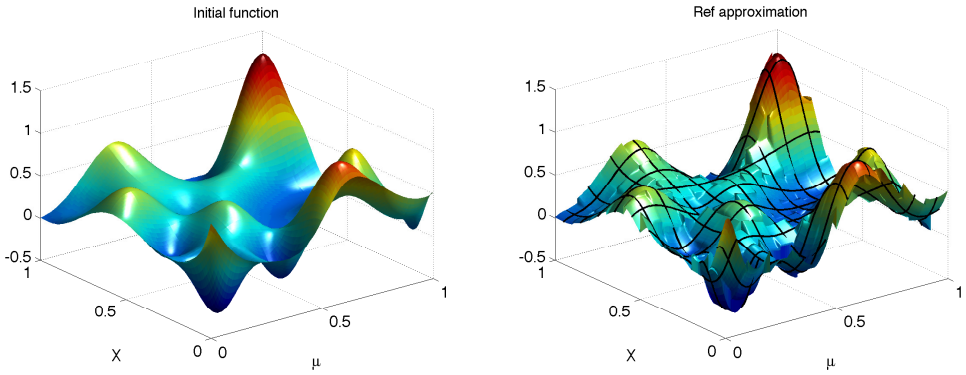
Remark 3. *Reconstruction $\bar{\bar{F}}$ of a separated representation by patch for a multivariable function $F(\mu^1, ..., \mu^r, x)$ needs further investigations. With notations of **Remark 2** and by introducing the $L^2(\mathcal{D}_{i_{\mu^l}})$ norm, $\|\cdot\|_{\mathcal{D}_{i_{\mu^l}}}$, for each sub-interval $\mathcal{D}_{i_{\mu^l}}$ of size $\Delta\mu_i^l$ associated with dimension l and variable μ^l, a functional similar to (27) can easily be defined. A definition that favors space domain (i.e. continuity in space variable x) and weak continuity from one patch to another according to other variables thanks to the introduction of influence/weight coefficients $\lambda_{i_{\mu^l}k}$ can similarly be considered. In this multivariable case, the choice of these coefficients is not obvious. An easy and straightforward choice is to consider the independent minimization by patch by considering that $\lambda_{i_{\mu^l}k} = \delta_{i_{\mu^l}k}$, leading to a simple explicit reconstruction similar to (30).*



(a) $m_\mu = m_x = 2$ ($e = 4.26\%$) (b) $m_\mu = m_x = 3$ ($e = 2.00\%$)

(c) $m_\mu = m_x = 4$ ($e = 1.24\%$) (d) $m_\mu = m_x = 5$ ($e = 0.77\%$)

Figure 10: Approximations $\bar{\bar{F}}_1$ of F_1 for increasing numbers of reference points and the optimized value of λ_{ik} given by (31)



(a) Function F (b) RPM Reconstruction $\bar{\bar{F}}$ ($e = 5\%$)

Figure 11: The function F and its approximation $\bar{\bar{F}}$ by $m_\mu = 10$ parameter and $m_x = 10$ spatial reference points

3.3. Integral computation by RPM

Once the low-rank separated representation by patch $\bar{\bar{F}}$ defined by (26) has been reconstructed to approximate function F thanks to explicit formulas (28), the integral of F over the space-parameter domain can be approximated as follows:

$$\int_{\mathcal{D}\times\Omega} F(\mu,x)\,dx\,d\mu = \sum_{i=1}^{m_\mu}\sum_{j=1}^{m_x}\int_{\mathcal{D}_i\times\Omega_j} F(\mu,x)\,dx\,d\mu \approx \sum_{i=1}^{m_\mu}\sum_{j=1}^{m_x}\int_{\mathcal{D}_i\times\Omega_j} a_{ij}(\mu)\,b_{ij}(x)\,dx\,d\mu \qquad (33)$$

Similarly, RPM can now be used to approximate each contribution to the ROM, α_{ij} defined by (20) and involved in the Galerkin projection of the preliminary step (see **Problem 4**).

3.3.1. Application to the reference problem

By introducing approximation space $\mathcal{P}_h \in \mathcal{P}$ defined by (15) into contribution α_{ij} given by (20), one gets:

$$\alpha_{ij} = \int_{\mathcal{D}\times\Omega} \lambda^*(\boldsymbol{\mu})\,\Phi_i(\boldsymbol{x})\,\mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu})\,\Phi_j(\boldsymbol{x})\,\delta\lambda_i(\boldsymbol{\mu})\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu \tag{34}$$

$$\approx \int_{\mathcal{D}\times\Omega} \left(\sum_{r=1}^{p} \lambda^{*r}\xi_r(\boldsymbol{\mu})\right)\,\Phi_i(\boldsymbol{x})\,\mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu})\,\Phi_j(\boldsymbol{x})\,\left(\sum_{s=1}^{p}\delta\lambda_i^s\xi_s(\boldsymbol{\mu})\right)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu \tag{35}$$

$$\approx \sum_{r=1}^{p}\sum_{s=1}^{p}\lambda^{*r}\left(\int_{\mathcal{D}\times\Omega} \underbrace{\xi_r(\boldsymbol{\mu})\,\Phi_i(\boldsymbol{x})\,\mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu})\,\Phi_j(\boldsymbol{x})\,\xi_s(\boldsymbol{\mu})}_{\text{Integrand }\omega_{rsij}(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{x})}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu\right)\delta\lambda_i^s \tag{36}$$

where repeated indice i is not summed over its range.

Let split the two-dimensional parameter domain $\mathcal{D}$ into m_μ sub-domains $\mathcal{D}_i$. The center $\boldsymbol{\mu}_i$ of each sub-domain $\mathcal{D}_i$ is considered as a parameter reference point. Similarly, the space domain Ω is divided into m_x sub-domains Ω_j whose centers $\boldsymbol{x}_j$ defined m_x spatial reference points. Spatial and parameter reference points $\boldsymbol{x}_j$ and $\boldsymbol{\mu}_i$ can be chosen arbitrary on a regular grid for instance. In this case, a given reference patch (i,j) that occupies the part $\mathcal{D}_i\times\Omega_j$ of the four-dimensional space-parameter domain $\mathcal{D}\times\Omega$ is complicated to figure.

Generalized components of integrand ω in (36) (where subscripts $rsij$ have been omitted to simplify the notations) are denoted by $\bar{\omega} := \{(\bar{\omega}^\mu_{ab},\bar{\omega}^x_{ab})\}$ with: for $1\leqslant a\leqslant m_\mu$ and $1\leqslant b\leqslant m_x$:

$$\bar{\omega} := \left\{\begin{array}{rclcl|rclcl} \bar{\omega}^\mu_{ab}(\boldsymbol{\mu}) & = & \omega(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{x}_b) & \text{if } \boldsymbol{\mu}\in\mathcal{D}_a & | & \bar{\omega}^x_{ab}(\boldsymbol{x}) & = & \omega(\boldsymbol{\mu}_a,\boldsymbol{x}) & \text{if } \boldsymbol{x}\in\Omega_b \\ \bar{\omega}^\mu_{ab}(\boldsymbol{\mu}) & = & 0 & \text{otherwise} & | & \bar{\omega}^x_{ab}(\boldsymbol{x}) & = & 0 & \text{otherwise} \end{array}\right\} \tag{37}$$

The approximation $\bar{\bar{\omega}}$ of integrand ω is defined by the following rank-one separated representation by patch: for $1\leqslant a\leqslant m_\mu$ and $1\leqslant b\leqslant m_x$:

$$\forall(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{x})\in\mathcal{D}_a\times\Omega_b,\quad \omega(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{x})\approx\bar{\bar{\omega}}(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{x}) = \bar{\bar{\omega}}^\mu_{ab}(\boldsymbol{\mu})\,\bar{\bar{\omega}}^x_{ab}(\boldsymbol{x}) \tag{38}$$

where functions $\bar{\bar{\omega}}^\mu_{ab}(\boldsymbol{\mu})$ and $\bar{\bar{\omega}}^x_{ab}(\boldsymbol{x})$ are defined by explicit formulas defined in **Section 3.2.3**. To alleviate the notations in the following, let assume that these functions are obtained by explicit formulas (30) (RPM with independent minimizations by patch) instead of general formulas (28) such that:

$$\bar{\bar{\omega}}^\mu_{ab}(\boldsymbol{\mu}) = \frac{\bar{\omega}^\mu_{ab}(\boldsymbol{\mu})}{\bar{\omega}^\mu_{ab}(\boldsymbol{\mu}_a)} = \frac{\bar{\omega}^\mu_{ab}(\boldsymbol{\mu})}{\bar{\omega}^x_{ab}(\boldsymbol{x}_b)} \qquad\text{and}\qquad \bar{\bar{\omega}}^x_{ab}(\boldsymbol{x}) = \bar{\omega}^x_{ab}(\boldsymbol{x}) \tag{39}$$

In this case, definition of integrand ω in (36) leads to: for $1\leqslant a\leqslant m_\mu$ and $1\leqslant b\leqslant m_x$: $\forall(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{x})\in\mathcal{D}_a\times\Omega_b$,

$$\omega(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{x}) \approx \bar{\bar{\omega}}^\mu_{ab}(\boldsymbol{\mu})\,\bar{\bar{\omega}}^x_{ab}(\boldsymbol{x}) \tag{40}$$

$$\approx \frac{1}{\mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{x}_b,\boldsymbol{\mu}_a)}\left(\xi_r(\boldsymbol{\mu})\,\mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{x}_b,\boldsymbol{\mu})\;\xi_s(\boldsymbol{\mu})\right)\left(\Phi_i(\boldsymbol{x})\,\mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu}_a)\,\Phi_j(\boldsymbol{x})\right) \tag{41}$$

The integral computation of ω over patch (a,b) by separation of variables can now be done as

follows:

$$\int_{\mathcal{D}_a\times\Omega_b} \omega\, dx\, d\mu \approx \ldots$$
$$\ldots \frac{1}{\mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{x}_b,\boldsymbol{\mu}_a)} \underbrace{\left(\int_{\mathcal{D}_a} \xi_r(\boldsymbol{\mu})\,\mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{x}_b,\boldsymbol{\mu})\;\xi_s(\boldsymbol{\mu})\,d\mu\right)}_{=\left(\overline{\boldsymbol{M}}_a(\boldsymbol{x}_b)\right)_{rs}} \underbrace{\left(\int_{\Omega_b} \Phi_i(\boldsymbol{x})\,\mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu}_a)\,\Phi_j(\boldsymbol{x})\,dx\right)}_{\approx [\Phi_i]_b^T\,\overline{\boldsymbol{K}}_b(\boldsymbol{\mu}_a)[\Phi_j]_b} \tag{42}$$

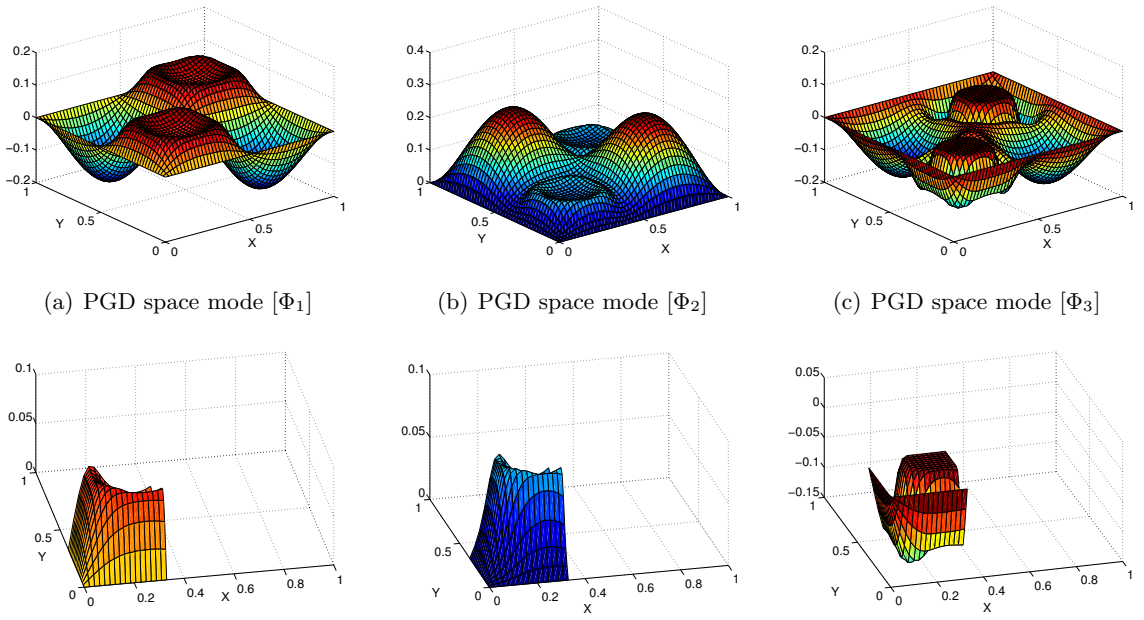
where approximation space $\mathcal{V}_h \in \mathcal{V}$ defined by (12) has been introduced to approximate the second integral on Ω_b. The nodal vector associated with the discretization of space function Φ_i ($\Phi_i(\boldsymbol{x}) \approx \sum_{j=1}^N \Phi_i^j \varphi_j(\boldsymbol{x}) = \Phi_i^j \varphi_j$) restricted to space sub-domain Ω_b is denoted by $[\Phi_i]_b$. Similarly, matrix $\overline{\boldsymbol{K}}_b(\boldsymbol{\mu}_a)$ is obtained by the assembly of spatial finite elements contributions located in sub-domain Ω_b and whose entries are defined as follows:

$$\left(\overline{\boldsymbol{K}}_b(\boldsymbol{\mu}_a)\right)_{ij} = \int_{\Omega_b} \varphi_i(\boldsymbol{x})\;\mathbf{H}^-\left(u^{(n)};\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu}_a\right)\varphi_j(\boldsymbol{x})\;\mathrm{d}x \tag{43}$$

Let also introduce the restriction of the discretized k-order reduced-basis to sub-domain Ω_b:

$$\boldsymbol{W}_{k,b} = [[\Phi_1]_b[\Phi_2]_b \ldots [\Phi_k]_b] \tag{44}$$

Figure 12 depicts the restriction of a discretized 3-order reduced-basis to a sub-domain Ω_b for a 3×3 regular grid of spatial reference points ($m_x = 9$). Thanks to (42), contribution α_{ij} given by



(a) PGD space mode $[\Phi_1]$ (b) PGD space mode $[\Phi_2]$ (c) PGD space mode $[\Phi_3]$

(d) Restriction $[\Phi_1]_b$ of mode $[\Phi_1]$ (e) Restriction $[\Phi_2]_b$ of mode $[\Phi_2]$ (f) Restriction $[\Phi_3]_b$ of mode $[\Phi_3]$

Figure 12: Restriction of a discretized 3-order reduced-basis to a sub-domain Ω_b for a 3×3 regular grid of spatial reference points ($m_x = 9$)

(36) can be approximated as follows:

$$\alpha_{ij} \approx \sum_{r=1}^{p}\sum_{s=1}^{p} \lambda^{*r}\left(\sum_{a=1}^{m_\mu}\sum_{b=1}^{m_x}\int_{\mathcal{D}_a\times\Omega_b} \omega_{rsij}\,dx\,d\mu\right)\delta\lambda_i^s \tag{45}$$
$$\approx \sum_{r=1}^{p}\sum_{s=1}^{p} \lambda^{*r}\left(\sum_{a=1}^{m_\mu}\sum_{b=1}^{m_x}\frac{1}{\mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{x}_b,\boldsymbol{\mu}_a)}\left(\overline{\boldsymbol{M}}_a(\boldsymbol{x}_b)\right)_{rs}\left([\Phi_i]_b^T\,\overline{\boldsymbol{K}}_b(\boldsymbol{\mu}_a)[\Phi_j]_b\right)\right)\delta\lambda_i^s \tag{46}$$

Similarly to (16), one deduces that the contribution to preliminary step of the sum over i of second terms in left-hand side of (4) (or (14)) gives:

$$\underbrace{\underset{Patches\ (a,b)}{\mathrm{A}}\left[\frac{1}{\mathbf{H}^{-}(u^{(n)};\boldsymbol{x}_b,\boldsymbol{\mu}_a)}\left(\underbrace{\boldsymbol{W}_{k,b}^{T}}_{k\times N_b}\underbrace{\overline{\boldsymbol{K}}_b(\boldsymbol{\mu}_a)}_{N_b\times N_b}\underbrace{\boldsymbol{W}_{k,b}}_{N_b\times k}\right)\otimes\underbrace{\overline{\boldsymbol{M}}_a(\boldsymbol{x}_b)}_{p_a\times p_a}\right]}_{pk\times pk}\underbrace{\begin{pmatrix}[\delta\lambda_1]\\ [\delta\lambda_2]\\ \vdots\\ [\delta\lambda_k]\end{pmatrix}}_{pk\times 1} \tag{47}$$

where the symbol A denotes the assembly of the $m_\mu m_x$ tensor products of matrices by patch (a,b). It is worth noting at the fact that matrices $\overline{\boldsymbol{K}}_b(\boldsymbol{\mu}_a)$ (resp. $\overline{\boldsymbol{M}}_a(\boldsymbol{x}_b)$) are computed only at the m_μ parameter reference points $\boldsymbol{\mu}_a$ (resp. m_x spatial reference points $\boldsymbol{x}_b$). They have to be updated each time that the LATIN search direction $\mathbf{H}^{-}$ is updated. If $\mathbf{H}^{-}$ is not updated and if, in addition, the discretized reduced-basis $\boldsymbol{W}_k$ remains unchanged (k is unchanged), the projection onto the reduced-basis $\boldsymbol{W}_k$ and tensor products on each patch can be pre-computed accordingly.

3.3.2. Computational complexity analysis

As noted in **Section 2.3**, RPM could also be used to approximate the nonlinear residue (right-hand side member of (4)) whose complexity is $\mathcal{O}(pNk)$ for each new iterate. In this section, only the gain in complexity associated with the evaluation of second terms in left-hand side of (4) (or (14)) is discussed. Let recall that the parameter-dependency of the search direction $\mathbf{H}^{-}$ prevents the separation of integrals which leads to a computational complexity of $\mathcal{O}(pNk^2)$ (resp. $\mathcal{O}(pN^2k)$) if the discretized operator is sparse (resp. full) for each new iterate $u^{(n)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu})$. As shown in **Section 3.3.1**, RPM enables one to provide an approximation of this term as an assembly of tensor products of matrices by patch (see (47)).

By denoting by N_b (resp. p_a) the number of spatial (resp. parameter) unknowns contains within sub-domain Ω_b (resp. sub-domain $\mathcal{D}_a$) in (47), the projection onto the restriction of the discretized k-order reduced-basis to sub-domain Ω_b, $\boldsymbol{W}_{k,b}$, involves two matrix-matrix products resulting into a computational complexity that scales with $\mathcal{O}(N_bk+N_bk^2)$ if $\overline{\boldsymbol{K}}_b(\boldsymbol{\mu}_a)$ is sparse. Complexity for evaluating tensor product is $\mathcal{O}(p_ak^2)$ if $\overline{\boldsymbol{M}}_a(\boldsymbol{x}_b)$ is sparse. If the number of arithmetical operations for evaluating one entry of matrix $\overline{\boldsymbol{K}}_b(\boldsymbol{\mu}_a)$ (resp. $\overline{\boldsymbol{M}}_a(\boldsymbol{x}_b)$) is supposed to be β (resp. γ), complexity for evaluating one patch contribution is:

$$\mathcal{O}(\ \underbrace{N_b\,k+N_b\,k^2}_{\text{Projection on }\boldsymbol{W}_{k,b}}+\underbrace{N_b\,\beta}_{\text{Evaluation of }\overline{\boldsymbol{K}}_b(\boldsymbol{\mu}_a)}+\underbrace{p_a\,k^2}_{\text{Tensor product}}+\underbrace{p_a\,\gamma}_{\text{Evaluation of }\overline{\boldsymbol{M}}_a(\boldsymbol{x}_b)}\ ) \tag{48}$$

Cost for the RPM reconstruction is negligible. Assuming that $N_b\approx\dfrac{N}{m_x}$ and $p_a\approx\dfrac{p}{m_\mu}$, the total complexity for evaluating the contributions of all the patches to the $pk\times pk$ matrix in (47) is roughly:

$$\mathcal{O}\left(\left(\frac{N}{m_x}k+\frac{N}{m_x}k^2+\frac{N}{m_x}\beta+\frac{p}{m_\mu}k^2+\frac{p}{m_\mu}\gamma\right)m_x\,m_\mu\right)\sim\mathcal{O}\left(N\,m_\mu\,k^2+p\,m_x\,k^2\right) \tag{49}$$

if $\beta\sim\mathcal{O}(1)$ and $\gamma\sim\mathcal{O}(1)$. The total gain in case of sparse operators is consequently about:

$$\mathcal{O}\left(\left(\frac{N\,m_\mu\,k^2+p\,m_x\,k^2}{p\,N\,k^2}\right)^{-1}\right)\sim\mathcal{O}\left(\left(\frac{m_\mu}{p}+\frac{m_x}{N}\right)^{-1}\right) \tag{50}$$

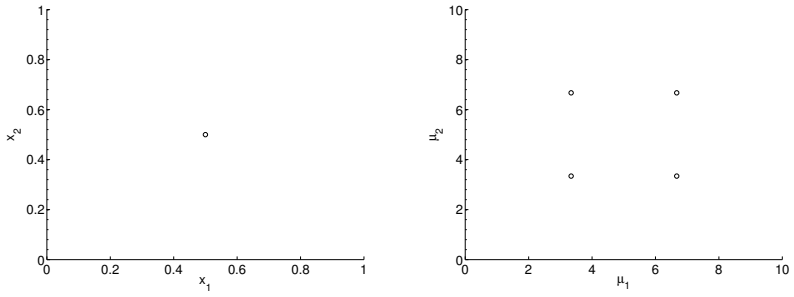
In practice for **Problem 3**, the number of spatial reference points m_x is negligible compared with N and one has $\dfrac{N}{m_x}\gg\dfrac{p}{m_\mu}$. For instance, if one chooses for **Problem 3**, $N=2500$, $p=225$ and $m_x=m_\mu=10$, the gain is about one order of magnitude: $\mathcal{O}\left(\dfrac{p}{m_\mu}\right)\sim 10$.

4. Numerical example

In this section, the numerical simulation of **Problem 1** is investigated. The RPM is here used to approximate the preliminary step of the LATIN-PGD computational strategy for **Problem 3**. In the following this strategy is denoted by LATIN-PGD-RPM. The computational gain according to the number of reference points is investigated in **Section 4.2** and compared to the expected gain (see (50)). Finally, a comparison between the LATIN-PGD-RPM and the EIM combined with reduced-order basis techniques and Newton-based solution strategy [15], called RB-EIM, is proposed in **Section 4.3**.

4.1. On the choice of the reference points

Problem 1 is defined on the space-parameter domain $\mathcal{D} \times \Omega$ with $\mathcal{D} = [0.01, 10]^2 \subset \mathbb{R}^2$ and $\Omega =]0,1[^2 \subset \mathbb{R}^2$. A spatial (resp. parameter) point is defined by its components $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2) \in \Omega =]0,1[^2$ (resp. $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2) \in \mathcal{D} = [0.01, 10]^2$). **Figure 13** depicts the situation where $m_x = 1 \times 1$ spatial and $m_\mu = 2 \times 2$ parameter reference points are chosen on a regular grid.



(a) $m_x = 1 \times 1$ reference space points (b) $m_\mu = 2 \times 2$ reference parameter points

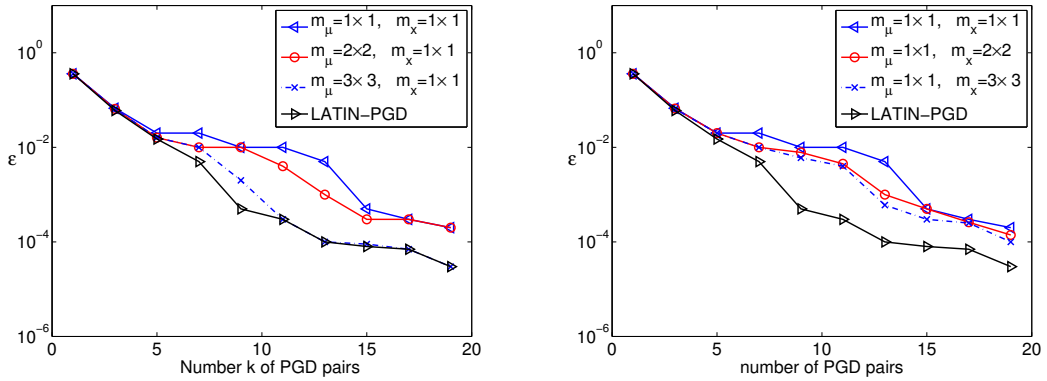
Figure 13: Example of selection of reference points on a regular grid for space-parameter domain of **Problem 1**

For all the simulations of **Section 4**, the finite element approximation space $\mathcal{V}_h$ is fixed and obtained by a finite element mesh of 50×50 bilinear quadrilateral elements leading to an approximation space of dimension $N = 2601$. The reference solution u_{ref} refers to the solution obtained by solving **Problem 2** with Newton-based nonlinear solution strategy (classical direct method without model reduction) for each parameter value (see **Figure 1**). A number of $p = 225$ values for parameter $\boldsymbol{\mu}$ is considered and chosen from a regular grid as depicted in **Figure 15(a)**. The following relative error ϵ is introduced:

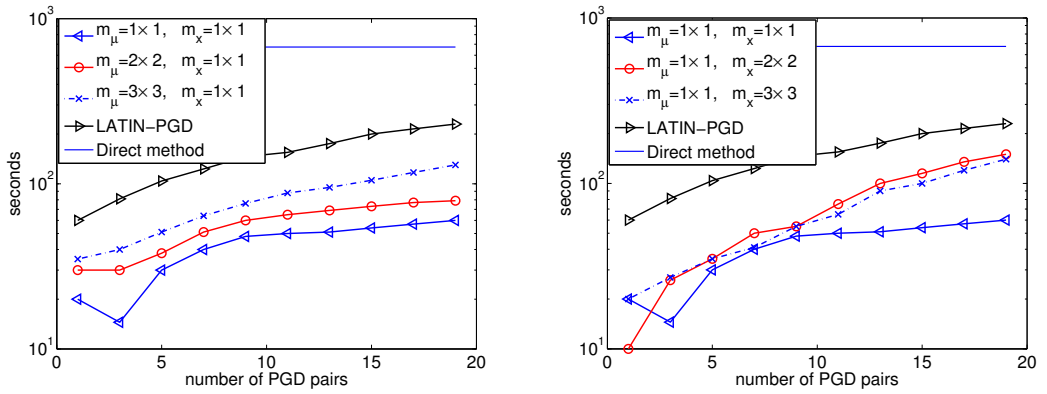
$$\epsilon = 1/p \sum_{j=1}^{p} \frac{\| u_{ref}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}_j) - u_m(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}_j) \|_{L^2}}{\| u_{ref}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}_j) \|_{L^2}} \tag{51}$$

where u_m refers to the solution obtained with the chosen model reduction strategy: LATIN-PGD, LATIN-PGD-RPM, RB or RB-EIM. The evolutions of ϵ with respect to the number of PGD pairs for increasing numbers of spatial and parameter reference points are plotted in **Figure 14**. Note that for the LATIN-PGD or the LATIN-PGD-RPM, the number of generated PGD pairs is comparable to the number of LATIN iterations since only one new PGD pair is generated per LATIN iteration at most.

It can be seen on **Figure 14(a)** and **Figure 14(b)** that, by adding more reference points, the error curve of the LATIN-PGD-RPM converges to the one obtained with the LATIN-PGD. The CPU time also increases accordingly and tends to the LATIN-PGD computational cost (see **Figure 14(c)** and **Figure 14(d)**). Let recall that RPM technique is used only for the preliminary step. Thus, if the RPM approximation is not good enough, the generation of new PGD pairs as



(a) Error ϵ for $m_\mu = \{1\times1, 2\times2, 3\times3\}$ and $m_x = 1\times1$ (b) Error ϵ for $m_\mu = 1\times1$ and $m_x = \{1\times1, 2\times2, 3\times3\}$



(c) CPU time for $m_\mu = \{1\times1, 2\times2, 3\times3\}$ and $m_x = 1\times1$ (d) CPU time for $m_\mu = 1\times1$ and $m_x = \{1\times1, 2\times2, 3\times3\}$

Figure 14: Evolution of error ϵ (see (51)) and CPU time w.r.t. the number of PGD pairs for increasing numbers of spatial and parameter reference points to solve **Problem 1**

described in **Algorithm 2** can palliate this and makes the error monotonically decrease and the solution converge anyway. Obviously, this results into the generation of more PGD pairs compared with the LATIN-PGD curve for a given level of error.

It is worth noting at the fact that an error level of 10^{-3} can be reached with only one spatial reference point and a few parameter reference points (see dash-dot line with cross markers in **Figure 14(a)**). For this example, adding more parameter reference points seems to be better than adding more spatial reference points in order to converge to the optimal LATIN-PGD curve (see dash-dot lines with cross markers in **Figure 14(a)** and **Figure 14(c)**). Indeed, as it is often the case in structural mechanics, the spatial gradients of quantities are stronger than their variations in parameter variable for this nonlinear parametrized elliptic problem (see **Figure 1**). Since the parameter reference points $\{\boldsymbol{\mu}_a\}_{1\leqslant a\leqslant m_\mu}$ lead to the computation of m_μ integrals $\overline{\boldsymbol{K}}_b(\boldsymbol{\mu}_a)$ (see (42) and (47)) over the space domain, adding more parameter reference points is preferable to account for spatial gradients.

4.2. Computational gain analysis

As seen in the previous section, the more reference points are added, the more CPU time increases (see **Figure 14(c)** and **Figure 14(d)**). A compromise between the number of reference points – i.e. the CPU time – and the number of generated PGD pairs – i.e. number of LATIN iterations – has to be done in oder to reach a given level of error. For an error level of $\epsilon = 10^{-2}$,

the CPU time gain compared with the direct method increases from 6 for the LATIN-PGD to 18 for the LATIN-PGD-RPM (see **Table 2**). For a very small number of reference points ($m_\mu = 1 \times 1$ and $m_x = 1 \times 1$) and a few more PGD pairs, the total CPU time gain is here multiplied by a factor of 3 thanks to the RPM applied to the preliminary step of the LATIN-PGD.

		LATIN-PGD-RPM		
	LATIN-PGD	$m_\mu = 1 \times 1$	$m_\mu = 2 \times 2$	$m_\mu = 3 \times 3$
		$m_x = 1 \times 1$	$m_x = 1 \times 1$	$m_x = 1 \times 1$
Number of PGD pairs	7	9	7	7
Gain w.r.t. direct method	6	18	14.2	11.5

Table 2: Total CPU time gain with respect to the direct method for a given level of error ($\epsilon = 10^{-2}$)

Table 3 provides the gain in CPU time on the preliminary step thanks to the RPM. For a significant number of parameter reference points ($m_\mu = 3 \times 3$), the real gain is very close to the theoretical gain in computational complexity (50), that is to say approximately p/m_μ where p is the number of parameter values.

	LATIN-PGD-RPM		
	$m_\mu = 1 \times 1$	$m_\mu = 2 \times 2$	$m_\mu = 3 \times 3$
	$m_x = 1 \times 1$	$m_x = 1 \times 1$	$m_x = 1 \times 1$
Real gain with respect to LATIN-PGD	90	39	25
Expected gain ($\approx \frac{p}{m_\mu}$)	225	56	25

Table 3: CPU time gain on the preliminary step with respect to the LATIN-PGD for a given level of error ($\epsilon = 10^{-2}$)

4.3. Comparison of RPM versus EIM: approximation versus interpolation techniques

In this section, a comparison of the performances of the RPM, described in **Section 3**, and the EIM is proposed. It has to be first noticed that, the two methods are here combined with different model reduction techniques and nonlinear strategies (see **Table 4**). As explained in **Section 3.1**, using EIM to solve the preliminary/update step of the PGD could be done but it may be less suitable when the reduced basis evolves. The interested reader could nevertheless refer to [44, 45] for one of the first applications of DEIM to PGD.

In the following, the more classical combination of EIM with reduced-basis techniques and offline-online procedure is considered and called RB-EIM. In this case, combined with Newton-based incremental solution strategy, the reduced-basis approximation associated to the space weak form **Problem 2** for each parameter value $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{D}$ is considered instead of the space-parameter weak form **Problem 3** used in the LATIN non-incremental solution strategy.

	Nonlinear solution strategy	Model order reduction technique	Comments
EIM	Newton method	Reduced-basis (RB)	Offline-online procedure [15]
RPM	LATIN	PGD	Evolving reduced basis

Table 4: Context of application of the RPM and the EIM: LATIN-PGD-RPM and RB-EIM

Moreover, RPM and EIM are based on different approaches. As seen in **Section 3.1**, RPM is based on an approximation technique of the integrals involved in the Galerkin projection onto an evolving reduced-basis whereas EIM is based on an interpolation procedure of the nonlinear terms (Jacobian and residue).

4.3.1. Summary of the RB-EIM procedure

The main steps of the online-offline procedure of the RB-EIM as described in [15] are here summarized. During the offline stage, the following steps are performed:

- Construction of a nested coarse sample set $\mathcal{S}_M^c = \{\boldsymbol{\mu}_m^M \in \mathcal{D}_c\}_{1\leqslant m\leqslant M}$ of magic parameter points thanks to a greedy selection process on coarse grid $\mathcal{D}_c \subset \mathcal{D}$ based on a $L^2(\Omega)$ norm. This requires the solution of M nonlinear problems for each parameter value of $\mathcal{D}_c$ whose computational cost scales with the size of $\mathcal{D}_c$ and N. This cost may be prohibitive in the parabolic case or when the nonlinear function g is time-dependent or implicitly dependent to the field variable u, which is the case here.

- Greedy selection process of a reduced-order basis $\mathcal{W}_k = \{\Phi_i\}_{i=1\leqslant i\leqslant k}$ for the solution u over the coarse sample set $\mathcal{D}_c$. Note that snapshots of the solution, $u(\boldsymbol{\mu}_m^M)$, computed for the elements of nested sample set $\mathcal{S}_M^c \subset \mathcal{D}_c$, are reused in (52).

- Determination of the associated approximation space (collateral reduced-basis):

$$\mathcal{W}_M^c = span\left\{\xi_m = g\left(u(\boldsymbol{\mu}_m^M); \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}_m^M\right)\right\}_{1\leqslant m\leqslant M} = span\{q_m(\boldsymbol{x})\}_{1\leqslant m\leqslant M} \tag{52}$$

  where the M functions $\{q_m(\boldsymbol{x})\}_{1\leqslant m\leqslant M}$ and interpolation magic points $\{\boldsymbol{x}_m^M\}_{1\leqslant m\leqslant M}$ are determined progressively by the recursive solution of M small linear systems.

Once order-k reduced basis $\mathcal{W}_k$, collateral reduced-basis $\mathcal{W}_M^c$ and interpolation magic points $\{\boldsymbol{x}_m^M\}_{1\leqslant m\leqslant M}$ have been determined once for all, one can proceed to the online stage on the fine parameter sample set $\mathcal{D}_f \subset \mathcal{D}$. For each parameter value $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{D}_f$ and each iterate $u^{(n)}$, one has the following steps:

- Update of coefficient functions $\{\varphi_m^M(\boldsymbol{\mu})\}_{1\leqslant m\leqslant M}$) for the reduced-order model of $u^{(n)}$ evaluated at interpolation "Magic" points $\{\boldsymbol{x}_m^M\}_{1\leqslant m\leqslant M}$;

- Update of tangent operator at cost $\mathcal{O}(Mk^2)$ in (19) and residue (i.e. Galerkin projection on the order-k reduced basis $\mathcal{W}_k$);

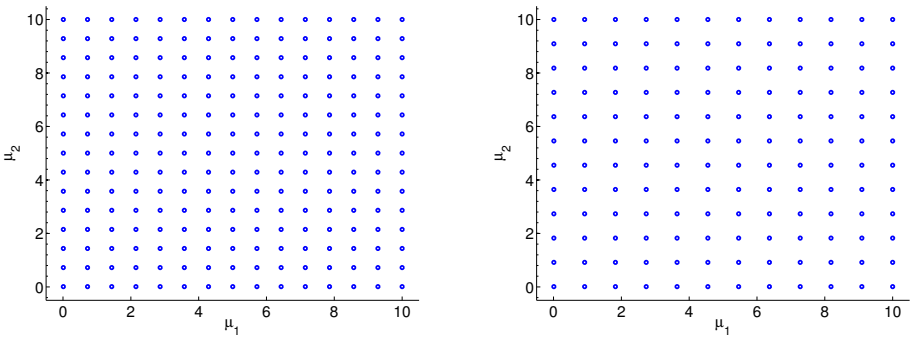
- Solution of the reduced-basis approximation on $\mathcal{W}_k$ associated to the space weak form **Problem 2** for parameter value $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{D}_f$ at cost $\mathcal{O}(k^3)$ (factorization of the full $k \times k$ matrix).

The online computational complexity depends only on k, M and the number of Newton iterations. The N independence of the online stage is recovered. As noticed previously, the costly part of the offline stage is mainly due to the construction of the coarse sample set $\mathcal{S}_M^c$ of magic parameter points $\{\boldsymbol{\mu}_m^M \in \mathcal{D}_c\}_{1\leqslant m\leqslant M}$.

4.3.2. Application of the LATIN-PGD-RPM and the RB-EIM to the reference problem

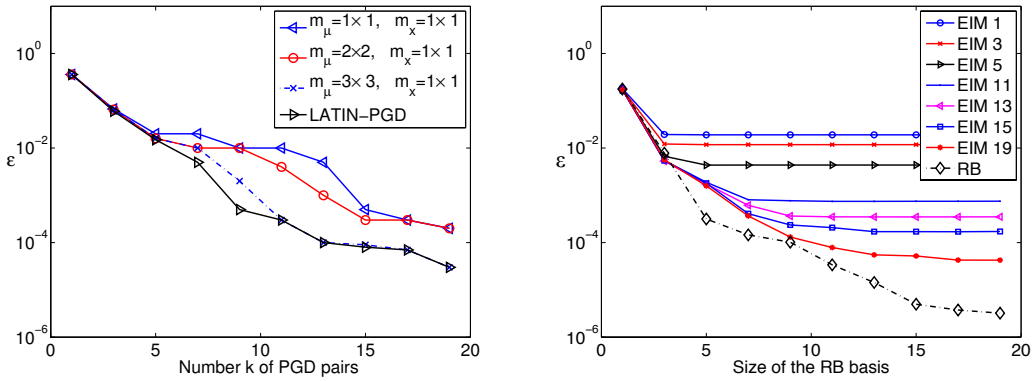
As in [15], a 15×15 regular grid of parameter values is used for the fine sample set $\mathcal{D}_f \subset \mathcal{D}$ (**Figure 15(a)**). This leads to a number $p = 225$ of parameter values for $\boldsymbol{\mu}$. For the offline stage of the RB-EIM, a 12×12 regular grid of parameter values is chosen for the coarse sample set $\mathcal{D}_c \subset \mathcal{D}$ (**Figure 15(b)**).

As explained at the end of **Section 4.1**, only one spatial reference point is used in the following for the LATIN-PGD-RPM. Thus, one sets $m_x = 1 \times 1$. Only the number m_μ of parameter reference points varies. For the RB-EIM, the influence on the convergence of the number M of magic points for a given size k of the reduced basis $\mathcal{W}_k$ generated offline is investigated. For the LATIN-PGD-RPM, the reduced basis $\mathcal{W}_k$ is progressively built and its size k increases throughout the LATIN iterations. As previously said, the number k of generated PGD pairs is comparable to the number of LATIN iterations since only one new PGD pair is generated per LATIN iteration at most.



(a) Fine regular grid $\mathcal{D}_f$ of 15×15 points (b) Coarse regular grid $\mathcal{D}_c$ of 12×12 points

Figure 15: Fine and coarse grids, $\mathcal{D}_f$ and $\mathcal{D}_c$, for the parameter domain discretization considered for the RB-EIM [15]



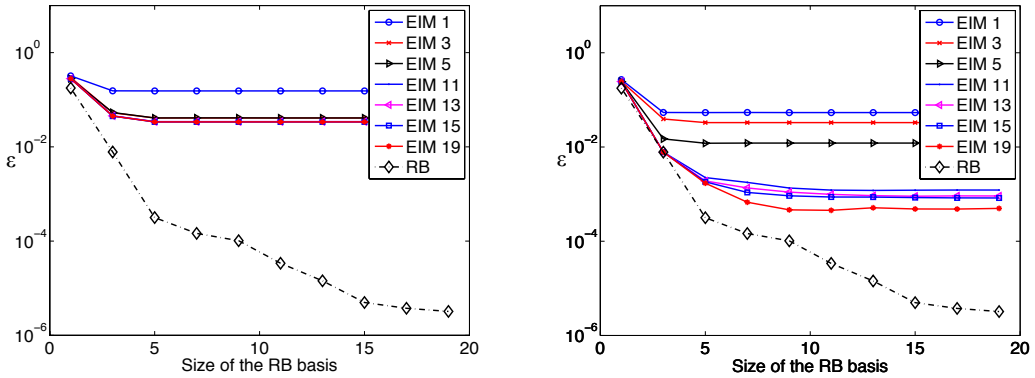
(a) Error ϵ for the LATIN-PGD-RPM with $m_x = 1 \times 1$ and $m_\mu = \{1 \times 1, 2 \times 2, 3 \times 3\}$ (b) Error ϵ for the RB-EIM and various numbers M of magic points from 1 to 19

Figure 16: Error ϵ given by (51) with respect to the size k of the reduced basis $\mathcal{W}_k$ for the LATIN-PGD-RPM and the RB-EIM and various numbers of reference/magic points for **Problem 1**

The error ϵ given by (51) for various numbers of reference and magic points and **Problem 1** is given in **Figure 16**. The error of the classical reduced basis approach without EIM (dash-dot line with diamond markers denoted by RB) is also given for comparison. Both the LATIN-PGD-RPM and the RB-EIM lead to the same level of error. However, some differences can be pointed out. For a given number M of magic points, the RB-EIM convergence curve first decreases until a plateau is reached once k slightly exceeds the value of M (see **Figure 16(b)**). Increasing M is necessary to make the error decrease. Indeed, for a fixed number M of magic interpolation points the error in the coefficient functions $\{\varphi_m^M(\boldsymbol{\mu})\}_{1 \leqslant m \leqslant M}$ used to interpolate the nonlinear terms (see (17)) ultimately dominates for increasing dimension k of the reduced basis $\mathcal{W}_k$. Increasing both M and k is necessary to lower the error. In the case of the LATIN-PGD-RPM (see **Figure 16(a)**), the reduced basis $\mathcal{W}_k$ being enriched throughout the iterations, the error decreases monotonically as expected by generating new PGD pairs. Increasing the number m_μ of parameter reference points improves the overall convergence rate. In any case, the LATIN-PGD-RPM solution converges.

As pointed out in **Section 4.3.1**, despite the fact that the computational cost of the online stage depends only on k, M and the number of Newton iterations and no more on N, the cost of the offline/learning stage can be very high for nonlinear problems in order to generate a pertinent reduced-basis $\mathcal{W}_k$ as well as a suitable coarse sample set $\mathcal{S}_M^c$ of magic parameter points. A *suf-*

ficiently fine coarse grid $\mathcal{D}_c$ may be necessary. More precisely, for the 12×12 coarse grid $\mathcal{D}_c$ of **Figure 15(b)**, the offline stage of the RB-EIM accounts for 64% of the computational cost of the classic direct simulation performed on the 15×15 fine grid $\mathcal{D}_f$ of **Figure 15(a)**. Error ϵ given by (51) for the RB-EIM with various regular coarse grids $\mathcal{D}_c$ used during the offline stage is plotted in **Figure 17**. It can be seen on **Figure 17(a)** that a too coarse grid leads to a high level of error whatever the number M of magic points is. For a 5×5 grid, it can be seen on **Figure 17(b)** that error level is hardly improved for M higher than about 11.



(a) Coarse grid $\mathcal{D}_c$ of 2×2 points

(b) Coarse grid $\mathcal{D}_c$ of 5×5 points

(c) Coarse grid $\mathcal{D}_c$ of 10×10 points

(d) Coarse grid $\mathcal{D}_c$ of 12×12 points

Figure 17: Error ϵ given by (51) for the RB-EIM with various regular coarse grids $\mathcal{D}_c$ used during the offline stage

Finally, even though comparing a reduced basis approach with learning stage and a PGD-based model reduction may be discussable, one nevertheless provides, in **Table 5**, CPU time gains with respect to the direct simulation to reach an error level of $\epsilon = 10^{-2}$ for the LATIN-PGD-RPM and the RB-EIM with a comparable number of reference/magic points: $m_x = 1 \times 1$, $m_\mu = 2 \times 2$ and $M = 5$. As discussed previously, note that CPU time for the RB-EIM includes the time spent during the offline/learning stage, the online stage cost being negligible. It can be seen that the CPU time gains for the two approaches are quite similar in the case of **Problem 1**. The size k of the reduced basis $\mathcal{W}_k$ generated by the LATIN-PGD-RPM is also comparable to the size of the reduced basis built by the RB-EIM during the offline stage.

5. Conclusion

In order to tackle the bottleneck of nonlinear model reduction techniques, a new approximation technique, called Reference Point Method, has been proposed to reduce the computational com-

	LATIN-PGD-RPM	RB-EIM
	$m_x = 1 \times 1$	$M = 5$
	$m_\mu = 4 \times 4$	
Size k of reduced basis $\mathcal{W}_k$	7	5
Gain w.r.t. direct method	14.2	18

Table 5: CPU time gain with respect to the direct simulation to reach an error level of $\epsilon = 10^{-2}$ for the LATIN-PGD-RPM and the RB-EIM with a comparable number of reference/magic points

plexity of algebraic operations for constructing reduced-order models in the case of time dependent and/or parametrized nonlinear partial differential equations. It has been shown that this bottleneck is not specific to PGD-based model reduction but more generally to reduced-basis approximation in nonlinear model reduction. This problem arises due to the fact that at each iteration of the solution strategy: (i) Galerkin projection onto the ROB has to be performed, especially each time the reduced-order basis evolves which is the case for PGD, (ii) non-linear terms (Jacobian and residue) have to be evaluated for each new iterate which prevents pre-computations of operators. As a result, the complexity of these operations scales with the size of the original high-dimensional model.

Contrary to EIM which is based on an interpolation procedure of the nonlinear terms (Jacobian and residue), RPM is based on an approximation technique of the integrals involved in the Galerkin projection onto an evolving reduced-basis. For that two main features are introduced: (i) an approximation framework with the introduction of reference points to simplify the evaluation of integrands, (ii) a low-cost technique to reconstruct by explicit formulas an approximate low-rank separated representation by patch of operators without resorting to SVD-based techniques, which is a great advantage regarding integral computation by separation of variables.

An application of the RPM with the LATIN-PGD nonlinear solution strategy to a nonlinear parametrized elliptic PDE previously studied by other authors with reduced-basis method and EIM has been proposed. More precisely, the RPM has been used to approximate, at each iteration of the nonlinear solution strategy, the so-called *Preliminary step* which is nothing more than an update of the reduced model from the reduced basis obtained from the previous iterations.

It has been shown that the convergence of the whole strategy is ensured, whatever the number of reference points is (even if a very moderate increase of the number of the generated PGD modes is required to compensate a possible lack of accuracy of the RPM approximation). Increasing the number of reference points makes the convergence curve tend to the one obtained with the classical LATIN-PGD approach.

Moreover, computational complexity as well as CPU time to construct the reduced-order model of the preliminary step can be divided in practice by one order of magnitude. The implementation of RPM for more complex problems is currently in progress and one can expect higher gains.

Acknowledgements

This work was supported by the French *Agence Nationale pour la Recherche* through the SIMDREAM project ANR-10-COSI-0006.

Appendix A. Nonlinear solution strategy by an alternating-direction scheme: the LATIN method

In order to solve **Problem 3**, the LATIN method is used as a nonlinear solution strategy. By a two-stage iterative scheme and two search directions, the LATIN method generates approximations of the solution that belong alternatively to two manifolds, $\mathbf{A}_d$ and $\mathbf{\Gamma}$ as represented in **Figure A.18**. Manifold $\mathbf{A}_d$ is defined by the linear, possibly global, equations of the problem whereas manifold $\mathbf{\Gamma}$ contains the local, possibly nonlinear, equations. Similarly to augmented Lagrangian techniques,

the key point of the strategy consists, for **Problem 3**, in introducing manifold $\mathbf{\Gamma} = \{(u, w) \in \mathcal{V} \times \mathcal{W};\, w = g(u; \boldsymbol{\mu}), \forall \mu \in \mathcal{D}\}$ with $\mathcal{W} = L^2(\Omega)$. The problem solution is found by solving alternatively the *local stage* and the *global stage* as described hereafter.

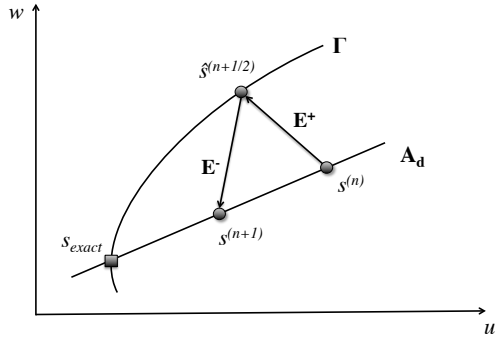


Figure A.18: The LATIN alternating-direction scheme: manifolds $\mathbf{A}_d$ and $\mathbf{\Gamma}$, search directions $\mathbf{E}^+$ and $\mathbf{E}^-$

.

Appendix A.1. Local stage at iteration $n+1$

Local stage consists in building solution $\hat{s}^{(n+1/2)} = (\hat{u}^{(n+1/2)}, \hat{w}^{(n+1/2)}) \in \mathbf{\Gamma}$, i.e. that verifies nonlinear equation $\hat{w}^{(n+1/2)} = g(\hat{u}^{(n+1/2)}; \boldsymbol{\mu})$ for all $\boldsymbol{\mu}$, knowing solution $s^{(n)} = (u^{(n)}, w^{(n)}) \in \mathbf{A}_d$ coming from the previous global stage thanks to search direction $\mathbf{E}^+$, verified by $\hat{s}^{(n+1/2)} - s^{(n)}$:

$$\mathbf{E}^+ : \forall\, \boldsymbol{\mu} \in \mathcal{D}, \forall\, \boldsymbol{x} \in \Omega, \quad (\hat{w}^{(n+1/2)} - w^{(n)}) + \mathbf{H}^+(\hat{u}^{(n+1/2)} - u^{(n)}) \;=\; 0 \tag{A.1}$$

where $\mathbf{H}^+$ is a symmetric definite operator which is a parameter of the method. At this stage, the problem is nonlinear but local in space variable. A simple choice is to take a *stiff* ascending search direction ($\mathbf{H}^+ \to \infty$), which is equivalent to set $\hat{u}^{(n+1/2)} = u^{(n)}$. In this case, solution is found explicitly without resorting to a local nonlinear solver and solution $\hat{s}^{(n+1/2)} = (\hat{u}^{(n+1/2)}, \hat{w}^{(n+1/2)})$ is simply defined by:

$$\forall\, \boldsymbol{\mu} \in \mathcal{D}, \forall\, \boldsymbol{x} \in \Omega, \quad \left\{ \begin{array}{rcl} \hat{u}^{(n+1/2)} & = & u^{(n)} \\ \hat{w}^{(n+1/2)} & = & g(\hat{u}^{(n+1/2)}; \boldsymbol{\mu}) = g(u^{(n)}; \boldsymbol{\mu}) \end{array} \right. \tag{A.2}$$

Appendix A.2. Global stage at iteration $n+1$

Global stage consists in building solution $s^{(n+1)} = (u^{(n+1)}, w^{(n+1)}) \in \mathbf{A}_d$, knowing solution $\hat{s}^{(n+1/2)} = (\hat{u}^{(n+1/2)}, \hat{w}^{(n+1/2)}) \in \mathbf{\Gamma}$ coming from the previous local stage thanks to search direction $\mathbf{E}^-$ satisfied by $s^{(n+1)} - \hat{s}^{(n+1/2)}$:

$$\mathbf{E}^- : \forall\, \boldsymbol{\mu} \in \mathcal{D}, \forall\, \boldsymbol{x} \in \Omega, \quad (w^{(n+1)} - \hat{w}^{(n+1/2)}) - \mathbf{H}^-(u^{(n+1)} - \hat{u}^{(n+1/2)}) \;=\; 0 \tag{A.3}$$

Similarly to ascending search direction $\mathbf{H}^+$ of the local stage, the descending search direction $\mathbf{H}^-$ is a parameter of the method. It is shown in [22] that a well-suited choice is to choose the tangent operator for $\mathbf{H}^-$:

$$\mathbf{H}^- = \left.\frac{\partial g(u; \boldsymbol{\mu})}{\partial u}\right|_{u=\hat{u}^{(n+1/2)}} = \left.\frac{\partial g(u; \boldsymbol{\mu})}{\partial u}\right|_{u=\hat{u}^{(n+1/2)}=u^{(n)}} \tag{A.4}$$

Second equality is due to the choice made for search direction $\mathbf{E}^-$ (see (A.2)). A constant operator could be also chosen:

$$\mathbf{H}^- = \left.\frac{\partial g(u; \boldsymbol{\mu})}{\partial u}\right|_{u=\hat{u}^{(0)}} = \mathbf{H}_{\mathbf{0}}^- \tag{A.5}$$

In this case, the algorithm bears similarities to a quasi-Newton scheme. As shown in [22], the choice of search directions $\mathbf{H}^+$ and $\mathbf{H}^-$ does not affect the solution at convergence but it can

change the convergence rate. **Figure A.19** depicts the evolution of LATIN convergence indicator δ_L (see (A.9) in **Appendix A.3**) as a function of the number of iterations for **Problem 1**. It can be seen that using a tangent operator (A.4) instead of a constant one (A.5) drastically improves the convergence rate. Using tangent operator (A.4) or, at least, updating search direction $\mathbf{H}^-$ is consequently recommended.

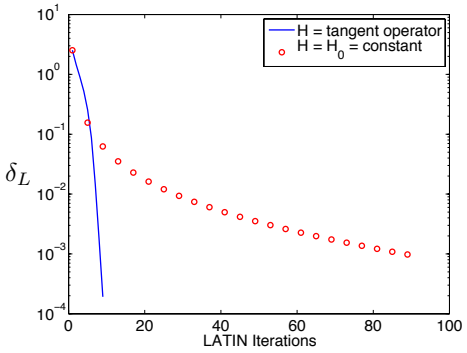


Figure A.19: Convergence of LATIN error indicator δ_L (A.9) for **Problem 1** and two choices of search direction $\mathbf{H}^-$: tangent operator (A.4) and constant operator (A.5)

The global stage problem reads as follows:

Problem 5 (Global stage). *Given* $\hat{s}^{(n+1/2)} = (\hat{u}^{(n+1/2)}, \hat{w}^{(n+1/2)})$, *find* $s^{(n+1)} = (u^{(n+1)}, w^{(n+1)})$ $\mathbf{A}_d$ *that satisfies search direction* (A.3) *and such that:*

$$\forall v \in \mathcal{S}, \quad \int_{\mathcal{D}} a(u^{(n+1)}, v)\,\mathrm{d}\mu + \int_{\mathcal{D}\times\Omega} w^{(n+1)}\ v\ \mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu = \int_{\mathcal{D}\times\Omega} f(\boldsymbol{x})\ v\ \mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu \tag{A.6}$$

By introducing search direction (A.3) in (A.6), one obtains:

$$\begin{aligned}\forall v \in \mathcal{S}, \quad & \int_{\mathcal{D}} a(u^{(n+1)}, v)\,\mathrm{d}\mu + \int_{\mathcal{D}\times\Omega} \mathbf{H}^-\ u^{(n+1)}\ v\ \mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu = \dots \\ & \dots \int_{\mathcal{D}\times\Omega} f(\boldsymbol{x})\ v\ \mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu - \int_{\mathcal{D}\times\Omega} \left(\hat{w}^{(n+1/2)} - \mathbf{H}^-\hat{u}^{(n+1/2)}\right)\ v\ \mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu\end{aligned} \tag{A.7}$$

The only unknown in this latter equation is $u^{(n+1)}$. This equation is global over the space-parameter domain but linear.

Due to the specific choices done for search directions $\mathbf{E}^-$ (see (A.2)) and $\mathbf{E}^+$ (see (A.4)) and by introducing the correction $\delta u^{(n+1)} = u^{(n+1)} - u^{(n)}$ between two consecutive global stages, **Problem 5** also reads:

Problem 6 (Global stage on correction). *Find* $\delta u^{(n+1)} = u^{(n+1)} - u^{(n)} \in \mathcal{S}$ *and* $w^{(n+1)} \in \mathcal{S}$ *such that:*

$$\begin{aligned}&\forall v \in \mathcal{S}, \qquad \int_{\mathcal{D}} a(\delta u^{(n+1)}, v)\,\mathrm{d}\mu + \int_{\mathcal{D}\times\Omega} \mathbf{H}^-(u^{(n)};\boldsymbol{\mu})\ \delta u^{(n+1)}\ v\ \mathrm{d}x\,\mathrm{d}\mu = -\int_{\mathcal{D}} \mathcal{R}(u^{(n)}, v;\boldsymbol{\mu}) \\ &\forall\,\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{D},\ \forall\,\boldsymbol{x} \in \Omega, \qquad\qquad w^{(n+1)} = \hat{w}^{(n+1/2)} + \mathbf{H}^-\,\delta u^{(n+1)}\end{aligned} \tag{A.8}$$

where :

$$\begin{cases} \mathcal{R}(u^{(n)}, v; \boldsymbol{\mu}) &= a(u^{(n)}, v) \; - \; \displaystyle\int_\Omega f(\boldsymbol{x}) \; v \; \mathrm{d}x \; + \; \int_\Omega g(u^{(n)}; \boldsymbol{\mu}) \; v \; \mathrm{d}x \\ \mathbf{H}^-(u^{(n)}; \boldsymbol{\mu}) &= \left. \dfrac{\partial g(u; \boldsymbol{\mu})}{\partial u} \right|_{u=u^{(n)}} \end{cases}$$

At each iteration, a local stage and a global stage have to be solved until convergence. It is clear that contrary to classical incremental solution strategies, one has to store the iterate on the whole space-parameter domain. Indeed, at each stage, one seeks a correction $\delta u^{(n+1)} \in \mathcal{S} = L^2(\mathcal{D}, \mathcal{V})$. In order to overcome this data storage issue, a dedicated representation of unknowns has to be proposed. In the LATIN method [22], Proper generalized decomposition of the iterates is classically used to the purpose as described in **Section 2.2**.

Appendix A.3. LATIN convergence indicator

In order to check the convergence of the nonlinear iterative scheme, the following error indicator is defined:

$$\delta_L^{(n+1)} = \frac{\|u^{(n+1)} - \hat{u}^{(n+1/2)}\|}{\frac{1}{2} \; \|u^{(n+1)} + \hat{u}^{(n+1/2)}\|} \quad \text{with} \quad \|\cdot\| = \int_{\mathcal{D}\times\Omega} \cdot^{\,2} \; \mathrm{d}x \, \mathrm{d}\mu$$

This error indicator measures, at iteration $n+1$, the distance between the iterate of $\boldsymbol{\Gamma}$ generated at the local stage and the subsequent iterate of $\mathbf{A}_d$ obtained at the global stage (**Figure A.18**). Due to the particular choice made for search direction $\mathbf{H}^+$ (see (A.2)), it also simply reads:

$$\delta_L^{(n+1)} = \frac{\|u^{(n+1)} - u^{(n)}\|}{\frac{1}{2}\|u^{(n+1)} + u^{(n)}\|} = \frac{\|\delta u^{(n+1)}\|}{\frac{1}{2}\|u^{(n+1)} + u^{(n)}\|} \tag{A.9}$$

Under the hypothesis of a monotonous operator $g(u; \boldsymbol{\mu})$, the iterative scheme converges to the reference solution $\mathbf{s}_{ref}$ for any choice of symmetric positive operator $\mathbf{H}^-$ [22].

Appendix B. LATIN-PGD final algorithm

The final algorithm of the LATIN-PGD nonlinear solution strategy is given in **Algorithm 2**.

Remark 4. *The computation of an admissible initial solution $s^{(0)} = (u^{(0)}, w^{(0)}) \in \mathbf{A}_d$ depends on the problem to solve. It can be obtained by solving the problem for a given value of parameter or a simplified problem by neglecting nonlinear terms. One can also solve **Problem 6** for $n = -1$ by a progressive Galerkin PGD with **Algorithm 1**. In this case, the first generated spatial function Φ_1 can be chosen as the first element of the reduced-order basis $\mathcal{W}_1$. For more details on the initialization of the algortihm, the interested reader can refer for example to [31].*

Appendix C. Minimization of the RPM functional

Minimization of functional $J(\{(a_{ij}, b_{ij})\}_{1 \leqslant j \leqslant m_x})$ with $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ (see (27)) leads to:

$$\begin{aligned} &\forall (\delta a_{ik}, \delta b_{ik}), \\ &\sum_{k=1}^{m_x} \Bigg[\Delta\omega_k \; \lambda_{ik}^2 \int_{\mathcal{D}_i} (\delta a_{ik}(\mu) \; b_{ik}(x_k) + a_{ik}(\mu) \; \delta b_{ik}(x_k)) \; (\bar{A}_{ik}(\mu) - a_{ik}(\mu) b_{ik}(x_k)) \, d\mu \; + \ldots \\ &\qquad \ldots \; \Delta\mu_i \int_{\Omega_j} (\delta a_{ik}(\mu_i) \; b_{ik}(x) + a_{ik}(\mu_i) \; \delta b_{ik}(x)) \; (\bar{B}_{ik}(x) - a_{ik}(\mu_i) b_{ik}(x)) \; dx \Bigg] = 0 \end{aligned} \tag{C.1}$$

Algorithm 2 LATIN-PGD nonlinear solution strategy

$s^{(-1)} = (u^{(-1)}, w^{(-1)}) \leftarrow (0,0)$ ▷ Initialization
Compute $\hat{s}^{(-1/2)} = (\hat{u}^{(-1/2)}, \hat{w}^{(-1/2)})$ ▷ Solve local stage (A.2) for $n=-1$
Compute $s^{(0)} = (u^{(0)}, w^{(0)}) \in \mathbf{A}_d$ ▷ Solve **Problem 6** for $n=-1$ (see **Remark 4**)
Create reduced-order basis $\mathcal{W}_1 \leftarrow \{\Phi_1\}$ ▷ See **Remark 4**
for $n=0$ to n_{max} **do** ▷ LATIN iterations
  procedure LOCAL STAGE
    Compute $\hat{s}^{(n+1/2)} = (\hat{u}^{(n+1/2)}, \hat{w}^{(n+1/2)}) \in \mathbf{\Gamma}$ ▷ Solve local stage (A.2)
  end procedure
  procedure GLOBAL STAGE ▷ Compute $s^{(n+1)} = (u^{(n+1)}, w^{(n+1)}) \in \mathbf{A}_d$
    Update parameter functions $\{\lambda_i \leftarrow \lambda_i + \delta\lambda_i\}_{1\leqslant i\leqslant k}$ ▷ Solve preliminary step **Problem 4**
    $\breve{u}_k^{(n+1)} = u^{(0)} + \sum_{i=1}^{k} \Phi_i\ \lambda_i$
    Compute performance indicator η_0 (5)
    if $\eta_0 \leqslant tol$ **then**
      Generate a new PGD pair $(\lambda_{k+1}, \Phi_{k+1})$ with **Algorithm 1**
      procedure ROB UPDATE ▷ Use Gram-Schmidt process with inner product $(\cdot,\cdot)$
        Update parameter functions $\{\lambda_i \leftarrow \lambda_i + \lambda_{k+1}(\Phi_i, \Phi_{k+1})\}_{1\leqslant i\leqslant k}$
        Orthogonalize space function $\Phi_{k+1} \leftarrow \overline{\Phi}_{k+1}$ w.r.t. current ROB $\mathcal{W}_k$
        if Φ_{k+1} is a "new" function **then**
          Update ROB $\mathcal{W}_k \leftarrow \mathcal{W}_{k+1}$ by adding new orthogonalized function
          $u^{(n+1)} = u^{(0)} + \sum_{i=1}^{k+1} \Phi_i\ \lambda_i$
        else
          $u^{(n+1)} = u^{(0)} + \sum_{i=1}^{k} \Phi_i\ \lambda_i$
        end if
      end procedure
    else
      $u^{(n+1)} = \breve{u}_k^{(n+1)}$
    end if
    $w^{(n+1)} = \hat{w}^{(n+1/2)} + \mathbf{H}^{-}\left(u^{(n+1)} - \hat{u}^{(n+1/2)}\right)$
  end procedure
  Check LATIN convergence indicator δ_L (A.9)
end for

By considering variations $(\delta a_{ik}, \delta b_{ik})$ such that $\forall\ (i,k)$, $\delta b_{ik}(x) = 0$ and $\delta a_{ik}(\mu_i) = 0$, one gets from (C.1): for $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ and $1 \leqslant k \leqslant m_x$:

$$a_{ik}(\mu) = \frac{\sum_{k=1}^{m_x} \Delta\omega_k\ b_{ik}(x_k)\ \bar{A}_{ik}(\mu)\ \lambda_{ik}^2}{\sum_{k=1}^{m_x}\ \Delta\omega_k\ b_{ik}^2(x_k)\ \lambda_{ik}^2}, \quad \forall\ \mu \in \mathcal{D}_i \tag{C.2}$$

Similarly, by considering variations $(\delta a_{ik}, \delta b_{ik})$ such that $\forall\ (i,k)$, $\delta b_{ik}(x_j) = 0$ and $\delta a_{ik}(\mu) = 0$, (C.1) leads to: for $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ and $1 \leqslant k \leqslant m_x$:

$$b_{ij}(x) = \frac{\bar{B}_{ij}(x)}{a_{ij}(\mu_i)}, \quad \forall\ x\ \in \Omega_j \tag{C.3}$$

Equation (C.3) and (C.2) gives: for $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ and $1 \leqslant k \leqslant m_x$:

$$a_{ij}(\mu) = \left(\frac{\sum_{k=1}^{m_x} \Delta\omega_k\ \bar{A}_{ik}(\mu)\ \bar{B}_{ik}(\mu_i)\ \lambda_{ik}^2}{\sum_{k=1}^{m_x}\ \Delta\omega_k\ \bar{B}_{ik}(x_k)^2\ \lambda_{ik}^2}\right) a_{ik}(\mu_i), \quad \forall\ \mu \in \mathcal{D}_i \tag{C.4}$$

Since $\bar{B}_{ik}(x_k) = \bar{A}_{ik}(\mu_i)$ by definition of the generalized components (see (24)), this also reads:

$$a_{ij}(\mu) = \left(\frac{\sum_{k=1}^{m_x} \Delta\omega_k\ \bar{A}_{ik}(\mu)\ \bar{A}_{ik}(\mu_i)\ \lambda_{ik}^2}{\sum_{k=1}^{m_x}\ \Delta\omega_k\ \bar{A}_{ik}(\mu_i)^2\ \lambda_{ik}^2}\right) a_{ij}(\mu_i), \quad \forall\ \mu \in \mathcal{D}_i \tag{C.5}$$

Reconstruction $\bar{\bar{F}}$ of F (see (26)) is given by: for $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ and $1 \leqslant j \leqslant m_x$:

$$F(\mu,x) \approx \bar{\bar{F}}(\mu,x) = \left(\frac{\sum_{k=1}^{m_x} \Delta\omega_k \ \bar{A}_{ik}(\mu) \ \bar{A}_{ik}(\mu_i) \ \lambda_{ik}^2}{\sum_{k=1}^{m_x} \ \Delta\omega_k \ \bar{A}_{ik}(\mu_i)^2 \ \lambda_{ik}^2} \right) \bar{B}_{ij}(x), \quad \forall (\mu,x) \in \mathcal{D}_i \times \Omega_j \tag{C.6}$$

Without changing the reconstruction, one can slightly modify the expressions (C.5) and (C.3) for functions a_{ij} and b_{ij} by scaling a_{ij} and multiplying b_{ij} by $a_{ik}(\mu_i)$, their product remaining unchanged. This leads to the following explicit formulas: for $1 \leqslant i \leqslant m_\mu$ and $1 \leqslant j \leqslant m_x$:

$$a_{ij}(\mu) = \frac{\sum_{k=1}^{m_x} \Delta\omega_k \ \bar{A}_{ik}(\mu) \ \bar{A}_{ik}(\mu_i) \ \lambda_{ik}^2}{\sum_{k=1}^{m_x} \Delta\omega_k \ \bar{A}_{ik}(\mu_i)^2 \ \lambda_{ik}^2} \qquad \text{and} \qquad b_{ij}(x) = \bar{B}_{ij}(x) \tag{C.7}$$

References

[1] A. Chatterjee, An introduction to the proper orthogonal decomposition, Current Science 78 (7) (2000) 808–817.

[2] J. A. Atwell, B. B. Kings, Proper orthogonal decomposition for reduced basis feedback controllers for parabolic equations, Mathematical and computer modelling 33 (2001) 1–19.

[3] K. Kunish, L. Xie, Pod-based feedback control of the burgers equation by solving the evolutionary hjb equation., Computers and Mathematics With Applications 49(7-8) (2005) 5730 – 5742.

[4] K. Carlberg, C. Bou-Mosleh, C. Farhat, Efficient nonlinear model reduction via a least-squares petrov-galerkin projection and compressive tensor approximations., International Journal for Numerical Methods in Engineering 86 (1) (2010) 155–181.

[5] S. Zhu, L. Dedè, A. Quarteroni, Isogeometric analysis and proper orthogonal decomposition for parabolic problems, Numerische Mathematik 135 (2) (2017) 333–370.

[6] G. Kerschen, J. Golinval, A. Vakakis, L. Bergman, The method of proper orthogonal decomposition for dynamical characterization and order reduction of mechanical systems: An overview, Nonlinear Dynamics 1 (41) (2005) 147–169.

[7] P. Glüsmann, E. Kreuzer, On the application of karhunen–loève transform to transient dynamic systems, Journal of Sound and Vibration 328 (4-5) (2009) 507–519.

[8] L. Boucinha, A. Ammar, A. Gravouil, A. Nouy, Ideal minimal residual-based proper generalized decomposition for non-symmetric multi-field models – application to transient elastodynamics in space-time domain, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 273 (1) (2014) 56–76.

[9] C. Prud'homme, D. Rovas, K. Veroyand, L. Machiels, Y. Maday, A. Patera, G. Turinici, Reliable real-time solution of parametrized partial differential equations: Reduced-basis output bound methods, Journal of Fluids Engineering 124 (1) (2002) 70–80.

[10] Y. Maday, E. M. Ronquist., The reduced-basis element method: application to a thermal fin problem, SIAM Journal on Scientific Computing 26(1) (2004) 240–258.

[11] K. Veroy, A. T. Patera, Certified real-time solution of the parametrized steady incompressible navier-stokes equations: rigorous reduced-basis a posteriori error bounds, International Journal for Numerical Methods in Fluids 47 (1) (2005) 773–788.

[12] N. Nguyen, K. Veroy, A. Patera, Certified real-time solution of parametrized partial differential equations, Vol. Handbook of materials modeling, Springer, Berlin, 2005, pp. 1523 – 1558.

[13] G. Rozza, Reduced-basis methods for elliptic equations in sub-domains with a posteriori error bounds and adaptivity, Applied Numerical Mathematics (55) (2004) 403–424.

[14] A. Quarteroni, G. Rozza, A. Manzoni, Certified reduced basis approximation for parametrized partial differential equations and applications, Journal of Mathematics in Industry 1 (1) (2011) 3.

[15] M. Grepl, Y. Maday, N. Nguyen, A. Patera, Efficient reduced-basis treatment of nonaffine and nonlinear partial differential equations, Modélisation mathématique et analyse numérique 41 (3) (2007) 575–605.

[16] G. Rozza, A. T. Patera, Reduced basis approximation and a posteriori error estimation for affinely parametrized elliptic coercive partial differential equations, Archives of Computational Methods In Engineering (15) (2008) 229–275.

[17] J. Galvis, S. K. Kang, Spectral multiscale finite element for nonlinear flows in highly heterogeneous media: A reduced basis approach, Journal of Computational and Applied Mathematics 260 (1) (2014) 494–508.

[18] F. Chinesta, P. Ladevèze, E. Cueto, A short review on model order reduction based on proper generalized decomposition, Arch Comput Methods Eng (18) (2011) 395–404.

[19] F. Chinesta, P. Ladevèze, Separated Representations and PGD-Based Model Reduction: Fundamentals and Applications, CISM International Centre for Mechanical Sciences, Springer Vienna, 2014.

[20] F. Chinesta, R. Keunings, A. Leygue, The Proper Generalized Decomposition for Advanced Numerical Simulations: A Primer, SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology, Springer International Publishing, 2013.

[21] P. Ladevèze, Sur une famille d'algorithmes en mécanique des structures, Comptes Rendus Académie des Sciences. Paris. Ser. II (300) (1985) 41–44.

[22] P. Ladevèze, Nonlinear Computational Structural Mechanics - new approaches and non-incremental methods of calculation, Mechanical Engineering Series, Springer New York, 1999.
[23] P. Boisse, P. Bussy, P. Ladevèze, A new approach in non-linear mechanics: the large time increment method, International Journal for Numerical Methods in Engineering 29 (1990) 647–663.
[24] D. Ryckelynck, Réduction a priori de modèles thermomécaniques, Compte Rendu Mecanique 330 (2002) 499–505.
[25] P. Ladevèze, A. Nouy, On a multiscale computational strategy with time and space homogenization for structural mechanics, Computational Methods Applied Mechanical Engineering (192) (2003) 3061–3087.
[26] P. Ladevèze, J.-C. Passieux, D. Néron, On multiscale computational mechanics with time-space homogenization, Oxford University Press, 2009, pp. 247–282.
[27] P. Ladevèze, J.-C. Passieux, D. Néron, The latin multiscale computational method and the proper generalized decomposition, Computational Methods Applied Mechanical Engineering (199) (2010) 1287–1296.
[28] P. Ladevèze, On reduced models in nonlinear solid mechanics, European Journal of Mechanics - A/Solids 60 (2016) 227–237.
[29] A. Nouy, A priori model reduction through proper generalized decomposition for solving time-dependent partial differential equations, Computational Methods Applied Mechanical Engineering 199 (23-24) (2010) 1603–1626.
[30] G. Bonithon, A. Nouy, A priori tensor approximations for the numerical solution of high dimensional problems: alternative definitions, in: 28th GAMM-Seminar Leipzig on Analysis and Numerical Methods in Higher Dimensions, Leipzig, Allemagne, 2012.
[31] D. Néron, P.-A. Boucard, N. Relun, Time-space pgd for the rapid solution of 3d nonlinear parametrized problems in the many-query context, International Journal for Numerical Methods in Engineering 103 (4) (2015) 275–292.
[32] D. Amsallem, J. Cortial, K. Carlberg, C. Farhat, A method for interpolating on manifolds structural dynamics reduced-order models, International Journal for Numerical Methods in Engineering 80 (1) (2009) 1241–1258.
[33] M. Barrault, Y. Maday, N. Nguyen, A. Patera, An 'empirical interpolation' method: application to efficient reduced-basis discretization of partial differential equations, Comptes Rendus Académie des Sciences. Paris. Ser. I (339) (2004) 667–672.
[34] N. C. Nguyen, J. Peraire, An efficient reduced-order modeling approach for non-linear parametrized partial differential equations, International Journal for Numerical Methods in Engineering 76 (2008) 27–55.
[35] S. Chaturentabut, D. Sorensen, Nonlinear model reduction via discrete empirical interpolation, Society for Industrial and Applied Mathematics 32 (5) (2010) 2737–2764.
[36] D. Ryckelynck, A priori hypereduction method: an adaptive approach, International Journal of Computational Physics 202 (1) (2005) 346–366.
[37] P. Astrid, S. Weiland, K. Willcox, T. Backx, Missing point estimation in models described by proper orthogonal decomposition, IEEE Transactions on Automatic Control 53 (10) (2008) 2237 – 2251.
[38] K. Carlberg, C. Farhat, J. Cortial, D. Amsallem, The gnat method for nonlinear model reduction : Effective implementation and application to computational fluid dynamics and turbulent flows, Journal of Computational Physics (242) (2013) 623–647.
[39] C. Farhat, P. Avery, T. Chapman, J. Cortial, Dimensional reduction of nonlinear finite element dynamic models with finite rotations and energy-based mesh sampling and weighting for computational efficiency, International Journal for Numerical Methods in Engineering 98 (9) (2014) 625–662.
[40] P. Ladevèze, A computational technique for the integrals over the time-space domain in connection with the latin method (in french), Tech. Rep. 193, LMT Cachan (1997).
[41] R. Glowinski, P. Tallec, Augmented Lagrangian and operator-splitting methods in nonlinear mechanics, SIAM studies in applied mathematics, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1989.
[42] C. Heyberger, P.-A. Boucard, D. Néron, Multiparametric analysis whitin the proper generalized decomposition framework, Computational Mechanics 49 (3) (2011) 277–289.
[43] N. Relun, D. Néron, P. Boucard, A model reduction technique based on the pgd for elastic-viscoplastic computational analysis, Computational Mechanics.
[44] J. V. Aguado, F. Chinesta, A. Leygue, E. Cueto, A. Huerta, Deim-based pgd for parametric nonlinear model order reduction, in: J. P. M. de Almeida, P. Diez, C. Tiago, N. Parés (Eds.), VI International Conference on Adaptive Modeling and Simulation, ADMOS, 2013.
[45] F. Chinesta, A. Leygue, F. Bordeu, J. V. Aguado, E. Cueto, D. Gonzalez, I. Alfaro, A. Ammar, A. Huerta, Pgd-based computational vademecum for efficient design, optimization and control, Archives of Computational Methods in Engineering 20 (1) (2013) 31–59.

PREPRINT
6
R. Verwaerde, P.-A. Guidault, P.-A. Boucard. A nonlinear finite element connector for the simulation of bolted assemblies.*Computational Mechanics*, 63:1531–1548, 2020.

A nonlinear finite element connector for the simulation of bolted assemblies

R. Verwaerde[a], P.-A. Guidault[a], P.-A. Boucard[a]

[a] *Université Paris-Saclay, ENS Paris-Saclay, CNRS, LMT - Laboratoire de Mcanique et Technologie, 94235, Cachan, France.*

Abstract

Fine scale computations of bolted assemblies are generally too costly and hardly tractable within an optimization process. Thus, Finite Elements (FE) connectors or user-elements are commonly used in FE commercial codes by engineers as substitutes for bolts. In this paper, a non-linear FE connector with its identification methodology is proposed to model the behaviour of a single-bolt joint. The connector model is based on design parameters (bolt prestress, friction coefficient, bolt characteristics...). The axial behaviour of the connector reflects the preload effect and the axial bolt stiffness. The tangential connector behaviour accounts for frictional phenomena that occur in the bolt's vicinity due to preload thanks to an elasto-plastic analogy for friction. Tangential and normal behaviours identification is performed on a generic elementary single bolt joint. The connector has been implemented in ABAQUS through a user-element subroutine. Comparisons of the quasistatic responses between full fine scale 3D computations and 3D simulations with connectors on various bolted assemblies are proposed. Results are in good agreement and a significant gain in terms of CPU time is obtained.

Keywords: Bolted joint, nonlinear user-element, connector, frictional contact, simplified model

1. Introduction

Bolted joints are widely used in many fields of mechanical engineering, such as aerospace or automotive industries. In spite of well-established design rules and assembly procedures, important sources of uncertainty remain due to a high sensitivity of the joint mechanical behaviour to dispersions (tightening procedure, frictional effects, geometrical tolerances, bolt-hole clearance...). Additionally, these structures are subjected to complex loads and are including numerous non-linear effects. The difficulties in taking these effects into account often lead designers to use excessive safety coefficients. For those reasons, the general design method of bolted connections leads to oversized structures, while the weight of aeronautical structures always remains a crucial issue. Thus, the need for enhanced design methods where the emphasis is on mass and cost optimizations must be balanced with predictive simulations that account for all these complex phenomena.

Some of those complicated phenomena in the vicinity of the bolt are studied in the literature, such as the tightening and loosening processes due to shear loading [1]. The modelling of the axial

behaviour of a bolted assembly subjected to axial load is examined in [2] in order to determine an equivalent stiffness depending on various geometrical parameters, material properties and friction coefficients. Moreover, influences of other parameters such as the bolt thread [3] or the magnitude and the position of the external load [4] on those coefficients were also studied.

Furthermore, the need for a fine description of the geometrical details often requires a very fine FE mesh size and a high number of solver iterations due to non-linear phenomena. A three-dimensional FE method for modelling friction in composite bolted joints is presented in [5]. An elaborated numerical analysis of the structural behaviour of single-lap protruding composite joints under tensile loading has been conducted in [6]. In this article, a three-dimensional progressive damage FEM model is used, which involves a combination of Hashin's failure Criteria, ply-discount material degradation rules and penalty method. Many methods exist to take into account other modes of degradation in composite bolted joints, such as delamination, matrix cracking or failure in [7, 8, 9]. Assemblies subjected to complex fatigue loads are laid out in [10, 11]. Other major phenomena such as secondary bending may have a large impact on fatigue control of assemblies. This phenomenon occurs in single overlapping joints, when the neutral bending line is discontinuous and has eccentricities. Numerical studies of the secondary bending phenomenon on FE models including rivets have been carried out in [12]. A 3D FE method to study secondary bending due to the eccentric load path in composite-to-aluminium lap joints has also been developed in [13]. Unfortunately, 3D models with very fine FE mesh size are computationally expensive. It may require dedicated computational strategies, such as domain decomposition with parallel computing [14], especially in the case of parametric studies with a significant number of configurations [15].

Consequently, simplified models are required during the optimization or design phases. In order to model large assemblies with a considerable number of fasteners, alternative computational strategies have been developed. An important part of the simplified models remains one-dimensional models, where bolts and assemblies parts are represented by spring models. They can model load distribution in multi-bolt joints and are able to take into account loss of stiffness due to bearing damage, clearance and location errors [16], or adhesion and slip state with plastic deformation-shearing [17]. Despite a significant gain in term of computational time in comparison with the initial 3D model, these models are often limited to elementary geometries, and do not take into account non-linear effects in the vicinity of the fastener.

Several approaches studied in literature use equivalent elements to consider the mechanical state of the assembly and reduce the complexity of fasteners in FE models. Common engineering practices make use of two-nodes connectors or user-elements available in commercial FE codes in order to model the behaviour of bolted joints that connect 3D or plate models of the assembled parts. The connector behaviour is generally identified from fine scale 3D computations on an elementary bolted joint and/or from experimental campaigns, which are often costly and where non-linear phenomena remains difficult to identify. A linear connector element which links the six degrees of freedom in each connecting node of element joints is presented in [18], where the connector kinematics is based on degrees of freedom decoupling assumption. A static case is described in [19], where fastened elements are represented with two-dimensional elastic bodies, and the interaction between the joining element and the elastic body is modelled by normal displacements prescribed on distributed springs. Friction is taken into account with the addition of external tractions in an iterative process. Each fixation is finally represented by a non-linear relation between the transferred force and the relative displacements. The impact of bolt-hole clearance for a quasi-static problem on the load distribution in composite multi-bolt joints is studied in [20]. Stiffnesses of the equivalent elements are then analytically determined, assuming the fact that frictional effects are negligible. However, identification is often limited in literature to the elastic part of the behaviour and for a given set of loadings and design parameters. For specific situations, analytical models [21, 22, 23, 24, 25] are also available, but they mainly address linear static or dynamic problems.

More elaborated connector models have been recently developed. Ekh and Schön display structural elements in [26], considering the mechanisms governing the load distributing process in the

vicinity of the bolt such as out-of-plane distribution, bolt-hole clearance, friction between assembled parts, and fastener flexibility. Comparisons with results obtained experimentally and with detailed FE analyses are in good agreement. The Global Bolted Joint Model (GBJM) presented by Gray et al. in [27] puts forward a different modelling strategy for bolted composite joints. Shell elements are employed to form the composite laminates, and the bolt is substituted by a combination of beam elements coupled to rigid contact surfaces, taking into account non-linear behaviours such as bolt-hole clearance, bolt torque, friction between laminates. Despite the robustness and the accuracy of those methods, identification of equivalent element stiffnesses remains difficult, and the physical sense of the identified parameters stays far from corresponding 3D model values.

An innovative reduced model of a fastener using Multi-Connected Rigid Surfaces (MCRS) has been recently introduced by Askri et al. in [28]. The analysis of deformation modes of an assembly in a single lap configuration led the authors to model the fastener with 4 rigid surfaces coupled to 4 nodes with 2 translational and 2 rotational stiffnesses. The equivalent stiffnesses of the elements are based on a single 3D simulation of a bolted joint with a given bolt-hole clearance, bolt preload and friction coefficient. Comparisons between 3D and reduced models for loads leading to contact between the hole and the bolt are in excellent agreement for global and local behaviours of the assembly. However, the suggested reduced model remains in a linear range, and requires a rigidification of surfaces under the screw head and nut.

In this work, a non-linear FE connector with its identification methodology is proposed to model the behaviour of a bolt joint. Model parameters are based on design parameters (bolt preload, friction coefficient, bolt-hole clearance, bolt dimensions...)[29]. Axial connector behaviour models the preload effect and the axial bolt stiffness [2]. Tangential connector behaviour accounts for frictional phenomena that occur in the bolt's vicinity due to preload thanks to an elasto-plastic analogy for friction [30]. Contributions of the different elements, such as the bolt or the interface between the attached plates, are separated. This allows the introduction of different non-linear behaviours for each element, and the separation of the different mechanisms. Identification of tangential behaviour is performed on a generic elementary single 3D bolted joint [31, 32]. Model parameters have a strong mechanical sense. The connector has been developed in ABAQUS through a Fortran user-element subroutine [33]. Comparisons between fine scale 3D computations and simulations with connectors on various bolted assemblies are proposed.

The article is structured as follows. A phenomenological study of a bolted connection is presented in **Section 2**. A 3D reference model presenting the different design parameters is proposed, as well as the modelling principles of the proposed connector model. The connector behaviour model is detailed in **Section 3**. The linearization of contact conditions and the numerical integration is detailed. An identification strategy is suggested in **Section 4**, in order to obtain a set of parameters for a given bolt preload, friction coefficient and geometrical dimensions of the reference model. The method is validated in **Section 5** on a more complex case with a bolted assembly of flanged housings.

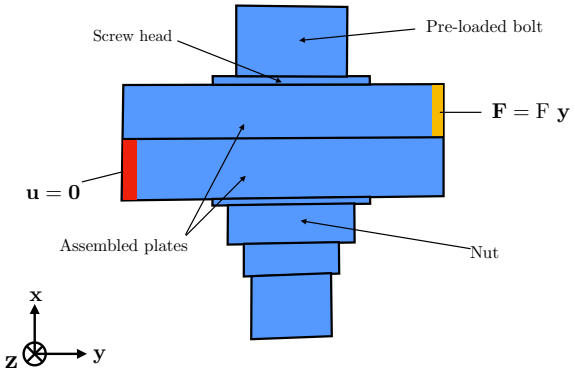
2. Bolted joint mechanics and modelling choices

This section focuses on the phenomenological description of an elementary bolted assembly. More precisely, the framework of the proposed study is defined, as well as the quantities of interest used in the subsequent work.

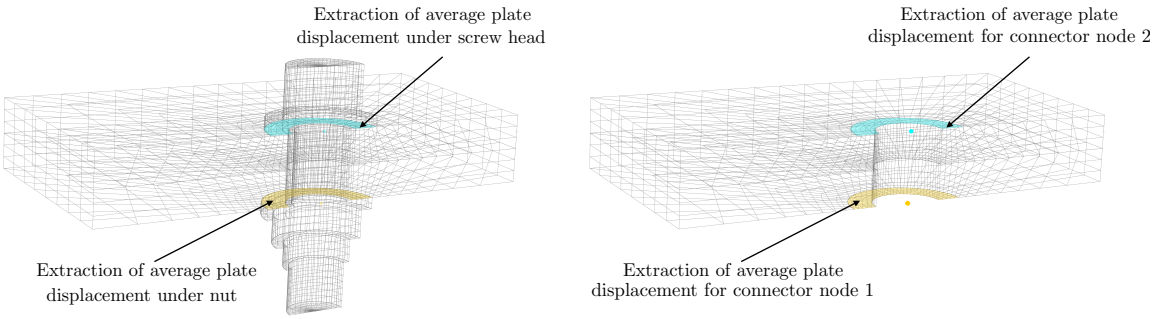
2.1. Analysis of a single lap bolted joint test

The studied elementary bolted joint is presented in **Figure 1(a)**, as well as boundary conditions. Two plates are assembled using a bolt, and frictional contact conditions between the plates and in the vicinity of the screw head and nut are set up. Friction coefficients are different between the assembled plates (0.1) and in the others frictional contact areas (0.15). All these elements

are meshed with quadratic hexahedral elements. The 3D reference model studied is composed of 180,000 degrees of freedom.



(a) Elements of a single lap joint test and boundary conditions applied



(b) Areas used for estimation of $\boldsymbol{g}_T$ for the 3D reference model

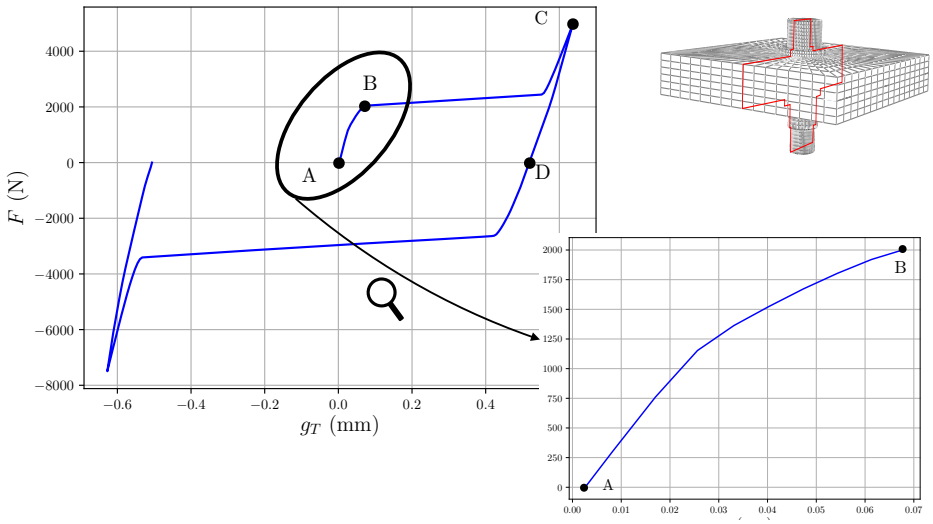
(c) Areas used for estimation of $\boldsymbol{g}_T$ for the connector model

Figure 1: Description of the elementary single lap bolted joint test

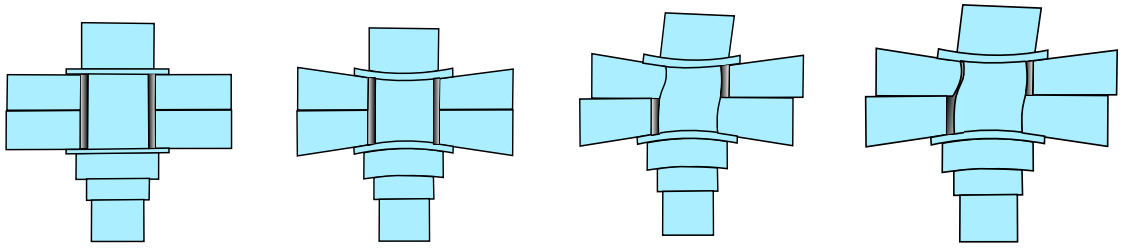
The assembly is first preloaded and subsequently subjected to a shear loading-unloading cycle. The average tangential displacement jump of the nodes of the assembled elements in the vicinity of the screw head and nut, denoted by $\boldsymbol{g}_T$ is recorded during the loading cycle, as it is shown in **Figure 1(b)**. More precisely, $\boldsymbol{g}_T$ corresponds to the jump of mean displacements extracted on the bearing surfaces under screw head and nut on the assembled plates as depicted in **Figure 1(b)**. **Figure 2(a)** shows the evolution of the displacement jump $\boldsymbol{g}_T$ as a function of the applied load. Several stages are identified, including:

- an elastic behaviour and micro-slip phenomena between point A and B;
- a macroscopic sliding between the assembled elements, followed by a stiffened behaviour due to contact between the screw body and the hole between point B and C;
- an elastic unloading between point C and D, with a residual displacement jump when the external loading becomes zero, due to frictional phenomena that occur during the whole cycle.

Figure 2 shows a cross-section view of the deformed assembly at points A, B, C and D illustrating these phenomena. The suggested cutting plan is shown in **Figure 2(a)**. In this work, only the



(a) Evolution of the displacement jump $\boldsymbol{g}_T$ as a function of the applied load



(b) Initial configuration A (c) Micro-slip B (d) Bolt-hole contact C (e) Unload D

Figure 2: Phenomenological behaviour of a bolted assembly subjected to a shear cycle

micro-slip part is investigated (i.e. the AB segment in **Figure 2(a)**) since industrial bolted joints are *a priori* sized so that point B is not reached. The macroscopic sliding stage (i.e. the BC segment in **Figure 2(a)**) would require a quasi-dynamic or even dynamic framework and is therefore not within the scope of our study.

2.2. Modelling choices and assumptions for the two-nodes connector model

Characteristic elements of a 2-nodes FE connector as a substitute for the bolt are shown in **Figure 3**. It is divided into *coupling zones*, connected to *master nodes* via kinematic couplings, modelling the interactions between the screw head and the nut with the plates. A *connector* taking into account all frictional phenomena in the vicinity of the assembly finally connects the master nodes.

The connector normal behaviour (in the bolt axis) takes bolt preload into account. The tangential behaviour in the normal plane of the connector axis reflects the bending stiffness of the bolt as well as the friction phenomena at the interface of the assembled plates. Identification of the connector parameters is presented in **Section 4**. All of them reflect a strong mechanical sense and rely on phenomena involved in the vicinity of the assembly.

The modelling choices and main assumptions are the following:

- bolt parts will remain in their linear elastic range, under small-perturbations assumption;
- friction phenomena are only taken into account in the connector in order to limit the number of frictional contact conditions thanks to the Rötscher's cone, which gives an approximation

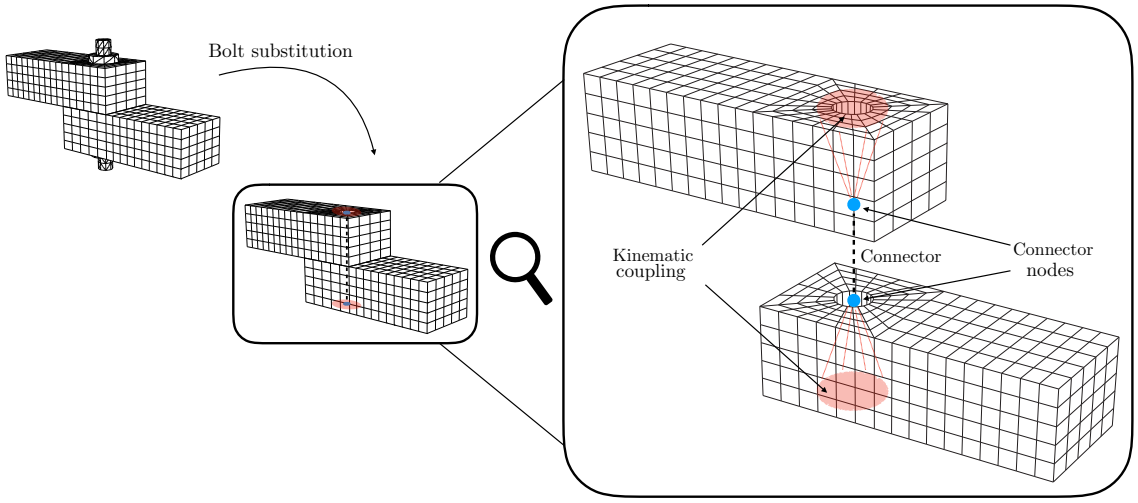


Figure 3: Bolt substitution by a two-nodes connector model and kinematic couplings

of the contact area and pressure distribution, allowing the effects of friction to be located in the vicinity of the bolted area; consequently, frictionless contact conditions will be used elsewhere;

- kinematic couplings are defined thanks to classical functionalities available in legacy FE softwares: in an average sense with a *Distributing Coupling* or in a more rigid way with a *Multi-Points Constraints* in ABAQUS [34];
- connector behaviour is considered equivalent to a Timoshenko beam behaviour in parallel with a one-dimensional friction model as illustrated in **Section 2.3**.

2.3. Definition of normal and tangential gaps

In the following, bold lowercase is used for vectors. Moreover, a quantity a evaluated at time increment n will be denoted by $a_{(n)}$. Similarly, a quantity a_i will be denoted by $a_{i,(n)}$. Connector initial and current configurations are presented in **Figure 4**.

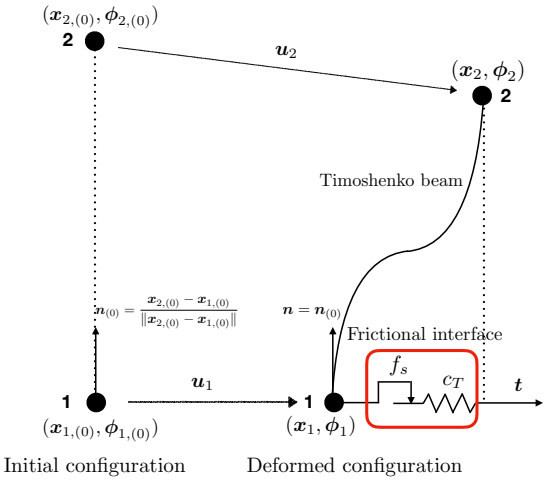


Figure 4: Connector model and kinematics

The location (or position) of a connector node in the current configuration, $\boldsymbol{x}_1$ (resp. $\boldsymbol{x}_2$) is determined by adding the displacement $\boldsymbol{u}_1$ (resp. $\boldsymbol{u}_2$) to the reference location $\boldsymbol{x}_{1,(0)}$ (resp. $\boldsymbol{x}_{2,(0)}$):

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_{1,(0)} + \boldsymbol{u}_1 \quad \text{and} \quad \boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{x}_{2,(0)} + \boldsymbol{u}_2 \tag{1}$$

The rotations of the master nodes are similarly defined, so that in the current configuration, $\boldsymbol{\phi}_1$ (resp. $\boldsymbol{\phi}_2$) is determined by adding the rotation increment $\boldsymbol{\theta}_1$ (resp. $\boldsymbol{\theta}_2$) to the reference configuration $\boldsymbol{\phi}_{1,(0)}$ (resp. $\boldsymbol{\phi}_{2,(0)}$):

$$\boldsymbol{\phi}_1 = \boldsymbol{\phi}_{1,(0)} + \boldsymbol{\theta}_1 \quad \text{and} \quad \boldsymbol{\phi}_2 = \boldsymbol{\phi}_{2,(0)} + \boldsymbol{\theta}_2 \tag{2}$$

The *normal* (or *axial*) direction $\boldsymbol{n}$ is defined under the small-perturbations assumption by:

$$\boldsymbol{n} \approx \boldsymbol{n}_{(0)} = \frac{\boldsymbol{x}_{2,(0)} - \boldsymbol{x}_{1,(0)}}{\|\boldsymbol{x}_{2,(0)} - \boldsymbol{x}_{1,(0)}\|} \tag{3}$$

The *normal* (resp. *tangential*) displacement jumps g_N (resp. $\boldsymbol{g}_T$) are defined using the normal contact direction in the current configuration $\boldsymbol{n}$ and the global displacement jump $\boldsymbol{g}$, defined as follows:

$$\boldsymbol{g} = \boldsymbol{u}_2 - \boldsymbol{u}_1 = g_N\, \boldsymbol{n} + \boldsymbol{g}_T \tag{4}$$

by introducing under the small perturbation assumption the projection operator $\Pi(\cdot) = (\boldsymbol{I}_3 - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n})(\cdot)$ on the local tangent plane, defined as the normal plane to $\boldsymbol{n}$ by:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} g_N & = & (\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_1) \cdot \boldsymbol{n} - g_{N,(0)} \\ & \approx & (\boldsymbol{u}_2 - \boldsymbol{u}_1) \cdot \boldsymbol{n}_{(0)} \\ \boldsymbol{g}_T & = & \Pi\,(\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_1) = (\boldsymbol{I}_3 - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n})\,(\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_1) \\ & \approx & (\boldsymbol{I}_3 - \boldsymbol{n}_{(0)} \otimes \boldsymbol{n}_{(0)})\,(\boldsymbol{u}_2 - \boldsymbol{u}_1) \end{array} \right. \tag{5}$$

where $\boldsymbol{I}_3$ corresponds to the dimension 3 identity matrix.

3. Connector behaviour model

The connector behaviour model and the resulting assumptions are presented in this section. In particular, it is proposed to study independently the influence of friction phenomena between the assembled elements on one side, and the bolt itself on the other side. The identification strategy proposed in **Section 4** results from this suggested behaviour model.

3.1. Modelling choices and constitutive equations

In the following, two types of behaviours are distinguished: the *normal* behaviour in the axial direction of the connector, and the *tangential* behaviour in the plane normal to the connector axis.

Normal behaviour takes into account the influence of preload, as well as tensile and compressive stresses in bolt axis direction. It is thus illustrated by a *normal* stiffness denoted by c_N. It is also characterized by a internal normal force denoted by t_N and the resultant of normal contact loads, denoted by p_N. Links between c_N, t_N and p_N are detailed in **Section 3.3**.

Following the phenomenological study of an elementary bolted connection carried out in **Section 2**, the tangential behaviour is driven by several independent contributions:

- the tangential behaviour of the bolt, accounted by a beam model with a bending stiffness c_{bolt} (see **Figure 4**);
- the shear behaviour of the assembled elements, assimilated to a spring stiffness c_{pl};
- interactions due to contact rubbing at the interface of the assembled elements, assimilated to a spring stiffness c_{int}, which may be seen as a regularization term for the friction law from a numerical point of view.

The identification of the numerical value of the parameters c_{bolt}, c_{pl} and c_{int} is proposed in **Section 4**.

The phenomenological approach displays two different states when the assembly is subjected to shear loading. When preload remains sufficiently significant compared to external load, an *adherent* (or *elastic*) state occurs, where there is no sliding between the assembled elements. A spring stiffness $c_{pl}+c_{int}$, denoted by c_T in the following, influencing only the translation displacements of connector nodes in tangential direction, as well as a beam with a stiffness denoted by c_{bolt} influencing the translation and rotation displacements, are acting in parallel, as shown in **Figure 4**.

When loads resulting from friction phenomena at the interface are no longer sufficiently substantial to counterbalance external load, a *sliding* (or *plastic*) state occurs, where only the beam contributes to the overall behaviour of the assembly.

A threshold function f_s monitoring the transition from the adherent state to the sliding state therefore depends on the resultant of the contact forces p_N, a friction coefficient μ and the internal tangential force denoted by $\boldsymbol{t}_T$, as shown in **Section 3.2**.

3.2. Elasto-plastic analogy for frictional contact

Considering that the contact between the plates has to be friction-free in order to reduce the computational time, the connector has to take into account the friction phenomena and the dissipative effects they cause. The implementation of friction phenomena at the interface of bolted elements is detailed in this section. Coulomb's law and other equations of friction may be formulated within the framework of elasto-plasticity [30].

The key idea of the elasto-plastic approach is a split of the tangential slip $\boldsymbol{g}_T$ into an elastic (or adhesive) part $\boldsymbol{g}_T^e$ and a plastic (or sliding) part $\boldsymbol{g}_T^s$:

$$\boldsymbol{g}_T = \boldsymbol{g}_T^e + \boldsymbol{g}_T^s \tag{6}$$

The simplest possible model for the elastic part of the tangential contact is an isotropic linear elastic relation, which yields:

$$\boldsymbol{t}_T = c_T \; \boldsymbol{g}_T^e \tag{7}$$

where c_T is defined as in **Section 3.1**.

The plastic part of the tangential slip $\boldsymbol{g}_T^s$ is driven by an evolution equation which may be formulated using standard concepts from elasto-plasticity theory [35]. For the classical Coulomb's law, the following threshold function may be used:

$$f_s(\boldsymbol{t}_T) = \|\boldsymbol{t}_T\| - \mu \, p_N \leqslant 0 \tag{8}$$

which is the plastic slip criterion for a given (positive) contact pressure p_N. The constitutive evolution equation for the plastic part may be stated in a form of a slip rule as follows:

$$\dot{\boldsymbol{g}}_T^s = \lambda \, \frac{\partial f_s(\boldsymbol{t}_T)}{\partial \boldsymbol{t}_T} = \lambda \, \boldsymbol{n}_T \quad \text{with} \quad \boldsymbol{n}_T = \frac{\boldsymbol{t}_T}{\|\boldsymbol{t}_T\|} \tag{9}$$

In addition, Kuhn-Tucker's conditions must be satisfied, i.e.

$$\lambda \geq 0, \quad f_s(\boldsymbol{t}_T) \leq 0, \quad \lambda f_s(\boldsymbol{t}_T) = 0. \tag{10}$$

Parameter λ represents the magnitude of the plastic slip at each increment. It is obtained using a radial return mapping algorithm detailed in **Appendix A**.

3.3. Normal behaviour modelling

Normal behaviour is determined before tangential behaviour, since it results in the determination of the connector internal normal force t_N as well as the estimation of the contact pressure p_N required for the evaluation of the threshold function f_s. The connector must also account for the influence of the preload applied on the assembly.

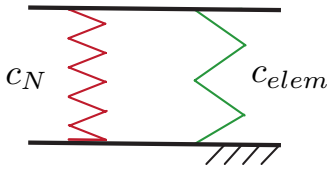


Figure 5: One-dimensional model of normal behaviour

In order to understand how the bolt preload is taken into account, let first consider the simplified one-dimensional example depicted in **Figure 5** where c_N represents the connector normal stiffness and c_{elem} corresponds to the equivalent normal stiffness of the connector environment. The behaviour of the connector environment is assumed to remain in its elastic linear domain in order to alleviate the notations in the following. The appplication to non-linear behaviours is straightforward. In its initial state and before the application of an external load, the assembly is pre-loaded with a preload P_C. The difficulty is the lack of knowledge of the normal stiffness of the assembled elements c_{elem}.

For this purpose, without any external load, the first computation increment is used to estimate this stiffness. A difficulty is that the preload must be imposed through the internal normal force t_N. The internal normal force in the connector is defined by:

$$t_N = P_C + c_N g_N \tag{11}$$

with notations defined in **Section 2.3**. Similarly, the internal force in the assembled elements is equal to $c_{elem} g_N$, assuming a linear behaviour as discussed previously. The internal force of the problem depicted in **Figure 5** simply reads:

$$f_{N,int}(g_N) = t_N(g_N) + c_{elem} g_N. \tag{12}$$

The correction of the displacement jump increment $\delta g_{N,(n)}$ is such that:

$$g_{N,(n)} = g_{N,(n-1)} + \delta g_{N,(n)} \tag{13}$$

and is obtained by solving the following tangent problem (14):

$$(c_N + c_{elem})\, \delta g_{N,(n)} = -f_{N,int}(g_{N,(n-1)}) \tag{14}$$

In the case of linear elasticity and by considering that $g_{N,(0)}$ is initialized to 0, it converges in one iteration and leads to:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} g_{N,(1)} & = & g_{N,(0)} + \delta g_{N,(1)} = -\dfrac{P_C}{c_N + c_{elem}} \\ t_N(g_{N,(1)}) & = & P_C + c_N g_{N,(1)} = P_C \dfrac{c_{elem}}{c_N + c_{elem}} \end{array} \right. \tag{15}$$

It can therefore be seen that, after this initial step, the normal stress in the bolt t_N is not equal to the preload P_C, but depends on the stiffnesses c_N and c_{elem}. It is nevertheless possible to modify the preload introduced in (11) by multiplying it by the factor $\dfrac{c_N + c_{elem}}{c_{elem}}$ in order to obtain the correct internal force t_N.

Thus, the preload is corrected accordingly in subsequent increments by a proportionality rule, replacing P_C by $P_C \dfrac{c_N + c_{elem}}{c_{elem}} = \dfrac{P_C^2}{t_{N,(1)}}$, where $t_{N,(1)} = t_N(g_{N,(1)})$, in the definition of the internal force t_N given by (11).

Consequently, for all increments n other than the initial increment ($n > 1$), t_N is therefore estimated by:

$$t_{N,(n)} = \frac{P_C^2}{t_{N,(1)}} + c_N g_{N,(n)}. \tag{16}$$

With this new definition of t_N, (12) becomes:

$$f_{N,int} = t_N + c_{elem} g_N = P_C \frac{c_N + c_{elem}}{c_{elem}} + (c_N + c_{elem}) g_N \tag{17}$$

In the case of linear elasticity and without external loads, this leads to:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} g_{N,(2)} & = & -\dfrac{P_C}{c_{elem}} \\ t_{N,(2)} & = & P_C \end{array} \right. \tag{18}$$

It converges in one iteration to the desired internal normal force P_C.

The resultant of the normal contact force p_N could be determined at each calculation step from the integrated contact pressure on the contact elements located at the interface between the assembled plates in the bolt's vicinity, and, subsequently, returned as an input parameter to the connector routine. For the sake of simplicity, only an estimation of p_N is determined.

The equation (15) gives an estimation of the value of c_{elem} by

$$c_{elem} = \frac{t_{N,(1)}}{P_C - t_{N,(1)}} c_N \tag{19}$$

At the initial step, the resultant of the normal contact force p_N is simply defined as follows:

$$p_{N,(1)} = P_C. \tag{20}$$

For the subsequent load increments, one estimates p_N by the following expressions:

$$\begin{array}{rcl} p_{N,(n+1)} & = & \left\langle -c_{elem} g_{N,(n+1)} \right\rangle_+ \\ & = & \left\langle -\dfrac{t_{N,(1)}}{P_C - t_{N,(1)}} c_N g_{N,(n+1)} \right\rangle_+ \end{array} \tag{21}$$

where the positive part $\langle \cdot \rangle_+$ is introduced to account for the fact that the resultant of normal contact force is zeroing if assembled parts separate from each other.

3.4. Numerical integration of the friction law

The update of the tangential stress $\boldsymbol{t}_{T,(n+1)}$ is carried out by a radial return mapping algorithm based on an integration (backward Euler) of the evolution equation for the plastic slip. The algorithm is given in **Algorithm 1** and detailed in **Appendix A**. The elasto-plastic tangent modulus computed by the routine is detailed in **Appendix C**.

The projection of the trial stresses $\boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)}$ which do not fulfil the slip condition is graphically depicted in **Figure 6** for a two-dimensional case. As can be seen, the quantity of $\boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)}$ which exceeds the tangential load allowed according to Coulomb's law $\mu\, p_{N,(n+1)}$ is used to adjust loads leading to $\boldsymbol{t}_{T,(n+1)}$. Furthermore, the increase of the slip (inelastic) part of the relative tangential motion $\boldsymbol{g}^s_{T,(n+1)}$ is shown graphically.

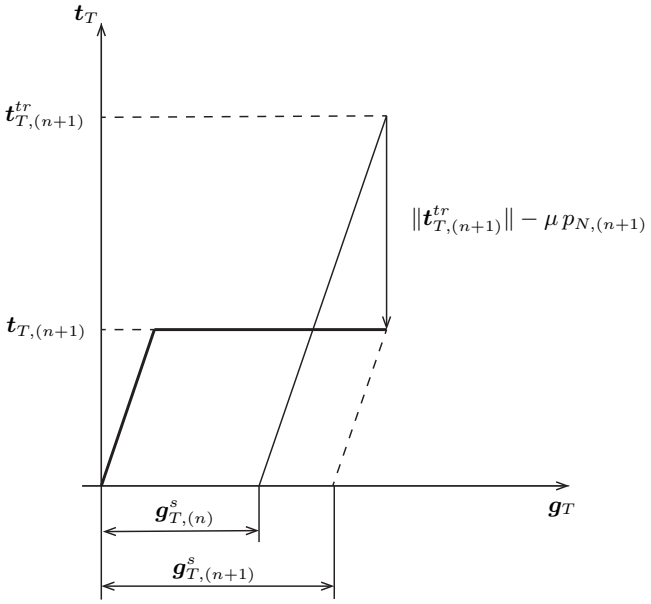


Figure 6: Projection of trial stress onto the yield/slip surface

4. Identification strategy of the connector parameters

The connector behaviour choice has been detailed in **Section 3**. A reminder of the parameters to be identified and a procedure for identifying the connector parameters are presented in this section.

The parameters that must be identified must be consistent with the different loading modes of the assembly:

- quantities related to the connector normal behaviour: a normal stiffness c_N for the tensile/compressive behaviour and a stiffness c_{tor} for torsional loadings in the direction of bolt axis;
- a bending stiffness c_{bolt} related to the Timoshenko beam behaviour;
- a tangential stiffness $c_T = c_{int} + c_{pla}$ associated with friction phenomena at the interface between the assembled plates (regularization paramter c_{int}), and with the equivalent shear stiffness c_{pla} of plates;
- an equivalent friction coefficient μ driving the threshold function associated with micro-slip phenomena.

Some of these stiffnesses may be determined analytically [2, 21, 22, 37]. The strategy presented in this paper proposes to identify all these parameters from a 3D reference FE model of a single bolt assembly, assumed to be representative of those used in a given bolted structure.

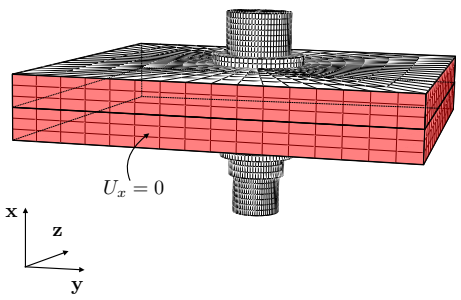
An example of numerical values resulting from the identification strategy is presented in **Section 4.2**.

4.1. Numerical strategy for parameters identification

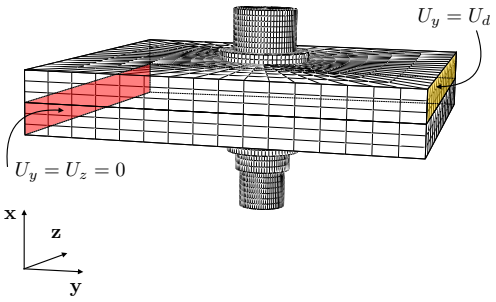
Assembly loading modes have been separated into three elementary loads which are tension/compression, torsion and shear. The proposed identification strategy is therefore based on three distinct simulations, which are isolating the contribution of each element to the assembly global behaviour with different boundary conditions and loads.

The connector model remains in the linear domain for tensile/compressive and torsional loads. The identification of c_N and c_{tor} is therefore carried out by respectively measuring the average displacement and average rotation of the plates nodes located under the screw head and under the nut as it is shown in **Figure 1(b)**, respectively when a tensile load and torsion load is imposed.

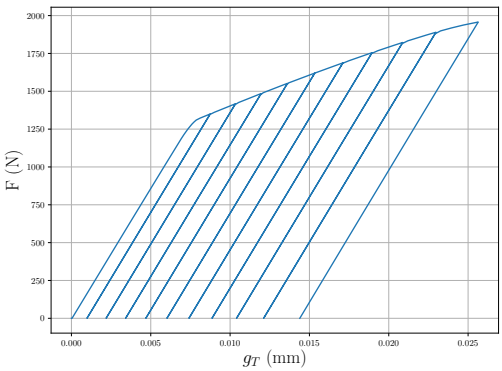
The remaining parameters are determined using a simulation of a single lap joint under shear loading. Boundary conditions applied on an elementary preloaded bolted assembly are shown in **Figure 7(a)** and **Figure 7(b)**. **Figure 7(a)** shows the boundary conditions in the axial bolt direction: the four lateral faces of the two assembled plates are locked in bolt axis direction, preventing an overall rotation of the assembly. **Figure 7(b)** represents the boundary conditions in the tangential direction: the lower plate is clamped on one of its lateral surfaces, and a tangential displacement is imposed on the opposite lateral surface of the upper plate. This configuration makes it possible to study the behaviour of the assembly in pure shear, preventing rotational movements of the assembly, but leaving free the local rotation of the bolt due to bending phenomena near the screw head and nut.



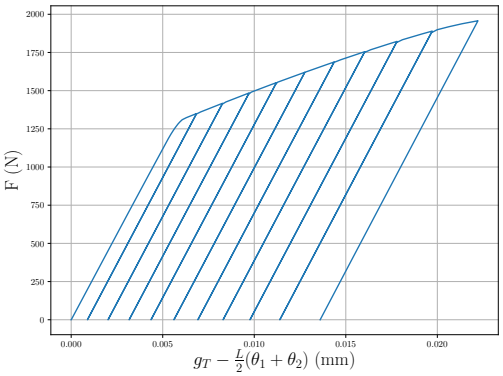
(a) Surfaces where U_x is prescribed to zero



(b) Supplementary boundary conditions



(c) Tangential behaviour in **y** direction



(d) Tangential behaviour in **y** direction corrected by rotations around **z**

Figure 7: Identification of tangential behaviour

For this study, the assembled plates are in aluminium ($E = 70$ GPa, $\nu = 0.3$) and the bolt is in steel ($E = 210$ GPa , $\nu = 0.3$).

The response to several loading-unloading cycles of increasing amplitude is presented in **Figure 7(c)**, where average displacement and average rotation measured as presented in **Figure 1(b)** are compared to the resultant force in **y** direction which works with prescribed displacement U_d, denoted by F.

Two different states are displayed, corresponding respectively to the adherent and to the micro-slip states. Only the beam (shown by c_{bolt}) plays a role during the micro-slip state, while both the

bolt and the frictional interface influence the behaviour of the adherent state. In accordance with the beam behaviour reminded in **Appendix C**, tangential load of a Timoshenko beam during the micro-sliding state is expressed as a function of the displacement jump $\boldsymbol{g}_T$, the length of the beam L and the sum of the rotations as

$$\boldsymbol{t}_T = c_{bolt} \left(\boldsymbol{g}_T - \frac{L}{2}(\theta_1 + \theta_2) \right). \tag{22}$$

The c_{bolt} coefficient is then obtained using the **Figure 7(d)** by determining the slope of the behaviour during the micro-slip phase.

Parameter c_T is then identified using **Figure 7(c)**. The average of the discharges slopes, corresponding to the elastic adherent state is removed from the influence of the bolt behaviour previously identified, to determine the behaviour of the rubbing interface.

Finally, the friction coefficient μ driving the threshold function is determined by dividing the load value of the frictional interface at the transition from the adherent state to the micro-slip state, by the resultant of normal actions p_N at this time increment.

4.2. Physical interpretation of connector parameters

The connector parameters have a strong mechanical meaning, and their numerical values are close to the physical phenomena they represent. They depend on several model parameters, such as geometric dimensions of the bolt, material parameters of the bolted elements, or friction coefficient of the 3D reference model. The model used for identification is parameterized, and identification is automated. Any bolt configuration is easily identified with the suggested strategy.

The identification strategy has been applied to an elementary assembly. The results are resumed in **Table 1**. A comparison between the connector model and the reference model is presented in **Figure 8**. Results are very similar. The slight differences for high loads may be explained by the increase of micro-slip phenomena. However, the results are satisfactory for a large loading range. Bolts used in numerical cases of **Section 5** are identical, allowing comparison between 3D reference model and model with connectors.

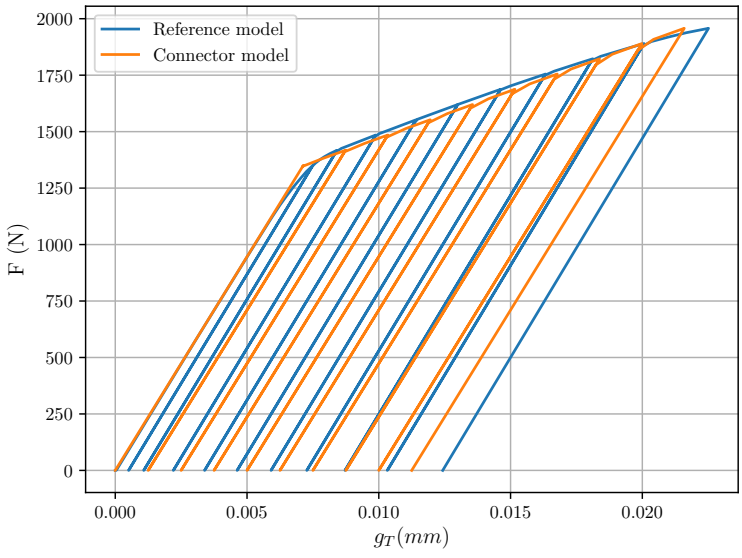


Figure 8: Comparison between reference model and identified connector model

c_N	$2.63 \times 10^5 N.mm^{-1}$
c_{tor}	$7.62 \times 10^5 N.mm$
c_{bolt}	$2.55 \times 10^4 N.mm^{-1}$
c_T	$1.50 \times 10^5 N.mm^{-1}$
μ	0.105

Table 1: Identified values for connector parameters

The identified friction coefficient is very close to the friction coefficient between the assembled elements use in the 3D reference model, which is equal to 0.1 in our case.

5. Numerical examples

5.1. Multi-bolted elementary assembly

The geometry is described in **Figure 9**. The bolts are identical to those used in **Section 4**. Thus, the identified connector parameters used are those of **Table 1**.

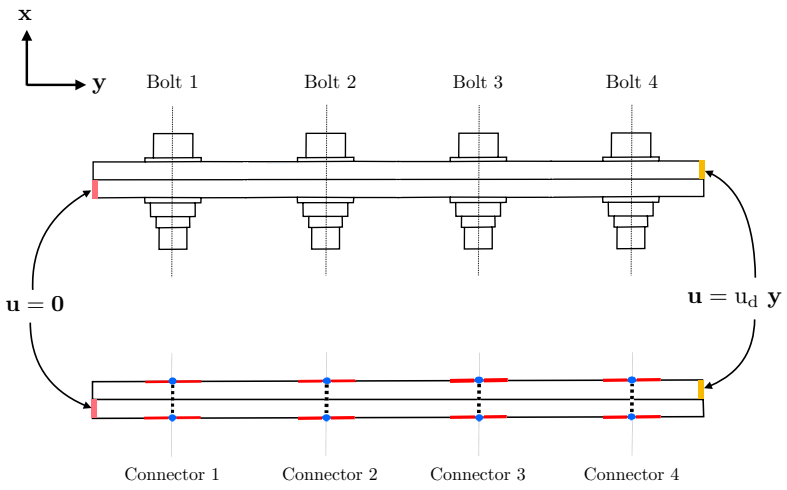


Figure 9: Description of the 3D reference model and the connector model

During the first computation step, bolts are subjected to a preload equivalent to $10,000\ N$. The assembly is then subjected to a shear loading by prescribing a displacement U_d in y direction at the right-hand end of the upper plate in **Figure 9**. Left end of the bottom plate is clamped. The assembled plates are in aluminium ($E = 70$ GPa, $\nu = 0.3$) and the bolts are in steel ($E = 210$ GPa $, \nu = 0.3$). For the 3D reference model, the friction coefficient between the plates, under screw heads and under nuts is set to 0.1. As a reminder, all contacts are frictionless contacts for the simulation with connectors.

Elements used for the simulation are hexahedral elements (C3D8 in ABAQUS). The simulation is divided into 200 time increments.

The deformed shape of both models at the final time step are presented in **Figure 10**. There is a very good agreement between the 3D reference model and the connector model.

Evolutions of tangential gap at each bold/connector as defined in **Figure 1** are shown in **Figure 11**. There is also a good agreement between the two models.

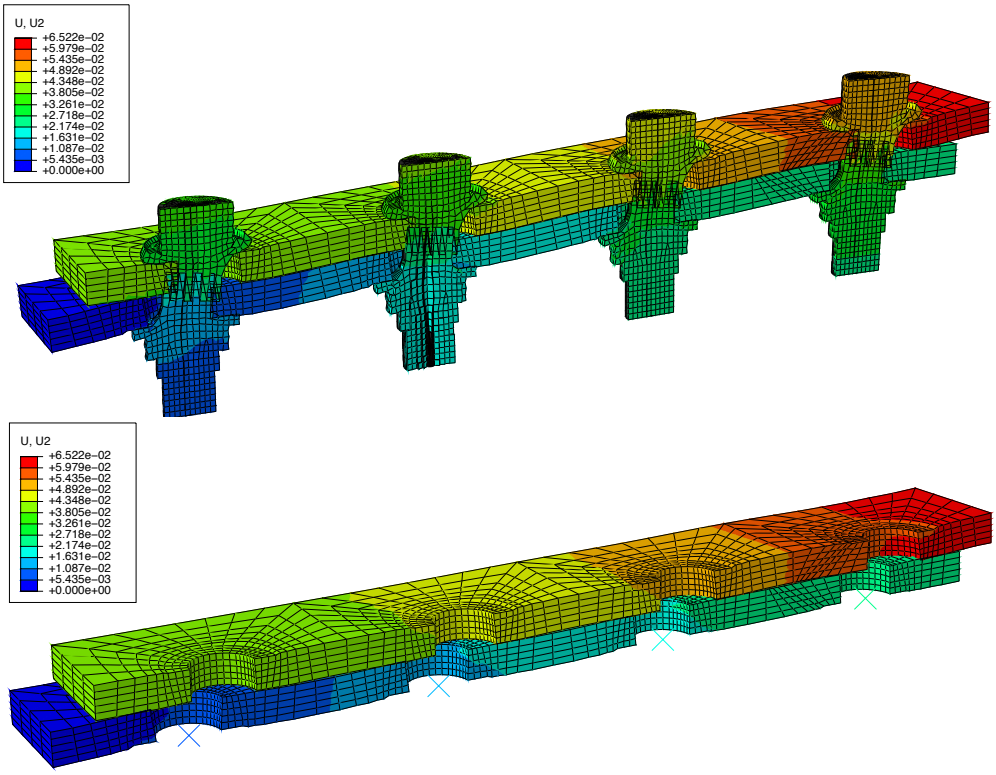


Figure 10: Comparison of the tangential displacement field between the 3D reference model and the connector model (scale factor = 100)

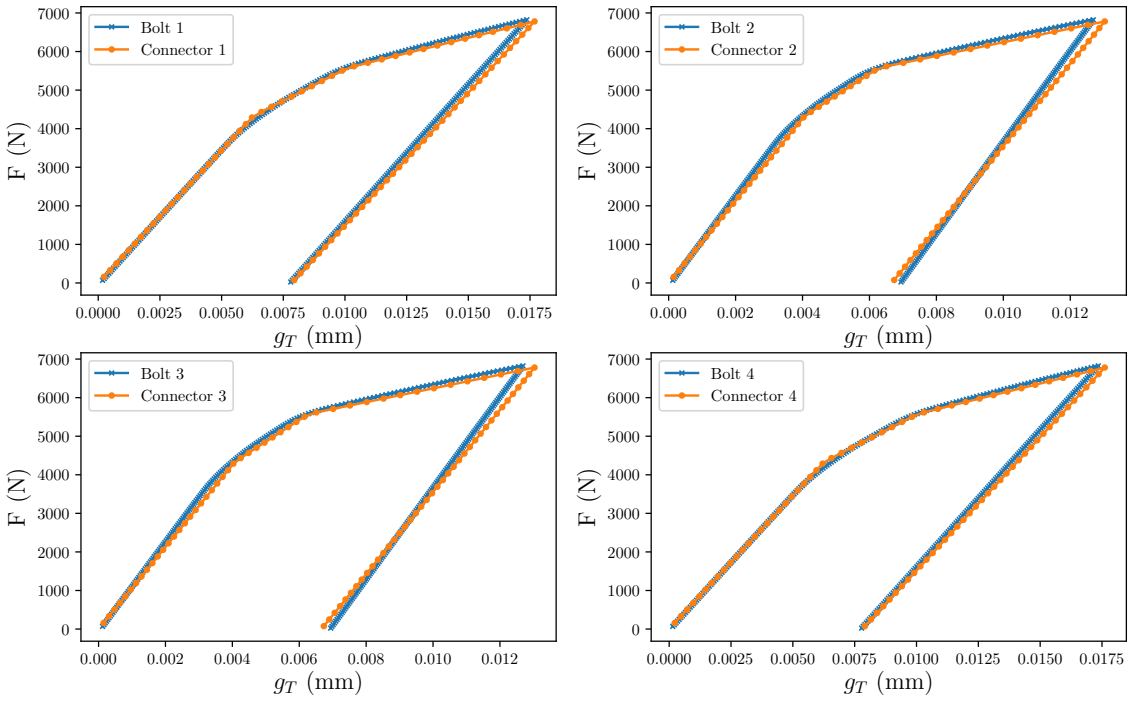


Figure 11: Tangential gap for each bolt/connector versus the magnitude of the resulting load F

The value of the cumulated slip at each connector is shown in **Figure 12**. The local sliding of connectors 1 and 4 is observed before connectors 2 and 3, and explains slope changes which can be seen in the connector model response.

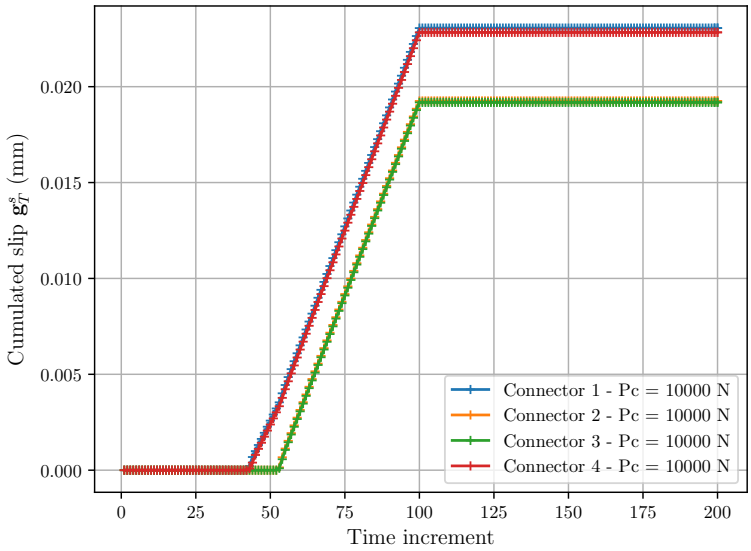


Figure 12: Cumulated slip at each connector

The gains in terms of computation time as well as the number of solver iterations are presented in **Table 2**.

	Reference model	Connector model
CPU time (s)	$14,067$	$1,670$
Number of dof	$305,212$	$73,596$
Newton iterations	295	49

Table 2: Comparison of CPU time for the 4-bolts assembly

Computations were performed with 16 Gb of RAM memory on a node of two Intel Xeon 6148 2.40 GHz processors. The speed-up observed for this example is equal to 8.42. This is a satisfactory result, which is mainly explained by a significant decrease of model number of degrees of freedom (gain of a factor of 4.15), but also by a reduction of the Newton solver iterations number (gain of a factor of 1.98), thanks to the elimination of friction conditions between the assembled elements.

5.2. Assembly of aeronautical casings

The test case presented in this section represents a simplified model of a bolted turbo-jet turbine casing (**Figure 13**). The assembly contains 120 bolts. The bolts are identical to the one identified in **Section 4**, and no additional identification is required. Using the problem cyclic symmetry, only one fifteenth of the problem is modelled, corresponding to a sector of 8 bolts differently preloaded.

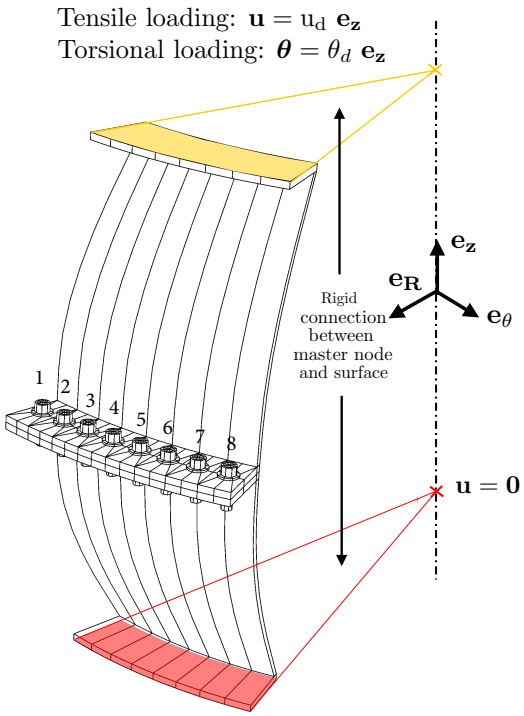


Figure 13: Boundary conditions for turbine casings test-case

For the sake of simplicity, the same material properties as those given in **Section 5.1** are chosen, i.e. aluminium for plates ($E = 70$ GPa, $\nu = 0.3$) and steel for bolts ($E = 210$ GPa ,$\nu = 0.3$). Consequently, the same values of connector parameters are retained as given in Table 1. The friction coefficient in each frictional contact area is still equal to 0.1 for the 3D reference simulation, and all contacts are still frictionless for the connector model simulation. The elements used are still C3D8 elements. Tensile and torsional loading-unloading are prescribed with 200 time increments. Simulations are performed with the same computer configuration than the one of example presented in **Section 5.1**.

The lower housing is clamped on its lower surface, and two different loads are applied, as it is represented in **Figure 13**: a tensile loading, where the upper housing is subjected to loading along the axis of symmetry, and a torsional loading, where the upper housing is subjected to a torque along the same axis of symmetry. Different preload values within the range of 10 $kN \pm 30\%$ are considered for the 8 bolts, as given in **Table 3**.

Bolt number	1	2	3	4	5	6	7	8
Preload (kN)	9	13	7	10	11	8	12	10

Table 3: Preloads applied to the bolts

It is worth noting at the fact that even though different preload values are here used, connector parameter identification does not have to be performed for each preload value. Consequently, the same values of connector parameters identified in **Section 4** for a preload of 10 kN have be used regardless of the preload used subsequently.

Comparisons between the 3D reference model and the connector model are made for the two

different load cases. **Figure 14** shows the evolution of the axial displacement jump for Bolt and Connector 1 as a function of the resultant force in **z** direction which works with prescribed displacement u_d. Only the result for Bolt 1 is presented since the responses for the other bolts are similar.

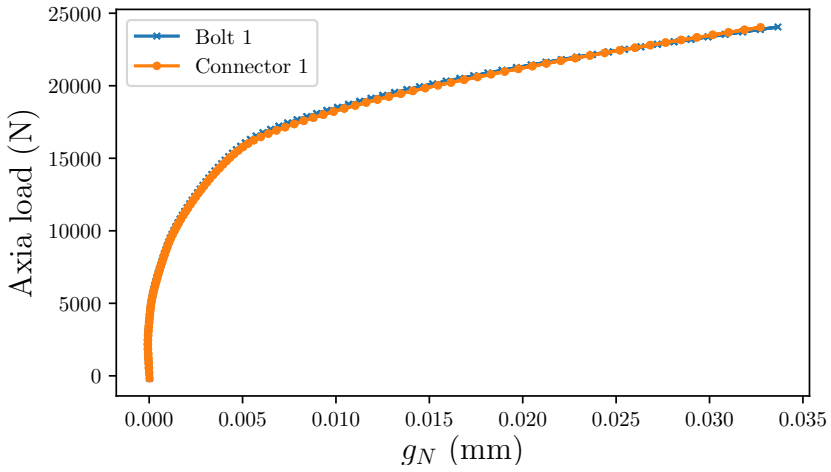


Figure 14: Normal gap for Bolt/Connector 1 compared to the magnitude of axial load resulting from prescribed displacement u_d

Figure 15 shows the evolution of tangential gap $\|\boldsymbol{g}_T\|$ of each bolt as a function of the magnitude of the torque resulting from the prescribed rotation θ_d. The results given by the two models are in good agreement.

Performances in terms of computation time are presented in **Table 4**. An interesting speed-up of about $2 - 2.5$ for both loading cases is obtained.

	Reference model	Connector model
Number of d.o.f.	230,840	102,624
Traction load		
CPU time (s)	8,247	3,230
Newton iterations	443	298
Speed-up	2.55	
Torsion load		
CPU time (s)	4,165	1,908
Newton iterations	72	13
Speed-up	2.18	

Table 4: CPU time comparison for the turbine casing assembly

6. Conclusion

The phenomenological analysis of an elementary bolted assembly and the non-linear phenomena governing its behaviour has been investigated in order to propose a non-linear FE connector model, as well as a dedicated identification methodology.

Non-linear phenomena such as frictional contact at the interface of the bolted elements are taken into account only in the proposed connector model, allowing a significant computational time reduction, while ensuring a satisfactory quality of the results.

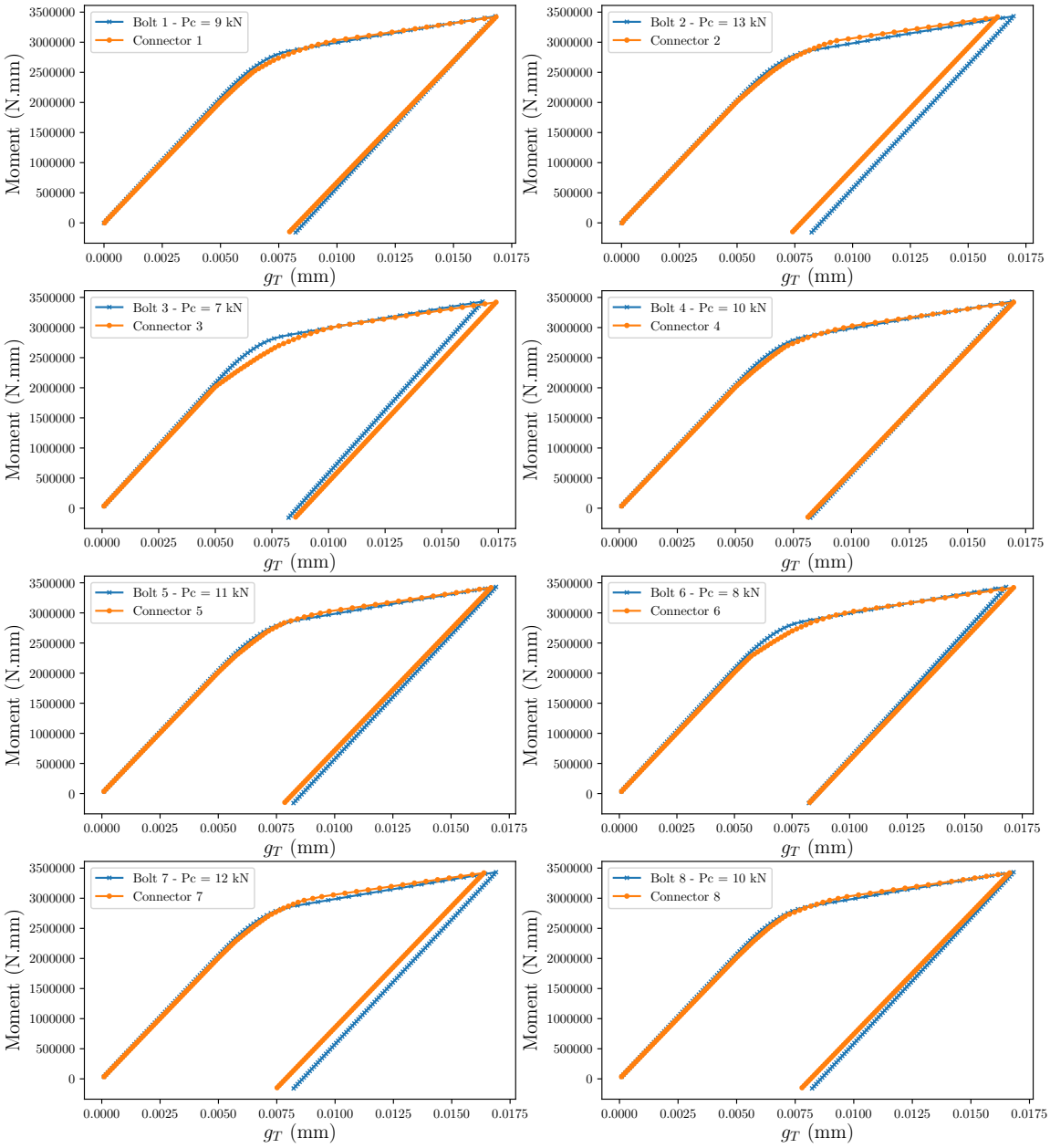


Figure 15: Tangential gap for each bolt/connector versus magnitude of the prescribed torque

The comparison between a model of a flanged housing portion with connectors and an entire 3D reference model validates the suggested approach. Encouraging computation time gains, ranging from 2 to 8 were observed, while maintaining a satisfactory quality of results.

Future work will focus on the industrial need to reduce calculation times even further, in order to simulate the addition of plasticity in bolts. A sensitivity analysis of the connector parameters to several input factors (discretization, preload, plate thickness ...) will be also investigated. The case of bolted assemblies undergoing large displacements or rotations will be also addressed in future works.

Acknowledgments

This work was performed using HPC resources from the "Mésocentre" computing center of CentraleSupélec and École Normale Supérieure Paris-Saclay supported by CNRS and Région Île-de-France (http://mesocentre.centralesupelec.fr/).

Appendix A. Radial return mapping algorithm

1. **Increment of tangential gap within the time step** Δt_{n+1}
   As specified in (5), the expression of the tangential displacement jump $\boldsymbol{g}_T$ is given by:

$$\Delta g_{T,(n+1)} = (\boldsymbol{I}_3 - \boldsymbol{n}_{(0)} \otimes \boldsymbol{n}_{(0)}) \left(\Delta u_{2,(n+1)} - \Delta u_{1,(n+1)}\right) \tag{A.1}$$

   in the case of small pertubations.
2. **Computation of the elastic trial state** from (7) and evaluation of the slip criterion (8) at time t_{n+1}. The trial state consists in assuming that the considered increment is purely elastic, and then correcting it according to the value of the obtained threshold function. Since the total slip $\boldsymbol{g}_{T,(n+1)} = \boldsymbol{g}_{T,(n)} + \Delta \boldsymbol{g}_{T,(n+1)}$ is decomposed into an elastic and a plastic part, one has:

$$\begin{array}{rcl} \boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)} & = & c_T \left(\boldsymbol{g}_{T,(n+1)} - \boldsymbol{g}^s_{T,(n)}\right) \\ & = & \boldsymbol{t}_{T,(n)} + c_T \, \Delta \boldsymbol{g}_{T,(n+1)} \end{array} \tag{A.2}$$

   Here the vector $\boldsymbol{t}_{T,(n)} = c_T \left(\boldsymbol{g}_{T,(n)} - \boldsymbol{g}^s_{T,(n)}\right)$ is the tangential force at time t_n. A value of the slip criterion which fulfills $f^{tr}_{s,(n+1)} \leqslant 0$ indicates stick. For $f^{tr}_{s,(n+1)} > 0$ sliding occurs in the tangential direction, and a return mapping of the trial tractions to the slip surface has to be performed. For Coulomb's model, one simply has:

$$f^{tr}_{s,(n+1)} = \|\boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)}\| - \mu \, p_{N,(n+1)} \tag{A.3}$$

   where $p_{N,(n+1)} = c_N |g_{N,(n+1)}|$ (since $g_{N,(n+1)} < 0$ when contact occurs) and where c_N is the normal connector stiffness.
3. **Return mapping procedure** is derived from the time integration algorithm. In case the implicit Euler scheme is applied to approximate the evolution equation (9), one obtains:

$$\boldsymbol{g}^s_{T,(n+1)} = \boldsymbol{g}^s_{T,(n)} + \lambda \, \boldsymbol{n}_{T,(n+1)} \tag{A.4}$$

   with

$$\boldsymbol{n}_{T,(n+1)} = \frac{\boldsymbol{t}_{T,(n+1)}}{\|\boldsymbol{t}_{T,(n+1)}\|} \tag{A.5}$$

   With the standard arguments regarding the projection schemes [36], one obtains:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \boldsymbol{t}_{T,(n+1)} & = & \boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)} - \lambda \, c_T \, \boldsymbol{n}_{T,(n+1)} \\ \boldsymbol{n}_{T,(n+1)} & = & \boldsymbol{n}^{tr}_{T,(n+1)} \end{array} \right. \tag{A.6}$$

   with

$$\boldsymbol{n}^{tr}_{T,(n+1)} = \frac{\boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)}}{\|\boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)}\|} \tag{A.7}$$

   The multiplication of (A.6) by $\boldsymbol{n}_{T,(n+1)}$ yields the condition from which λ may be computed:

$$\kappa(\lambda) = \|\boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)}\| - \mu p_{N,(n+1)} - c_T \, \lambda = 0 \tag{A.8}$$

since $\|\boldsymbol{t}_{T,(n+1)}\| - \mu p_{N,(n+1)} = 0$ on the yield surface.
Thus, one gets:

$$\lambda = \frac{1}{c_T}\left(\|\boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)}\| - \mu\, p_{N,(n+1)}\right) \tag{A.9}$$

Once λ is known, one obtains the explicit results for Coulomb's model:

$$\begin{array}{rcl} \boldsymbol{t}_{T,(n+1)} & = & \mu\, p_{N,(n+1)}\, \boldsymbol{n}^{tr}_{T,(n+1)} \\ \boldsymbol{g}^s_{T,(n+1)} & = & \boldsymbol{g}^s_{T,(n)} + \lambda\, \boldsymbol{n}^{tr}_{T,(n+1)} \end{array} \tag{A.10}$$

This update completes the local integration algorithm for the frictional interface law.

Appendix B. Elasto-plastic tangent modulus

Let us consider the yield surface described in (A.3):

$$f_s(\boldsymbol{t}_T, p_N) = \|\boldsymbol{t}_T\| - \mu p_N \tag{B.1}$$

Thus:

$$\begin{array}{rcl} \dot{f}_s(\boldsymbol{t}_T, p_N) & = & \dfrac{\partial f_s}{\partial \boldsymbol{t}_T}\dot{\boldsymbol{t}}_T + \dfrac{\partial f_s}{\partial p_N}\dot{p}_N \\ & = & \dfrac{\partial f_s}{\partial \boldsymbol{t}_T}\, c_T\, (\dot{\boldsymbol{g}}_T - \dot{\boldsymbol{g}}^s_T) + \dfrac{\partial f_s}{\partial p_N}\dot{p}_N \\ & = & \dfrac{\partial f_s}{\partial \boldsymbol{t}_T}\, c_T \left(\dot{\boldsymbol{g}}_T - \lambda \dfrac{\partial f_s(\boldsymbol{t}_T)}{\partial \boldsymbol{t}_T}\right) + \dfrac{\partial f_s}{\partial p_N}\dot{p}_N \end{array} \tag{B.2}$$

The consistency condition ($\lambda \dot{f}_s(\boldsymbol{t}_T, p_N) = 0$ if $f_s(\boldsymbol{t}_T) = 0$) enables one to determine λ:

$$\lambda = \frac{c_T \dfrac{\partial f_s}{\partial \boldsymbol{t}_T}\dot{\boldsymbol{g}}_T + \dfrac{\partial f_s}{\partial p_N}\dot{p}_N}{c_T \dfrac{\partial f_s}{\partial \boldsymbol{t}_T}\dfrac{\partial f_s}{\partial \boldsymbol{t}_T}} \tag{B.3}$$

Since $\dot{\boldsymbol{g}}^s_T = \dot{\gamma}\, \dfrac{\partial f_s(\boldsymbol{t}_T)}{\partial \boldsymbol{t}_T} = \dot{\gamma}\, \boldsymbol{n}_T = \lambda\, \boldsymbol{n}_T$, one deduces that:

$$\lambda = \frac{c_T\, \boldsymbol{n}_T^T\, \dot{\boldsymbol{g}}_T + \dfrac{\partial f_s}{\partial p_N}\dot{p}_N}{c_T\, \boldsymbol{n}_T^T \boldsymbol{n}_T} = \frac{c_T\, \boldsymbol{n}_T^T\, \dot{\boldsymbol{g}}_T + \dfrac{\partial f_s}{\partial p_N}\dot{p}_N}{c_T} \tag{B.4}$$

For the Coulomb's friction model, one obtains:

$$\lambda = \frac{c_T\, \boldsymbol{n}_T^T\, \dot{\boldsymbol{g}}_T - \mu \dot{p}_N}{c_T} \tag{B.5}$$

This provides the expression for $\dot{\boldsymbol{t}}_T$ as a function of $\dot{\boldsymbol{g}}_T$ and $\dot{g}_N$:

$$\begin{array}{rcl} \dot{\boldsymbol{t}}_T & = & c_T\, (\dot{\boldsymbol{g}}_T - \dot{\boldsymbol{g}}^s_T) \\ & = & c_T\, \dot{\boldsymbol{g}}_T - c_T\, \lambda\, \boldsymbol{n}_T \\ & = & c_T\, \dot{\boldsymbol{g}}_T - \dfrac{c_T\, \boldsymbol{n}_T \left(c_T\, \boldsymbol{n}_T^T\, \dot{\boldsymbol{g}}_T\right) - \mu\, c_T\, \dot{p}_N\, \boldsymbol{n}_T}{c_T} \\ & = & c_T\, (\mathbf{I_3} - \boldsymbol{n}_T \otimes \boldsymbol{n}_T)\, \dot{\boldsymbol{g}}_T + \mu\, c_N\, \mathrm{sign}\,(g_N)\, \dot{g}_N\, \boldsymbol{n}_T \end{array} \tag{B.6}$$

where $\boldsymbol{n}_T = \dfrac{\boldsymbol{t}_T}{\|\boldsymbol{t}_T\|}$ and $\mathrm{sign}(g_N) = -1$. Note that the frictional term (second term in right-hand side) makes of the matrix which links $\dot{\boldsymbol{t}}_T$ to the normal gap increment $\dot{g}_N$, non-symmetric. This is because the Coulomb's law of friction can be viewed as a non-associative constitutive model.

Tangential slip increment and gap increment may be written in matrix form. One can express the variation $\delta g_N \boldsymbol{n}_T$ and $\delta \boldsymbol{g}_T$ in terms of connector nodes displacement vector variation $\delta \boldsymbol{g}$ as expressed in (5) as:

$$\begin{aligned} \delta g_N \boldsymbol{n}_T &= ((\delta \boldsymbol{x}_2 - \delta \boldsymbol{x}_1) \cdot \boldsymbol{n})\, \boldsymbol{n}_T \\ &= \begin{pmatrix} -\boldsymbol{n}_T \otimes \boldsymbol{n} & \boldsymbol{n}_T \otimes \boldsymbol{n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \boldsymbol{x}_1 \\ \delta \boldsymbol{x}_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -\boldsymbol{n}_T \otimes \boldsymbol{n} & \mathbf{0}_{3\times 3} & \boldsymbol{n}_T \otimes \boldsymbol{n} & \mathbf{0}_{3\times 3} \end{pmatrix} \delta \boldsymbol{g} \\ &= \boldsymbol{N}_T\, \delta \boldsymbol{g} \end{aligned} \tag{B.7}$$

where $\mathbf{0}_{n\times m}$ represents a n by m null matrix. With the definition of tangential gap given in (5), one gets:

$$\begin{aligned} \delta \boldsymbol{g}_T &= (\mathbf{I_3} - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n})\, (\delta \boldsymbol{x}_2 - \delta \boldsymbol{x}_1) \\ &= \begin{pmatrix} -(\mathbf{I_3} - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n}) & \mathbf{I_3} - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \boldsymbol{x}_1 \\ \delta \boldsymbol{x}_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -(\mathbf{I_3} - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n}) & \mathbf{0}_{3\times 3} & \mathbf{I_3} - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n} & \mathbf{0}_{3\times 3} \end{pmatrix} \delta \boldsymbol{g} \\ &= \boldsymbol{M}\, \delta \boldsymbol{g} \end{aligned} \tag{B.8}$$

One deduces from (B.6) that:

$$\begin{aligned} \Delta \boldsymbol{t}_T &= c_T\, (\mathbf{I_3} - \boldsymbol{n}_T \otimes \boldsymbol{n}_T)\, \Delta \boldsymbol{g}_T + \mu\, c_N\, \mathrm{sign}\,(g_N)\, \Delta g_N\, \boldsymbol{n}_T \\ &= [c_T\, (\mathbf{I_3} - \boldsymbol{n}_T \otimes \boldsymbol{n}_T)\, \boldsymbol{M} + \mu\, c_N\, \mathrm{sign}\,(g_N)\, \boldsymbol{N_T}]\, \Delta \boldsymbol{d} \end{aligned} \tag{B.9}$$

and, finally:

$$\begin{aligned} \Delta \boldsymbol{t}_T \cdot \delta \boldsymbol{g}_T = \delta \boldsymbol{g}_T^T \Delta \boldsymbol{t}_T = \\ \delta \boldsymbol{d}^T \left(\boldsymbol{M}^T \left[c_T\, (\mathbf{I_3} - \boldsymbol{n}_T \otimes \boldsymbol{n}_T)\, \boldsymbol{M} + \mu\, c_N\, \mathrm{sign}\,(g_N)\, \boldsymbol{N}_T \right] \right) \Delta \boldsymbol{d} \\ = \delta \boldsymbol{d}^T \boldsymbol{K}_T\, \Delta \boldsymbol{d} \end{aligned} \tag{B.10}$$

Note that matrix $\boldsymbol{K}_T$ is nonsymmetric.

Appendix C. Summary of the connector integration algorithm

As a reminder, a quantity a denoted by $a_{(n)}$ corresponds to the value of a evaluated at time increment n. However, to alleviate the notations, the normal $\mathbf{n}_{(n+1)}$ is noted only by $\mathbf{n}$ and stays equal to $\mathbf{n}_{(0)}$ under the small perturbations assumption.

The different steps of the connector model integration are summarized in **Algorithm 1**. $\mathbf{P}_T$ represents the matrix for passing from the global frame to the local frame of the connector.

For a two-dimensional problem, the stiffness matrix of a Timoshenko beam $\mathbf{K}_{bolt}$ is expressed as a function of the normal stiffness c_N, the bending stiffness c_{bolt}, its length L and the shear coefficient Φ depending on the section geometry as:

$$\mathbf{K}_{bolt} = \begin{pmatrix} c_N & 0 & 0 & -c_N & 0 & 0 \\ 0 & c_{bolt} & c_{bolt}\frac{L}{2} & 0 & -c_{bolt} & c_{bolt}\frac{L}{2} \\ 0 & c_{bolt}\frac{L}{2} & c_{bolt}\frac{(4+\Phi)L^2}{12} & 0 & -c_{bolt}\frac{L}{2} & c_{bolt}\frac{(2-\Phi)L^2}{12} \\ -c_N & 0 & 0 & c_N & 0 & 0 \\ 0 & -c_{bolt} & -c_{bolt}\frac{L}{2} & 0 & c_{bolt} & -c_{bolt}\frac{L}{2} \\ 0 & c_{bolt}\frac{L}{2} & c_{bolt}\frac{(2-\Phi)L^2}{12} & 0 & -c_{bolt}\frac{L}{2} & c_{bolt}\frac{(4+\Phi)L^2}{12} \end{pmatrix}$$

Algorithm 1 Connector algorithm

Require: $g^s_{T,(n)}, t_{N,(0)}$

Compute normal and tangential gaps

$g_{N,(n+1)} = (\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_1) \cdot \boldsymbol{n}$

$\boldsymbol{g}_{T,(n+1)}] = (\mathbf{I}_3 - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n})\,(\boldsymbol{u}_2 - \boldsymbol{u}_1)$

Compute normal behaviour

if $n = 0$ **then**

$p_{N,(n+1)} = P_C$

$t_{N,(n+1)} = P_C + c_N g_{N,(n+1)}$

else

$$p_{N,(n+1)} =< -\frac{t_{N,(1)}}{P_C - t_{N,(1)}} c_N g_{N,(n+1)} >_+$$

$$t_{N,(n+1)} = \frac{P_C^2}{t_{N,(1)}} + c_N g_{N,(n+1)}$$

end if

Compute trial state

$\boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)} = c_T \left(\boldsymbol{g}_{T,(n+1)} - \boldsymbol{g}^s_{T,(n)} \right)$

$f^{tr}_{s,(n+1)} = \|\boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)}\| - \mu\, p_{N,(n+1)}$

Compute tangential behaviour

if $f^{tr}_{s,(n+1)} \leq 0$ **then**

$\boldsymbol{t}_{T,(n+1)} = \boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)}$

else

Compute λ

$$\lambda = \frac{1}{c_T} \left(\|\boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)}\| - \mu\, p_{N,(n+1)} \right)$$

Update slip state

$$\boldsymbol{n}_{T,(n+1)} = \frac{\boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)}}{\|\boldsymbol{t}^{tr}_{T,(n+1)}\|}$$

$\boldsymbol{g}^s_{T,(n+1)} = \boldsymbol{g}^s_{T,(n)} + \lambda\, \boldsymbol{n}_{T,(n+1)}$

$\boldsymbol{t}_{T,(n+1)} = c_T \left(\boldsymbol{g}_{T,(n+1)} - \boldsymbol{g}^s_{T,(n+1)} \right)$

end if

Compute new friction forces

$\boldsymbol{t}_{(n+1)} = t_{N,(n+1)} \boldsymbol{n} + \boldsymbol{t}_{T,(n+1)}$

Compute tangent matrix

if $f^{tr}_{s,(n+1)} \leq 0$ **then**

$$\mathbf{K}_{adh} = c_T \begin{pmatrix} \mathbf{P}_T & -\mathbf{P}_T \\ -\mathbf{P}_T & \mathbf{P}_T \end{pmatrix}$$

$\mathbf{K}_T = \mathbf{K}_{bolt} + \mathbf{K}_{adh}$

else

$$\mathbf{K}_{slid} = c_T \begin{pmatrix} -\mathbf{P}_T \\ \mathbf{P}_T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_3 - \mathbf{n}_T \otimes \mathbf{n}_T & \mathbf{0}_3 \\ \mathbf{0}_3 & \mathbf{0}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mathbf{P}_T & \mathbf{P}_T \end{pmatrix} - \mu c_N \begin{pmatrix} -\mathbf{P}_T \\ \mathbf{P}_T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mathbf{n}_T \otimes \mathbf{n} & \mathbf{0}_3 & \mathbf{n}_T \otimes \mathbf{n} & \mathbf{0}_3 \\ \mathbf{0}_3 & \mathbf{0}_3 & \mathbf{0}_3 & \mathbf{0}_3 \end{pmatrix}$$

$\mathbf{K}_T = \mathbf{K}_{bolt} + \mathbf{K}_{sliding}$

end if

Compute residual

References

[1] Izumi S, Yokoyama T, Iwasaki A, Sakai S (2005) Three-dimensional finite element analysis of tightening and loosening mechanism of threaded fastener. Engineering Failure Analysis 12(4):604-615. http://dx.doi.org/10.1016/j.engfailanal.2004.09.009

[2] Alkatan F, Stephan P, Daidié D, Guillot J (2007) Equivalent axial stiffness of various components in bolted joints subjected to axial loading. Finite Elements in Analysis and Design 43(8):589-598. https://doi.org/10.1016/j.finel.2006.12.013

[3] Lehnhoff TF, Bunyard BA (2001) Effects of bolt threads on the stiffness of bolted joints. Journal of Pressure Vessel Technology 123(2):161-165. https://doi.org/10.1115/1.1319504

[4] Lehnhoff TF, Wistehuff WE (1996) Nonlinear effects on the stiffness of bolted joints. Journal of Pressure Vessel Technology 118(1):48-53. http://dx.doi.org/10.1115/1.2842162

[5] McCarthy CT, McCarthy MA, Stanley WF, Lawlor VF (2005) Experiences with modeling friction in composite bolted joints. Journal of Composite Materials 39(21):1881-1908. https://doi.org/10.1177/0021998305051805

[6] Riccio A, Scaramuzzino F (2002) Influence of damage onset and propagation on the tensile structural behavior of protruding composite joints. 4th GRACM Congress on Computational Mechanics, Patras, 2002. http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi=10.1.1.570.458

[7] Egan B, McCarthy MA, Frizzell RM, Gray PJ, McCarthy CT (2014) Modelling bearing failure in countersunk composite joints under quasi-static loading using 3D explicit finite element analysis. Composite Structures 108(1):963-977. https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2013.10.033

[8] Adam L, Bouvet C, Castanié B, Daidié A, Bonhomme E (2012) Discrete ply model of circular pull-through test of fasteners in laminates. Composite Structures 94(10):3082-3091. https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2012.05.008

[9] McCarthy CT, McCarthy MA (2005) Three-dimensional finite element analysis of single-bolt, single-lap composite bolted joints: Part IIeffects of bolt-hole clearance. Composite Structures 71(2):159-175. https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2004.09.023

[10] Chakhari J, Daidié A, Chaib A, Guillot J (2008) Numerical model for two-bolted joints subjected to compressive loading. Finite Elements in Analysis and Design 44(4):162-173. https://doi.org/10.1016/j.finel.2007.11.010

[11] Daidié A, Chakhari J, Zghal A (2007) Numerical model for bolted T-stubs with two bolt rows. Structural Engineering and Mechanics 26(3):343-361. https://doi.org/10.12989/sem.2007.26.3.343

[12] Schijve J, Campoli G, Monaco A (2009) Fatigue of structures and secondary bending in structural elements. International Journal of Fatigue 31(7):1111-1123. https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2009.01.009

[13] Ekh J, Schön J, Melin LG (2005) Secondary bending in multi fastener, composite-to-aluminium single shear lap joints. Composites Part B: Engineering 36(3):195-208. https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2004.09.001

[14] Roulet V, Boucard PA, Champaney L (2013) An efficient computational strategy for composite laminates assemblies including variability. International Journal of Solids and Structures 50(18):2749-2757. https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2013.04.028

[15] Roulet V, Champaney L, Boucard PA (2011) A parallel strategy for the multiparametric analysis of structures with large contact and friction surfaces. Advances in Engineering Software 42(6):347-358. https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2011.02.013

[16] McCarthy CT, Gray PJ (2011) An analytical model for the prediction of load distribution in highly torqued multi-bolt composite joints. Composite Structures 93(2):287-298. https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2010.09.017

[17] Andriamampianina J, Alkatan F, Stphan P, Guillot J (2012) Determining load distribution between the different rows of fasteners of a hybrid load transfer bolted joint assembly. Aerospace Science and Technology 23 (1):287-298. https://doi.org/10.1016/j.ast.2011.08.008

[18] Omran O, Nguyen V, Jaffal H, Coorevits P (2018) Development of a connector element for multi-material bolted-joint under tensile loading. Mechanics of Advanced Materials and Structures 0(0):1-12. https://doi.org/10.1080/15376494.2018.1452314

[19] Bortman J, Szabó BA (1992) Nonlinear models for fastened structural connections. Computers and Structures 43(5):909-923. https://doi.org/10.1016/0045-7949(92)90305-J

[20] McCarthy MA, McCarthy CT, Padhi GS (2006) A simple method for determining the effects of bolthole clearance on load distribution in single-column multi-bolt composite joints. Composite Structures 73 (1):78-87. https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2005.01.028

[21] Huth H (1986) Influence of fastener flexibility on the prediction of load transfer and fatigue life for multiple-row joints. Fatigue in Mechanically Fastened Composite and Metallic Joints 221-250. https://doi.org/10.1520/STP29062S

[22] Tate MB, Rosenfeld SJ (1946) Preliminary investigation of the loads carried by individual bolts in bolted joints. NACA Technical Note NACA-TN-1051, National Advisory Committee for Aeronautics. Langley Aeronautical Lab.; Langley Field, VA, United States.

[23] Swift T (1971) Development of the Fail-safe Design Features of the DC-10. Damage Tolerance in

Aircraft Structures . ed. M. Rosenfeld (West Conshohocken, PA: ASTM International, 1971):164-214. https://doi.org/10.1520/STP26678S

[24] Nelson WD, Bunin BL, Hart-Smith LJ (1983) Critical joints in large composite aircraft structure, Tech. Rep. NASA Contractor Report 3710 (08 1983).

[25] Cope D, Lacy T (2000) Stress intensity determination in lap joints with mechanical fasteners. 41st Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference and Exhibit,03 April 2000 - 06 April 2000, Atlanta,GA,U.S.A. http://dx.doi.org/doi:10.2514/6.2000-1368

[26] Ekh J, Schön J (2008) Finite element modeling and optimization of load transfer in multi-fastener joints using structural elements. Composite Structures 82(2):245-256. https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2007.01.005

[27] Gray PJ, McCarthy CT (2010) A global bolted joint model for finite element analysis of load distributions in multi-bolt composite joints. Composites Part B: Engineering 41(4):317-325. https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2010.03.001

[28] Askri R, Bois C, Wargnier H, Lecomte J (2016) A reduced fastener model using multi-connected rigid surfaces for the prediction of both local stress field and load distribution between fasteners. Finite Elements in Analysis and Design 110:32-42. https://doi.org/10.1016/j.finel.2015.11.004.

[29] Soul De Lafont M-F, Guidault P-A, Boucard P-A (2014) A Finite Element Connector based on Design Parameters for the Simulation of Bolted Assemblies. The Twelfth International Conference on Computational Structures Technology. Napoli, Italy. https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01579096

[30] Wriggers P (2006) Computational Contact Mechanics, 2nd Edition, Springer-Verlag Berlin Heidelberg. http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-32609-0.

[31] Guidault P-A, Soul De Lafont M-F, Boucard P-A (2017) Modelling and identification of a nonlinear finite element connector for the simulation of bolted assemblies. 14th International Conference on Computational Plasticity. Barcelone, Spain. https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01683720

[32] Guidault P-A, Soul De Lafont M-F, Boucard P-A (2014) Identification of a finite element connector for the simulation of bolted joints. 11th World Congress on Computational Mechanics. Barcelona, Spain https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01694133

[33] Verwaerde R, Guidault P-A, Boucard P-A (2018) A nonlinear connector element with physical properties for modelling bolted connections. The Thirteenth International Conference on Computational Structures Technology. Sitges, Barcelona, Spain. https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01874772

[34] Dassault Systmes Simulia Corporation, Abaqus Analysis user's Guide, Section 35.3.2. Coupling Constraints (2016).

[35] Lemaitre J, Chaboche JL (1990) Mechanics of Solid Materials, Cambridge University Press. http://dx.doi.org/10.1017/CBO9781139167970

[36] Simo J, Taylor R (1985) Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 48(1):101-118. http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825(85)90070-2

[37] VDI. 2230 Blatt 1 : Systematische Berechnung hochbeanspruchter Schraubenverbindungen Zylindrische Einschraubenverbindungen, Berlin Dsseldorf, 2003.

PREPRINT

7

F. Bussolati, P.-A. Guidault, M.L.E. Guiton, O. Allix, P. Wriggers. Robust contact and friction model for the fatigue estimate of a wire rope in the mooring line of a Floating Offshore Wind Turbine. *Lecture Notes in Application and Computational Mechanics*, 93:249–270, 2020.

Robust contact and friction model for the fatigue estimate of a wire rope in the mooring line of a Floating Offshore Wind Turbine

F. Bussolati[a,b], P.-A. Guidault[a], M.L.E. Guiton[b], O. Allix[a], P. Wriggers[c]

[a] *Université Paris-Saclay, ENS Paris-Saclay, CNRS, LMT - Laboratoire de Mécanique et Technologie, 61 Avenue du Président Wilson, 94235, Cachan, France.*
[b] *IFP Energies nouvelles - Direction Physico-chimie et Mécanique appliquée, Rond-point de l'échangeur de Solaize, 69360 Solaize, France*
[c] *Institute of Continuum Mechanics, Leibniz Universität Hannover, Appelstraße 11, 30167 Hannover, Germany*

Abstract

Station keeping of Floating Wind Turbine (FOWT) is ensured by mooring lines. They may be composed of steel wire ropes, which are particularly difficult to design against the Fatigue Limit State, because the standard Tension-Tension rules cannot capture accurately the influence of the frictional contact interactions between the wires when the rope is bent. We propose here a new model linking the tension and curvature time series computed by a global scale model to a micro-scale model simulating the fretting fatigue at an inter-wire contact location. This new model of a detailed part of rope relies on the use of a new contact element, which allows to gain robustness and CPU time. This is of crucial importance for the large number of simulations required by a fatigue life estimate. A case study is presented considering a FOWT equipped with three pairs of catenary mooring lines. The computed tension and curvature obtained for a severe sea state are transferred to the detailed model of the wire rope, with periodic boundary conditions representing the rope continuity. The time series of sliding and contact forces are finally reported at different locations within the rope, providing possible input data for a fretting fatigue analysis.

Keywords: Wire rope, frictional contact, beam-to-beam contact, fatigue

1. Introduction

Floating Offshore Wind Turbines (FOWT) have been developed in recent years, to participate to the energy transition challenge. Similarly to any floating structure, their station keeping relies on mooring lines anchored to the seabed. The mooring lines can be constituted by chains, steel wire ropes and synthetic rope. Synthethic ropes have been proposed very recently in FOWT applications, while wire ropes have been extensively employed in the oil and gas industry for many decades. They indeed offer a large tensile strength, with considerable less weight than chains. Even if they have been extensively studied, the wire rope fatigue is still difficult to estimate when they are exposed to free bending [1]. Indeed, many studies [2, 3] show that bending contribution may reduce dramatically the fatigue life of the component. This effect is linked to fretting contact

interactions at the wire scale, with crack initiations located near the wire rope neutral axis where the slidings are the largest [2, 4]. Such phenomena are not taken into account in the usual tension-tension fatigue laws of the design standards (e.g. [5]) which could contribute to explain the high number of mooring failures reported by oil and gas industry [6].

Some analytical models have been developed in order to characterize the wire interactions and the mechanical properties of a wire rope. In [7, 8] each wire layer is modeled as an orthotropic cylinder, while in [9, 10, 11] wires are considered as curved beams.

In more recent years, researchers developed Finite Element models of wire ropes, employing 3D solid [12, 13] or beam elements [14]. However, wire ropes used in offshore mooring systems have large diameters, typically greater than 50 mm, which limits the interest of 3D solid elements models because of a too large CPU time. In [14], a first way to reduce this computational cost is proposed with the use of beam elements. The mechanical behavior of a multi-layer wire rope is reproduced with an acceptable approximation, as demonstrated by the results of a tension-bending test. Such models rely on many publications which have been devoted to the specific case of beam-to-beam contact [15] then extended to friction [16], generalized to include possible rectangular sections [17, 18]. Recent work in this domain have also proposed alternative formulations improving the geometric accuracy. For instance, [19] and [20, 21] can take into account the rotation interaction between the contact beams, with a parametrization based on the Frenet-Serret basis for the prior and convected coordinates for the latters. Also, [22] uses an intermediary integrating surface which contributes to smooth the functional for Newton algorithm.

In this paper we propose a new contact and friction model which offers a considerably larger time saving by exploiting the small inter-wire sliding [23, 24]. The potential of this model is demonstrated by applying it to the same FOWT study case than in [25]. It is composed of a semi-submersible floater supporting a 3.6 MW downsized version of the NREL 5 MW wind turbine and equipped with catenary mooring lines. We follow here the same methodology used in [25], with the following differences.

- The contact kinematics is enriched here by additional sliding terms along the circumferences of the wire beam elements.
- The initialization of the loading considers here the bending before the tension, in order to reduce the tangential contact force influence.
- The lay angle of the internal wire layer is greater.
- Kinematic coupling relations within the detailed wire rope model have been eliminated as it has been recognized to introduce numerical artifacts. They were added in order to impose the correct kinematics to a reference wire at each layer, but actually in [23] it is shown that they are not needed.

2. Detailed wire rope model

The wire rope model has been implemented in Abaqus/Standard® and is representative of a part of a longer wire rope. We first begin this section by presenting the new contact and friction element. After introducing the basic principles, we show the comparison of the results on a simple benchmark of a simplified rope, to analytic solutions and to results obtained with a large-sliding algorithm employing surface elements to track the position of the wire surfaces. The second part of this section illustrates the boundary conditions of the detailed wire rope model, from which periodicity is imposed to represent the wire rope continuity.

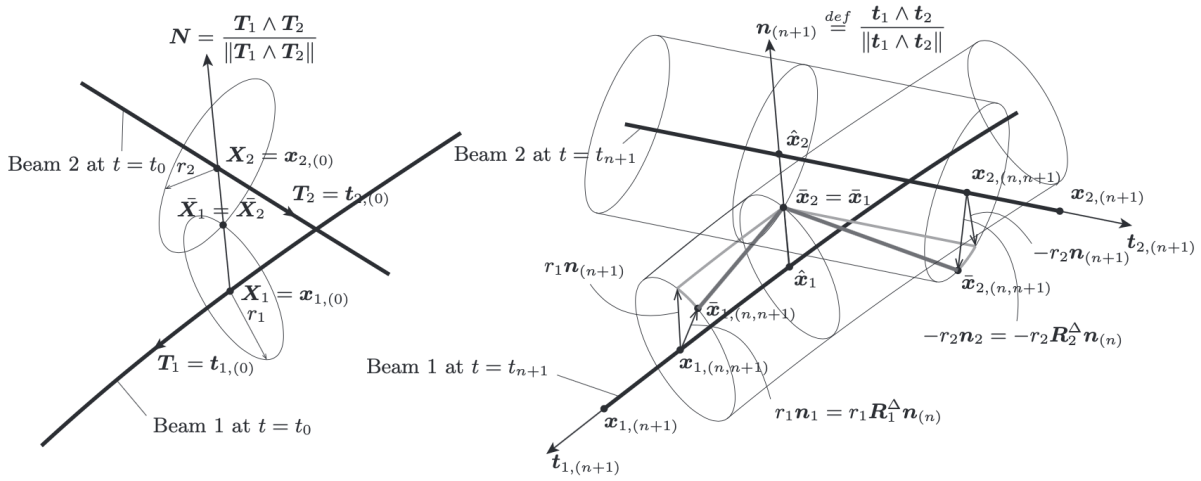


Figure 1: Beam-to-beam contact kinematics: initial and deformed configurations.

2.1. A new contact and friction element for wire rope

Resuming the beam-to-beam strategy of [14] with linear beam elements, we use here a different contact and friction algorithm with a higher computational efficiency, assuming small sliding between the wires. Only the basic principles of the model are presented here. The reader could find more details on this model in [23, 24].

The user-element is a two-node contact element for non parallel beams. Note that we do not consider the lateral contact between wires of a same layer. Its connectivity is defined initially and the contact pairing is fixed along the analysis. Considering a wire rope, the initial contact positions can be determined by trivial geometrical operations.

Let us consider at the initial state, the contact among two nodes at positions $\mathbf{X}_1$ and $\mathbf{X}_2$ located on two wires in adjacent layers (Fig. 1). The wires have circular cross sections of radius r_1 and r_2 respectively, and we neglect the Poisson effect, which seems reasonable for standard steel wires. The initial beam tangent vectors are denoted $\mathbf{T}_1$ and $\mathbf{T}_2$. As usual in contact algorithms among non parallel beams [15, 16, 22], the contact normal is defined as the normalized vectorial product of the beam tangents.

In the deformed configuration, the position vectors of the nodes are respectively $\mathbf{x}_1$ and $\mathbf{x}_2$. In general they are no more coincident with the points on the beam axes that minimize the distance among the beams, i.e. the points $\hat{\mathbf{x}}_1$ and $\hat{\mathbf{x}}_2$ in Fig. 1. If the relative sliding is small, we can reasonably state

$$\hat{\mathbf{x}}_1 \approx \mathbf{x}_1 + \xi^1 \mathbf{t}_1(\mathbf{x}_1) \qquad \hat{\mathbf{x}}_2 \approx \mathbf{x}_2 - \xi^2 \mathbf{t}_2(\mathbf{x}_2) \tag{1}$$

which basically consists in assuming that the beams are straight in proximity of the initial contact position. Accordingly, for the normal contact vector we have

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{t}_1(\hat{\mathbf{x}}_1) \wedge \mathbf{t}_2(\hat{\mathbf{x}}_2)}{\|\mathbf{t}_1(\hat{\mathbf{x}}_1) \wedge \mathbf{t}_2(\hat{\mathbf{x}}_2)\|} \approx \frac{\mathbf{t}_1(\mathbf{x}_1) \wedge \mathbf{t}_2(\mathbf{x}_2)}{\|\mathbf{t}_1(\mathbf{x}_1) \wedge \mathbf{t}_2(\mathbf{x}_2)\|} \tag{2}$$

Finally the normal gap can be defined as

$$g_N = (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) \cdot \mathbf{n} - (r_1 + r_2) \tag{3}$$

A particular difference with [25] concerns the definition of the tangential gap increment $\boldsymbol{g}_T^{\Delta}$, which is the relative displacement experienced by the material points $\bar{\boldsymbol{x}}_1$ and $\bar{\boldsymbol{x}}_2$ that were in contact in configuration at t_n, projected on the new tangential plane in configuration t_{n+1}.

Firstly, $\bar{\boldsymbol{x}}_1$ and $\bar{\boldsymbol{x}}_2$ are mapped in the new configuration at t_{n+1} (Fig. 1). These new positions are denoted respectively $\bar{\boldsymbol{x}}_{1,(n,n+1)}$ and $\bar{\boldsymbol{x}}_{2,(n,n+1)}$, where first index n refers to the fact that they were

the material points in contact at configuration n and second index $n+1$ refers to the configuration where the material points are mapped. The new material points in contact are simply denoted by $\bar{\boldsymbol{x}}_{1,(n+1)}$ and $\bar{\boldsymbol{x}}_{2,(n+1)}$.

For each beam, on time increment $\Delta t_{n+1} = t_{n+1} - t_n$, the distance between the previous material point in contact in configuration n and the current material point in contact at configuration $n+1$ can be defined for each beam as

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \boldsymbol{d}_1^{\Delta} & = & \bar{\boldsymbol{x}}_{1,(n,n+1)} - \bar{\boldsymbol{x}}_{1,(n+1)} \\ \boldsymbol{d}_2^{\Delta} & = & \bar{\boldsymbol{x}}_{2,(n,n+1)} - \bar{\boldsymbol{x}}_{2,(n+1)} \end{array} \right. \tag{4}$$

The normal direction changes in the new configuration and is defined by:

$$\boldsymbol{n}_{(n+1)} \overset{def}{=} \frac{\boldsymbol{t}_{1,(n+1)} \wedge \boldsymbol{t}_{2,(n+1)}}{\|\boldsymbol{t}_{1,(n+1)} \wedge \boldsymbol{t}_{2,(n+1)}\|}$$

where $\boldsymbol{t}_{i,(n+1)} = \boldsymbol{t}_i(\boldsymbol{x}_{i,(n+1)})$ denotes the current director of beam i at the node $\boldsymbol{x}_{i,(n+1)}$.

The increment of tangential gap $\boldsymbol{g}_T^{\Delta}$ is defined as the projection of the difference between $\boldsymbol{d}_2^{\Delta}$ and $\boldsymbol{d}_1^{\Delta}$ in the current tangent contact plane at configuration $n+1$. To alleviate the notation, the subscript $(n+1)$ to indicate a quantity referred to the current time increment will be discarded from now on. One has :

$$\boldsymbol{g}_T^{\Delta} = (\boldsymbol{I}_d - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n})(\boldsymbol{d}_2^{\Delta} - \boldsymbol{d}_1^{\Delta}) \tag{5}$$

with

$$\begin{array}{rcl} \boldsymbol{d}_1^{\Delta} & = & \boldsymbol{x}_1 + \xi^1_{(n)}\boldsymbol{t}_1 + r_1\boldsymbol{n}_1 - (\boldsymbol{x}_1 + \xi^1\boldsymbol{t}_1 + r_1\boldsymbol{n}) \\ & = & -(\xi^1 - \xi^1_{(n)})\boldsymbol{t}_1 + r_1(\boldsymbol{n}_1 - \boldsymbol{n}) \\ \boldsymbol{d}_2^{\Delta} & = & \boldsymbol{x}_2 - \xi^2_{(n)}\boldsymbol{t}_2 - r_2\boldsymbol{n}_2 - (\boldsymbol{x}_2 - \xi^2\boldsymbol{t}_1 - r_2\boldsymbol{n}) \\ & = & (\xi^2 - \xi^2_{(n)})\boldsymbol{t}_2 - r_2(\boldsymbol{n}_2 - \boldsymbol{n}) \end{array} \tag{6}$$

$$\boldsymbol{n}_1 = \boldsymbol{R}_1^{\Delta}\boldsymbol{n}_{(n)}; \quad \boldsymbol{R}_1^{\Delta} = \boldsymbol{R}(\boldsymbol{\Phi}_1^{\Delta}) \tag{7}$$

$$\boldsymbol{n}_2 = \boldsymbol{R}_2^{\Delta}\boldsymbol{n}_{(n)}; \quad \boldsymbol{R}_2^{\Delta} = \boldsymbol{R}(\boldsymbol{\Phi}_2^{\Delta}) \tag{8}$$

and in which $\boldsymbol{\Phi}_i^{\Delta}$ is the rotation in the current increment of beam i. Therefore one gets

$$\begin{array}{rl} \boldsymbol{g}_T^{\Delta} & = (\boldsymbol{I}_d - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n})[(\xi^i - \xi^i_{(n)})\boldsymbol{t}_i - r_i\boldsymbol{n}_i] \\ & = (\xi^i - \xi^i_{(n)})\boldsymbol{t}_i - (\boldsymbol{I}_d - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n})r_i\boldsymbol{n}_i \end{array} \tag{9}$$

This definition of $\boldsymbol{g}_T^{\Delta}$ is equivalent of quantifying the amount of relative sliding by approximating the actual movement histories by straight lines projected on the contact tangent plane at configuration $n+1$. It is clear that the more the time step decreases, the better the approximation of the theoretical path of the contact material point on each beam is. It can be noted that with this definition of $\boldsymbol{g}_T^{\Delta}$ also relative movements generated by rolling are taken into account.

First terms $\left(\xi^i - \xi^i_{(n)}\right)\boldsymbol{t}_i$ reflect the relative sliding in the beam axes direction and the term $(\boldsymbol{I}_d - \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n})(r_1\boldsymbol{n}_1 + r_2\boldsymbol{n}_2)$ is associated with sliding along the circumferential directions of each beam. This second term is not considered when the contact problem between beams is treated as contact between curves, as occurs in [16]. In other words, the sliding between curves can be described by the evolution of the parameters ξ^i, while the characterization of the sliding between the beam surfaces, being two-dimensional, requires two components. This has been done for instance in [21], where the beam surfaces are described by couples of convective coordinates.

The tangential gap function at configuration $n+1$ can now be defined by:

$$\boldsymbol{g}_T = \boldsymbol{g}_T^{\Delta} + \boldsymbol{g}_{T,(n,n+1)} \tag{10}$$

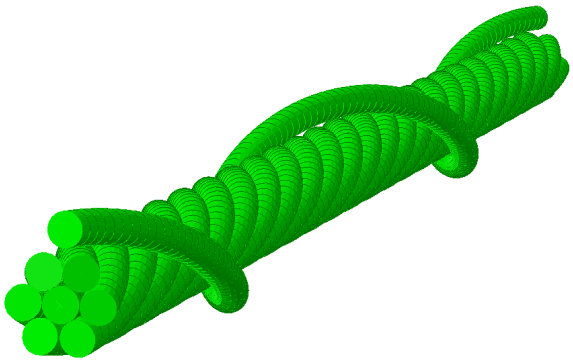


Figure 2: Benchmark test used to validate the wire rope model.

with $\boldsymbol{g}_{T,(n,n+1)}$ the elastic part of the tangential sliding at increment n mapped in the current configuration $n+1$. Namely, provided that the angle between beams (i.e. scalar product $\boldsymbol{t}_1 \cdot \boldsymbol{t}_2$) does not change to much during a time-step, this mapping is performed as follows:

$$\boldsymbol{g}_{T,(n)} = \xi^e_{(n)} \boldsymbol{t}_{i,(n)} \longrightarrow \boldsymbol{g}_{T,(n,n+1)} = \xi^e_{(n)} \boldsymbol{t}_i \tag{11}$$

Friction satisfies a classical Coulomb's law with a return mapping procedure to compute the increment when the sliding criterion is reached.

The contact forces are obtained by applying a penalty method. The penalty coefficients are chosen in order to limit the penetration of the contacting bodies, which specifically in wire rope modeling can have an important influence on the quantities estimated. A high penetration would in fact cause an artificial compression of the wires, and consequently also lower normal contact forces. Similarly, the discontinuity of the Coulomb friction law is regularized by an elastic slip. In choosing the regularization value, one should also take care that too high values could lead to bad conditioning of the tangent matrix to be inverted in the linearized balance of momentum equation. Nevertheless, the elastic slip value can significantly influence the results when small variations of curvature of the rope axis are involved.

The complete expressions of the variational formulation of this model and of its linearization are detailed in [23].

2.2. Comparison to analytical and surface to surface solutions

We now propose to check the approximation of the small sliding assumption in the contact and friction model by applying it to a simplified rope model. The model is composed of a central wire, a layer of six helical wires and a single helical wire wrapped around (Fig. 2). All the wires are identical, with radius $r = 2.15\ mm$ and linear elastic material properties $E = 210\ GPa$ and $\nu = 0.3$. The friction coefficient is set to 0.5. The lay angle is 12° for both layers, with opposite laying orientations. The length of the model corresponds to two times the lay length of external helix, i.e. 254.2 mm.

The end nodes of the helical wires are linked via a kinematic coupling to the end nodes of the central wire. In particular, a plane end section kinematics is imposed, but the displacement and the rotation respectively in and around the radial direction are left free. The central wire kinematics is fully controlled in such a way to impose a constant axial strain $\varepsilon = 1.e-3$ and constant curvature κ with no change of the bending axis. For symmetry reason (see e.g. [10]), the sliding of a wire relative to the underneath layer should be zero at the outer and inner-arc. One should note that the external helix ends are located at the outer-arc, therefore the boundary conditions are correct for this helix kinematic, but could introduce a small error for the kinematics of the underneath layer. This problem will be addressed with a periodic condition in the next section.

The axial force in the external helix obtained with the new beam-to-beam frictional contact element are compared to analytical solutions assuming negligible radial displacement, sliding with respect to the underneath layer along the helix, and a complete stick or a complete slip state [10]. The amplitude of displacement of the same helix are compared to that obtained with a model representing the contact and friction between surface elements meshing the wire surface. These surface elements are rigidly linked to the node in the same wire section, on the wire beam.

The regularization of the contact law and the Coulomb friction law are achieved by a penalty coefficient ε_N and an elastic slip γ_e, respectively. For the comparison to the numerical surface-to-surface, $\gamma_e = 1.e-2\,mm$ and $\varepsilon_N = 2.e3\,N/mm$ for the beam-to-beam and $\varepsilon_N = 1.e4\,N/mm$ for the surface-to-surface. For the comparison with the analytical solution, we select a higher contact stiffness both in normal and in tangential direction, using $\varepsilon_N = 2.e5\,N/mm$ and $\gamma_e = 1.e-4\,mm$.

Fig. 4 reports the axial force in the external helical wire, for a stick and slip states ((a) and (b), respectively). The difference in amplitude for the stick state can be explained by the penalty regularization of contact, and the under-constrained nodes which are not in contact. This localized property of contact in trellis contact is a marked difference with the line contact assumption of the analytical model, as illustrated in Fig. 3.

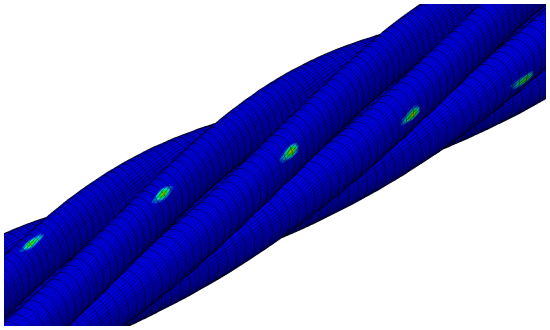


Figure 3: Contact areas displayed for the benchmark 2 in the surface-to-surface model.

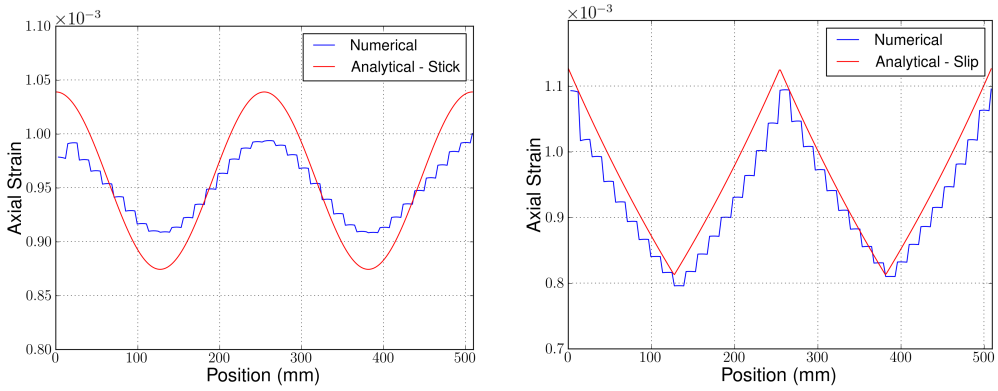
Fig. 5 shows the Euclidean norm of the sliding of the external helix for the new beam-to-beam and the surface-to-surface algorithms. This sliding is determined with respect to a reference cylinder, whose axis is the one of the rope, its radius is the one of the external helix and whose cross sections follow the Euler-Bernoulli beam kinematics. The results compare successfully for the slip state. Small differences are however visible in the stick state. They could be explained by considering that the beam-to-beam algorithm neglects a rigidity of the surface-to-surface friction with respect to a relative rotation of the beams around the contact normal. This is linked to the pointwise contact approximation, while in the surface-to-surface model the contact is spread on finite surfaces (Fig. 3).

In view of these results, we can see that the new beam-to-beam element produces an acceptable approximation of the large sliding surface-to-surface contact and friction between the wires of a spiral strand wire rope. Since it does not update the contact pairing, and also because the contact normal varies smoothly (it depends only on the rotation of the wire sections), it facilitates the Newton convergence, and leads to a gain in CPU time. Indeed, when comparing for this simplified case to a large sliding beam-to-beam algorithm of Abaqus/Standard®, the CPU time reduction gives a ratio of about 20.

The reader could find a more detailed comparison of the results obtained on different test cases with this new contact and friction elements to the results obtained with large sliding beam-to-beam algorithms available in legacy software or in the literature in [23].

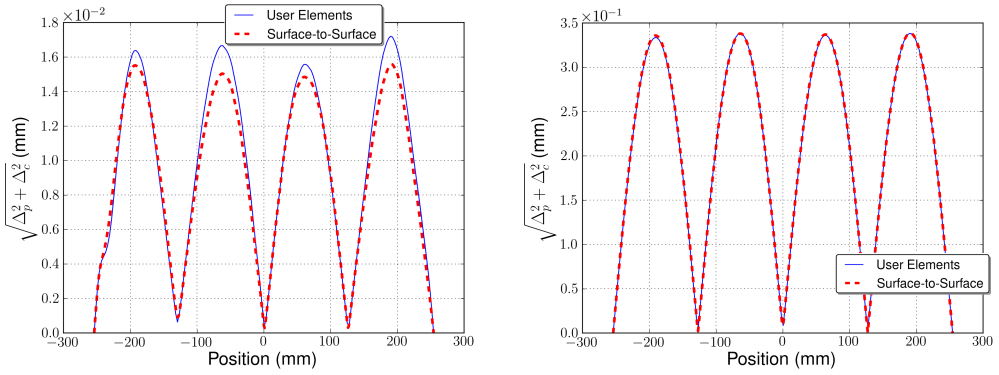
2.3. Boundary conditions

In order to simulate the continuity of the rope, a strategy to impose properly the boundary conditions has been developed. The kinematics of the central wire is fully controlled, since constant



(a) (b)

Figure 4: Axial force distribution in the helix of the second layer for (a) $\kappa = 1.e-5\ mm^{-1}$ and (b) $\kappa = 1.e-3\ mm^{-1}$.



(a) (b)

Figure 5: Total slip comparison: (a) $\kappa = 5.e-5\ mm^{-1}$ (b) $\kappa = 1.e-3\ mm^{-1}$.

axial strain and curvature are imposed to respect the output of the FOWT model. The bending axis does not change along the analysis. It is assumed that this simplifying hypothesis overestimates load variation on some wires and is thus conservative for the fatigue.

The boundary conditions are imposed via a Multi-Point Constraint (MPC) user-subroutine. An important result coming from the analytical models is here exploited. When a wire rope is bent, relative displacements among the wires of adjacent layers may occur according to the curvature, to the applied tension and to the friction coefficient between the contacting wires [10]. Consequently, when sliding occurs, initial plane cross sections are in general not plane anymore in the bent configuration.

When bent, a position along the wire can be parameterized by a circumferential angle θ from $\pi/2$ at the outer-arc to $-\pi/2$ at the inner arc (Fig. 6). The analytical axial force distribution in a helical wire of a bent wire rope geometrically depends on $sin(\theta)$ in the stick state (Fig. 4a). Hence, positions at $\theta = \pm\frac{\pi}{2}$ are symmetry points (with no relative displacement) which rotate with the rope cross section.

Let us consider a wire rope portion whose axis has constant axial deformation and curvature. To facilitate the explanation, consider first the external layer for which the lay length (i.e. the initial periodic length) defines the model length. A wire of this layer, called *reference wire*, is set to have its extremities at outer-arc locations $\theta = \pm\frac{\pi}{2}$, for example Q in Fig. 7. The nodes at these extremities are linked to the corresponding nodes of the central wire in such a way that they stay on the same wire rope cross section in the bent configuration, meaning that we impose zero

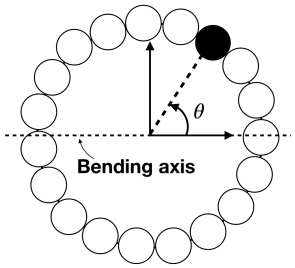


Figure 6: The angle θ identifies the position of a wire in the cross section with respect to the bending axis.

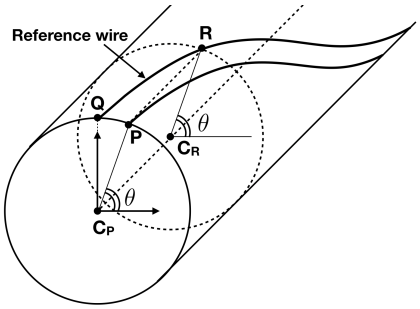


Figure 7: Points involved in a MPC.

relative displacement with respect to the central wire, and they keep the same position θ on this cross section (we do not consider wire rope torsion). Because they are at outer-arc locations, this kinematic link is not conflictual with the natural wire kinematics during bending. Now consider another wire of the same external layer which extremity P is not at the outer-arc. To model the rope continuity, the kinematic of P is defined by the Abaqus/Standard Multi Point Constraint (MPC) as follows. The points involved in each MPC are four and are represented in Fig. 7:

- the point P is the one to which the constraint is imposed (i.e. the slave node), since $\theta_P \neq \pm\frac{\pi}{2}$;
- the point C_P is the node of the central wire in the cross section containing the points Q and P;
- the point R is the node on the reference wire for which $\theta_R = \theta_P$
- the point C_R is the node on the central wire in the cross section containing R.

Note that point Q (Fig. 7) is kinematically linked to C_P to stay in the same cross section and at the same angle θ. In general, points R and C_R are arbitrary with respect to the mesh nodes. The FEM interpolation however enables to relate the degrees of freedom at these locations to that of the elements they belong.

The constraint equation for displacement imposes that the relative sliding of point P with respect to C_P is the same that for point R with respect to C_R. The relative sliding of nodes P and R are set after rotating back the cross sections with respect to the rotations at points C_P and C_R, respectively.

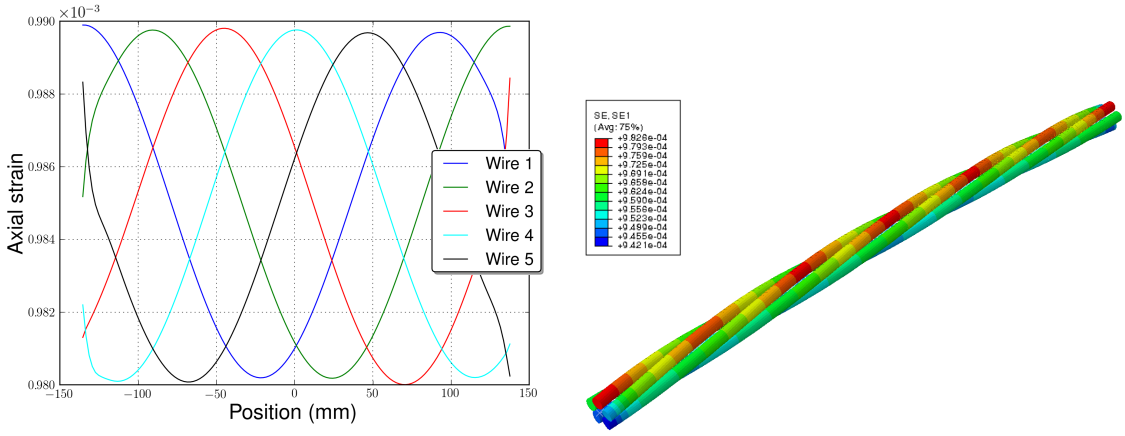
$$\boldsymbol{R}_{C_P}^T(\boldsymbol{x}_P - \boldsymbol{x}_{C_P}) = \boldsymbol{R}_{C_R}^T(\boldsymbol{x}_R - \boldsymbol{x}_{C_R}) \tag{12}$$

where $\boldsymbol{R}$ indicates the rotation matrix and $\boldsymbol{x}$ the position vector.

For the rotation vectors we simply impose

$$\boldsymbol{\Phi}_P = \boldsymbol{\Phi}_{C_P} \tag{13}$$

See [23] for the detailed linearization. Now consider the case of an internal layer for which only one wire end can be set at an outer-arc location. The other extremity kinematics follows the same relationship that point P hereabove, meaning its master point is on the same wire. In [25], if any point of a wire inside the model was at the outer arc (note that for the wire rope considered in the next section, the model length is greater than the lay length of the internal layers), we linked this point to the central wire, as it is done for point Q here above. We noted that this introduced some numerical artifacts, for reasons to be explained, and thus decided to constrain this point only with contact and friction conditions.



(a) (b)

Figure 8: (a) Axial strain distribution along the wires and (b) 3D view.

From a study documented in [25] we have noted problems when considering the full linearization terms which are avoided when omitting some terms related to points C_P and C_R displacements. Keeping in mind this problem should be solved later, we consider the partial linearization in the following, which obviously degrades the Newton convergence. This strategy however enables to recover a periodic distribution simulating the rope continuity, as indicated by the axial strain in Fig. 8.

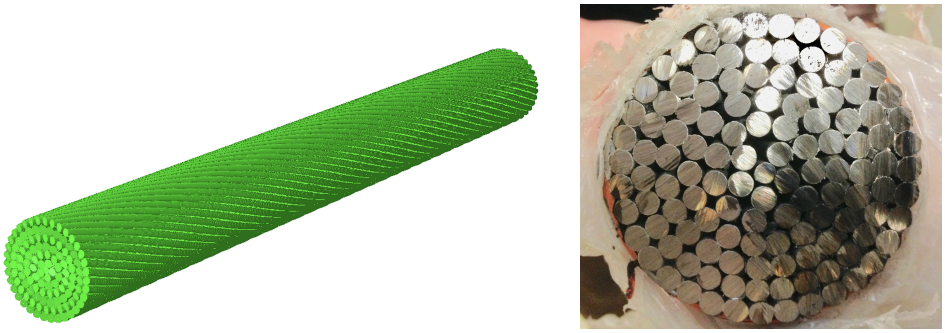
2.4. Wire rope properties

The wire rope profile has been inspired from a sample provided by Baudin Chateauneuf company which was designed for a stay-cable bridge. Note that its properties may differ from that of an offshore mooring wire rope which service conditions require specific care concerning the reduction of the tension-torsion coupling. The bending and tensile stiffness of this cable are satisfying the Ultimate Limit State [5] of the case study described in the next section. It is a six-layer steel wire rope (Fig. 9) of 60.4 mm diameter. The layers have alternate lay angle directions and are composed of 5, 11, 17, 23, 29 and 35 wires from the inner to the outer, respectively. The model length is set to the longest pitch which is that of the external layer, i.e. about 580 mm. We have five wires in line contact with the central wire and 5964 trellis contacts. For the steel, we assume a linear elastic behavior, with $E = 210\ GPa$ and $\nu = 0.3$. The friction coefficient has been set to 0.12, which is the value used in [26] for this type of steel wire ropes after the application of grease.

3. Application to a FOWT model

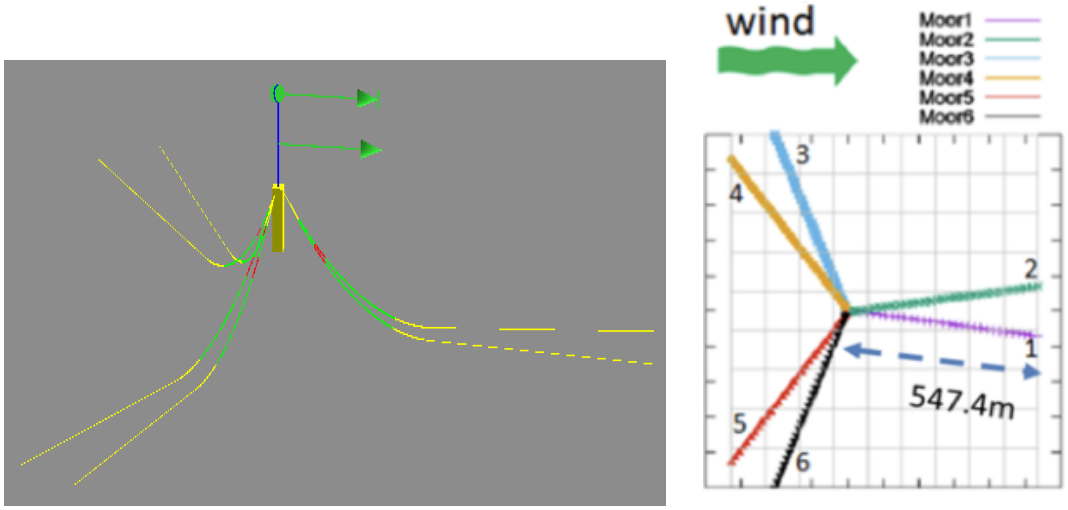
3.1. Global hydrodynamic FOWT model

The global model of the FOWT allows to obtain the mechanical states of the whole mooring lines for each sea state to which the structure may be subjected during the structural lifespan. It is implemented in the dedicated hydrodynamic software Deeplines^{TM}.



(a) (b)

Figure 9: (a) Numerical model of the wire rope in Abaqus® and (b) cross section of the chosen wire rope profile.



(a) *Side view* (b) *Top view*

Figure 10: (a) Global scale model representation in Deeplines™; (b) top view of the global model, representing the mooring line numbering and their position with respect to the wind direction (which is collinear to the waves).

We consider a generic case study of a cylinder-like shape floater, equipped with a redundant mooring system of six catenary mooring lines (Fig. 10) and supporting a downsized version of the NREL 5 MW wind turbine [27] to a 3.6 MW wind turbine. The sea depth is uniform and equal to $100\,m$. The mooring lines are catenary-shaped and attached to the floater in three pairs. Their projections on a horizontal plane are equally spaced from one another. Each line has a total length of $572\,m$ (Tab. 1).

The FOWT is subjected to the action of the environment, i.e. waves and wind. Sea waves are modeled as the superposition of harmonic components, defined by a JONSWAP spectrum [28, 29], fitting the observed Power Spectral Density. The direction of propagation is considered parallel to the wind and does not change along the analysis. We consider the long-term statistical distribution given by metocean data gathered from an offshore site in the west of France, from which the Wave Scatter Diagram (WSD) is reported in Fig. 11. Each block of the WSD represents a sea state of three hours, assumed stationary, defined by two parameters of the JONSWAP spectrum, with its percentage of occurrence. These two parameters are the significant wave height (H_s), which is related to the integral of the spectrum, and the period of the peak of the spectrum (T_p). A third parameter defining the spreading of the JONSWAP spectrum, usually denoted γ, is fixed to 1.3.

For the sake of simplicity and to focus on mooring modeling, aero-dynamic influence will be accounted for only by steady wind thrust applied on the tower and torque applied on the nacelle,

Percentage of occurrence of height of swell (m) in rows versus peak period of swell (s) in columns

	lower	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	
lower	upper	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	total
0	0,5	0	0,005	0,003	0,037	0,166	0,318	0,555	0,658	0,634	0,51	0,446	0,303	0,22	0	0,182	0,149	0	0,075	0	0,036	0	0,019	0	4,316
0,5	1	0	0	0	0,072	0,308	0,825	1,117	1,302	1,117	0,801	0,618	0,346	0,2	0	0,099	0,033	0	0,007	0	0	0	0	0	6,845
1	1,5	0	0	0,003	0,039	0,282	0,542	1,148	1,62	1,6	1,191	0,869	0,45	0,193	0	0,104	0,043	0	0,009	0	0,002	0	0	0	8,097
1,5	2	0	0	0	0,002	0,08	0,252	0,671	1,03	1,528	1,335	1,052	0,537	0,166	0	0,111	0,026	0	0,01	0	0,002	0	0	0	6,802
2	2,5	0	0	0	0	0,003	0,072	0,277	0,527	0,963	1,354	1,28	0,633	0,216	0	0,094	0,012	0	0,007	0	0	0	0	0	5,438
2,5	3	0	0	0	0	0	0,012	0,062	0,202	0,477	0,883	1,068	0,664	0,187	0	0,074	0,019	0	0	0	0	0	0	0	3,646
3	3,5	0	0	0	0	0	0	0,014	0,072	0,27	0,607	0,963	0,601	0,144	0	0,056	0,01	0	0,002	0	0	0	0	0	2,74
3,5	4	0	0	0	0	0	0	0	0,015	0,121	0,286	0,671	0,618	0,156	0	0,033	0,01	0	0	0	0	0	0	0	1,91
4	4,5	0	0	0	0	0	0	0	0,002	0,026	0,176	0,448	0,423	0,214	0	0,034	0,015	0	0	0	0	0	0	0	1,338
4,5	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0,012	0,056	0,33	0,347	0,238	0	0,077	0,017	0	0,003	0	0	0	0	0	1,081
5	5,5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,019	0,147	0,291	0,149	0	0,06	0,009	0	0	0	0	0	0	0	0,674
5,5	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,063	0,099	0,115	0	0,058	0,019	0	0,003	0	0	0	0	0	0,358
6	6,5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,002	0,01	0,063	0,096	0	0,077	0,015	0	0	0	0	0	0	0	0,264
6,5	7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,005	0,015	0,058	0	0,039	0,005	0	0	0	0	0	0	0	0,123
7	7,5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,012	0,019	0	0,022	0,009	0	0	0	0	0	0	0	0,062
7,5	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,005	0,005	0	0,019	0,003	0	0,002	0	0	0	0	0	0,034
8	8,5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,003	0,003	0	0,009	0,005	0	0	0	0	0	0	0	0,021
8,5	9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,003	0	0	0,007	0	0	0	0	0	0	0	0	0,01
9	9,5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
total		0	0,005	0,007	0,15	0,84	2,021	3,844	5,429	6,749	7,219	7,972	5,415	2,378	0	1,155	0,399	0	0,117	0	0,039	0	0,019	0	43,758

Copyright ARGOSS, November 2012

Figure 11: Wave scatter diagram of a particular azimuthal sector. Rows represent bins of the significant wave height H_s (m). Columns represent bins of the peak period T_p (s).

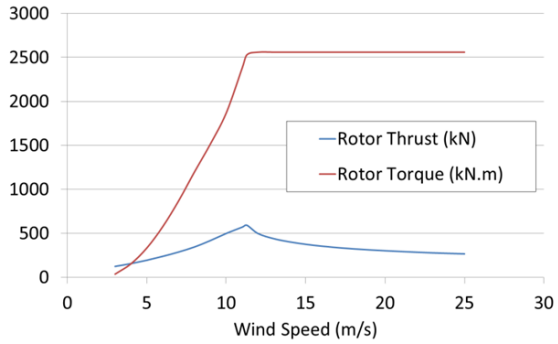


Figure 12: Thrust and torque on the rotor of the 3.6 MW turbine as function of the wind speed, computed by the software DeeplinesWind^{TM}.

whose magnitudes depend on the mean wind speed as shown in Fig. 12. This simplification could be supported if assuming a smaller wind than wave influence on the mooring line tension, as suggested for example in [30] for another semi-submersible floater.

Each mooring line is composed of three parts, with chains at the extremities and spiral strand ropes in between.

Wire ropes are modeled by linear beam elements, whose formulation takes into account large rotations [31]. We neglect the tension-torsion coupling, and consider a high torsional stiffness of $1.e6\ N.m^2/rad$. The modeling of the bending behavior has been determined after preliminary computations, as will be detailed in Sec. 3.2.

One additional mass of 2 tons is distributed in the "Wire rope-2" part (see Tab. 1) of each mooring line in order to limit the floater movements and to keep the lines in tension. Chains have no bending stiffness and are therefore modeled by bar elements. The finite element discretization is reported in Tab. 1.

Contact between mooring lines and seabed is assumed frictionless and it is modeled according to [32]. A penalty regularization is used with a linear contact stiffness of $1.e6\ N/mm^2$.

The floater is considered as a rigid body. Its behavior is represented by Response Amplitude Operators (RAO, i.e. transfer function with respect to wave period and wave elevation) of its displacement and rotation degrees of freedom. The RAO are computed in another software from linear hydrodynamic computations of diffraction and radiation components. The forces and moments acting on the floater are computed by the superposition of the RAO of the different harmonic components of the stochastic realization of the sea state.

The main hydrodynamic loading on the mooring lines are the drag forces, which are represented

Table 1: Mooring lines discretization. N_{ele} and L_{ele} denote respectively the number of element and the element length.

Parts	N_{ele}	L_{ele} (m)
Chain-1	4	7.5
Wire rope-1	2	10.0
Wire rope-2	20	2.0
Wire rope-3	8	12.5
Chain-2	30	5.33
Chain-3	20	11.1

by the classical Morison's equation. This approach is an approximation justified by the fact that the line diameter is much smaller than the wavelength [33, 34].

3.2. Global model results

As explained in analytical approaches [9, 10, 11], wire rope bending stiffness depends on the applied tension, this dependency being disregarded in the FOWT simulation. To investigate its influence on the computed tension and curvature, we consider a non-linear bending stiffness analytically computed according to the methodology given by [10, 11], for an axial strain of $5e-4$ (Fig. 13).

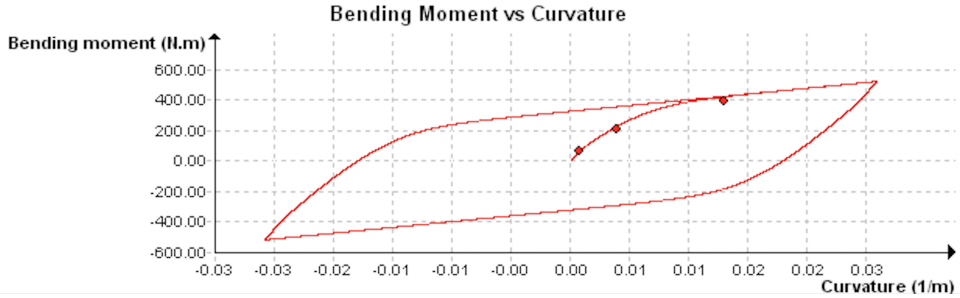
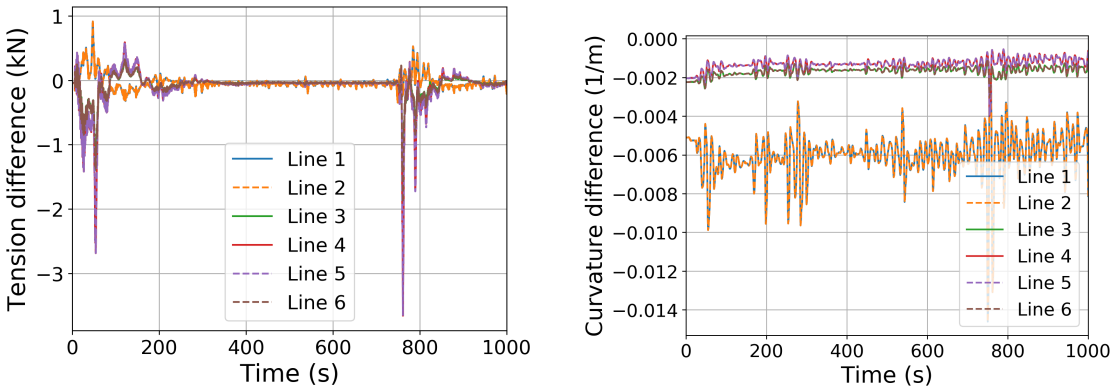


Figure 13: Hysteretic bending behavior implemented in Deeplines^{TM}, which has been obtained by fitting the bending behavior for $\varepsilon = 0.5‰$. Dots show the analytical points.

Analyses with an extreme sea state (representative of the Ultimate Limit State condition with JONSWAP parameters $H_s = 10\,m$ and $T_p = 14\,s$) have been conducted by choosing either a constant bending stiffness $EI = EI_{max}$, i.e. considering the wires completely adherent on each other, or the nonlinear bending stiffness of Fig. 13. The differences in tension and curvature time series are shown in Fig. 14. The tension values are very similar. One notes an offset for the curvature which is not so important for fatigue by contrast to the amplitude of the variation, for which a difference is observed for very rare high wave amplitudes. Considering this extreme sea state has wave amplitudes noticeably larger than the sea states for the fatigue (Fig. 11), we will assume in the following the global tension and curvature independent on the bending stiffness. In other words, we can adopt a top-down approach uncoupling the global model and the local one.

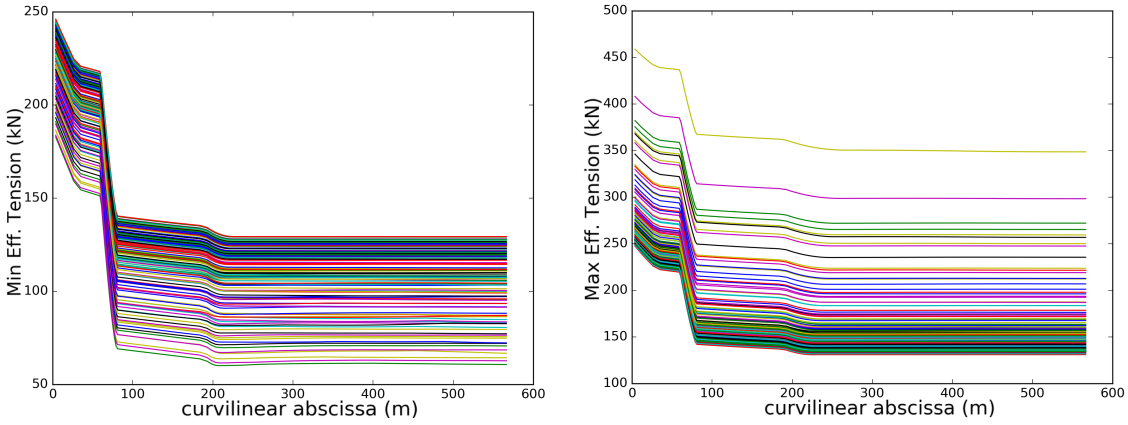
To simplify the global scale computation, the simulations for all the sea states of the scatter diagram of Figure 11 have been computed with a constant bending stiffness corresponding to the stick state of wires. Note that we consider simulations of 1000 s only, disregarding the initial 50 s with numerical transient loading. We assume this duration to be long enough to obtain the stationarity of the fatigue damage per unit time. Figures 15 and 16 report the extreme over time of the tension and of the curvature respectively, along the downstream mooring line 1 (Fig. 10(b)). From them, one can appreciate the range of curvature and tension to which the line is submitted. In particular, we can identify at $s = 79\,m$ the most critical zones for what concerns the rope



(a) *Tension* (b) *Curvature*

Figure 14: Difference of time domain evolution of tension and curvature obtained with $EI = EI_{max}$ and the nonlinear bending behavior of Fig. 13, for an extreme sea state. These plots are referred to the section most subjected to bending of the lines, which is at $s = 79\,m$.

curvature, at the end of the additional mass zones, which will be analyzed with the detailed wire rope model.



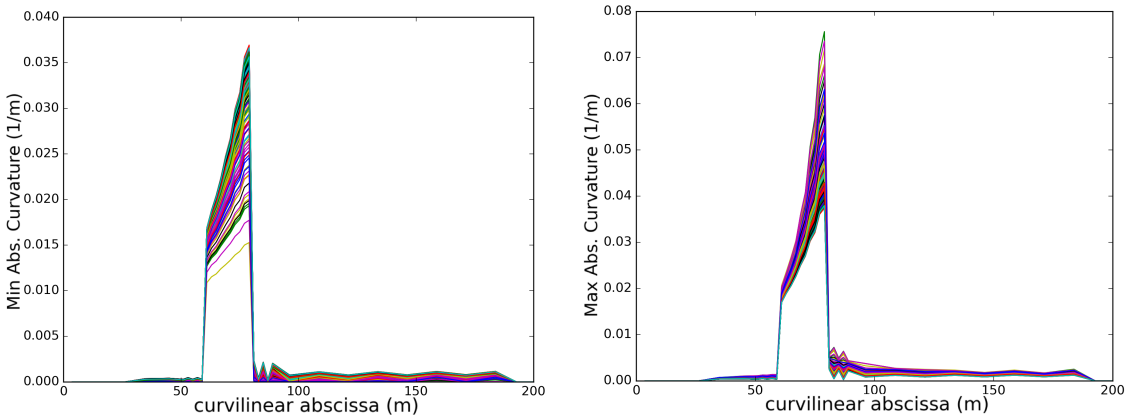
(a) (b)

Figure 15: (a) min over time and (b) max over time of tension along the mooring line 1.

3.3. Results of the detailed wire rope model

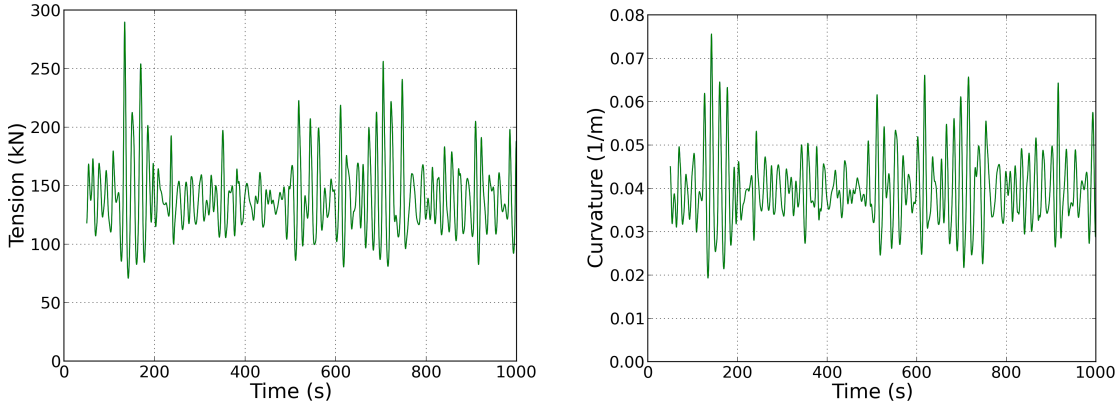
From Fig. 16, we selected the position at 79 m from the top, along the mooring line 1, to be simulated with the detailed wire rope model. Input tension and curvature have been computed for a severe fatigue sea state with $H_s = 8.75\ m$ and $T_p = 16.5\ s$ wave parameters (see Fig. 11) and are shown in Fig. 17. The corresponding wave elevation time series is shown in Fig. 18. The initialization of the loading could not consider the previous history of the wire rope, because of the scatter diagram decomposition. To limit the magnitude of the initial interwire contact forces, we chose to apply the loading in 3 steps: a small tension, a small tension and the initial curvature, and finally the initial tension and curvature.

In Fig. 19-20-21, we report the time evolution of axial force, normal and tangential contact forces at fixed position, in correspondence of the neutral axis and of the outer arc for each layer. For what concern the contact forces, we do not report the values for the first layer, since it is in line contact with the central wire while the others are in contact with the layer underneath at localized positions.



(a) (b)

Figure 16: (a) min over time and (b) max over time of absolute curvature along the mooring line 1.



(a) (b)

Figure 17: Time evolution of (a) tension and (b) curvature of the portion of mooring line studied with the detailed wire rope model.

The normal contact forces are higher moving from the external to the internal layers (see Fig. 20). This was expected, since the external layers exert a pressure on the internal ones. At higher normal forces correspond greater tangential forces as well (see Fig. 21).

Because of the lower normal forces, the inter-wire slip is higher for the external layers (Fig. 22). Moreover, the sliding is higher in correspondence of the neutral axis, confirming the experimental evidences [26]. One can see that the wire rope reaches a stabilized state after a time $t \approx 100\,s$, where shift in the sliding is observed at all the interfaces, except the most internal one. By looking at Fig.18, this time instant does not correspond to a particularly high wave. The inter-wire slip profile could provide an indicator to reveal whether the wire rope response is stabilized or not. Consequently, in this analysis one does not have to rely on the first $100\,s$. Note that the slip magnitude, for the most external interface, is in the range that activates fretting fatigue (see e.g. [35, 36]). Nevertheless, other analyses have to be performed on less severe sea states to check if the number of fretting cycles can be sufficient to generate fatigue cracks.

4. Conclusion

This paper presents a new Finite Element model for simulating the stress at the wire scale of a wire rope in a mooring line of a Floating Offshore Wind Turbine (FOWT). This model is a two-

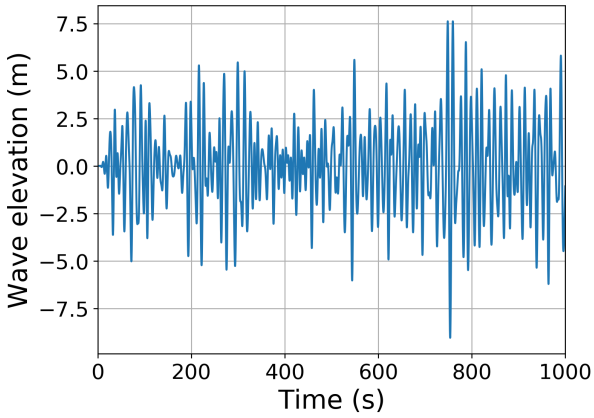
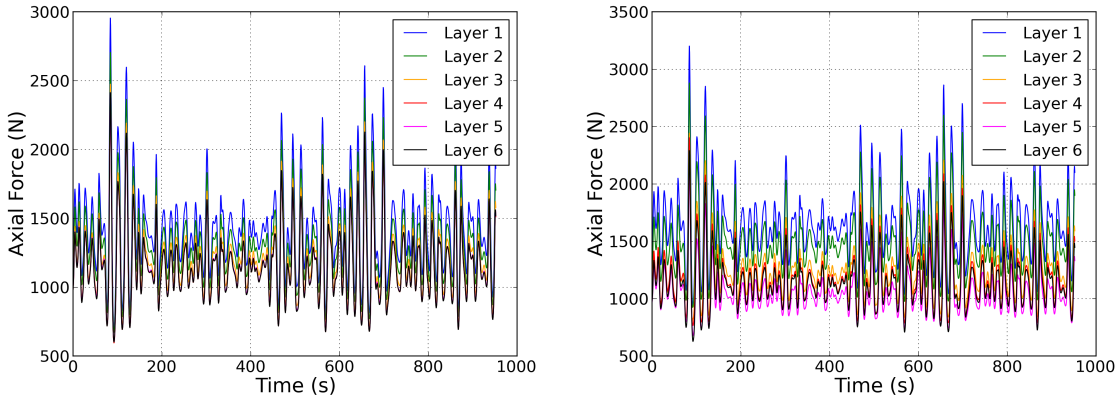


Figure 18: Wave elevation history considered for the fatigue analysis.



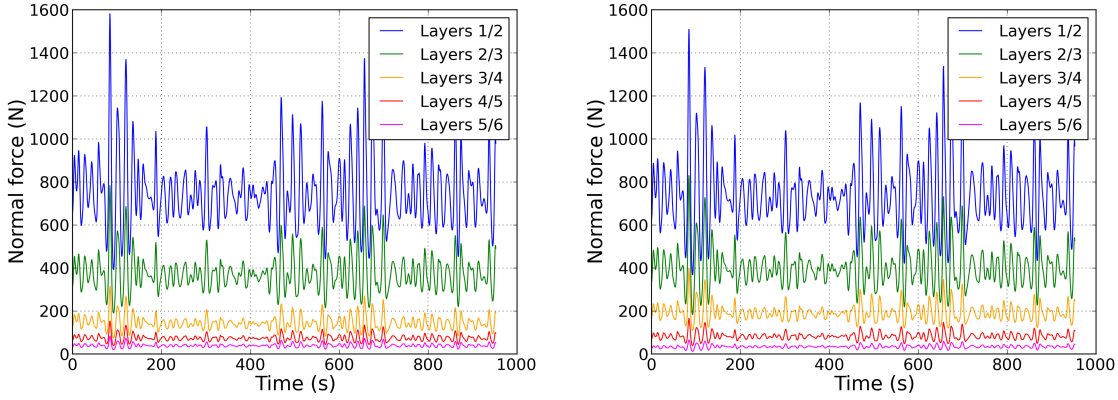
(a) *Neutral axis* (b) *Outer arc*

Figure 19: Time evolution of wire axial force in the proximity of (a) neutral axis and (b) outer arc at each layer.

node contact element conceived for the simulation of frictional contact of non-parallel beams. It differs from other models in the literature, as it assumes small sliding of the wires, while updating the contact normal with rope bending. We shown comparison on a simplified case to analytical solutions and a numerical surface-to-surface solution which validate the model approximation. This formulation results in a considerable gain in robustness and CPU times when compared to standard large sliding contact algorithm, which makes this model very interesting for fatigue life estimates, which requires a large number of simulations. This model is implemented as a user subroutine in Abaqus/Standard®. A Multi-Point-Constraint (MPC) defines appropriate periodic boundary conditions which are able to simulate the rope continuity.

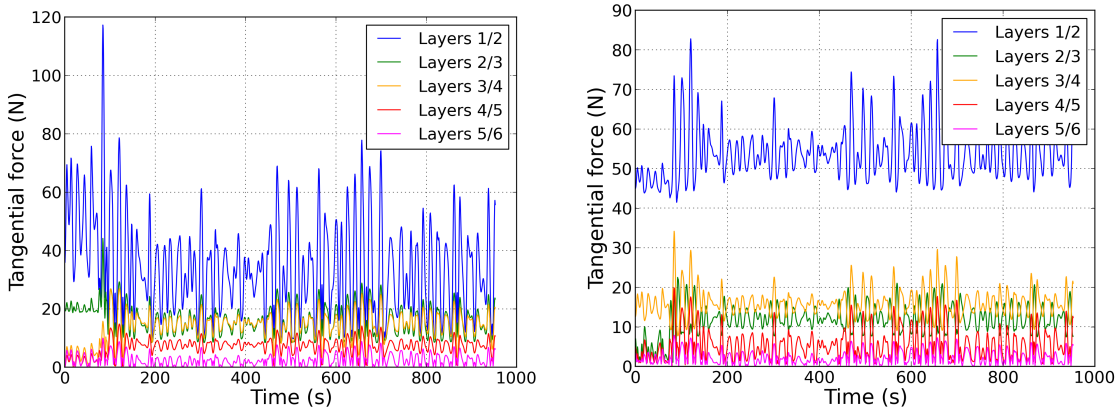
We present an application for an example of a semi-submersible floater supporting a 3.6 MW wind turbine, equipped with three pairs of catenary mooring lines including six-layer spiral strand wire ropes. The global scale hydrodynamic response of the FOWT is simulated with the software Deeplines^{TM}, with steady wind and irregular wave loading. The largest curvature are computed at the bottom of the mooring line portions where additional masses are placed to keep the line in tension. We noted that the nonlinear bending stiffness of the wire rope varying with curvature has a small influence on the resulting tension and curvature, justifying a top-down approach uncoupling the global scale model and the local detailed mechanical model of the wire rope.

Finally the detailed wire rope model has been used to model 1000 s of tension and bending of a severe sea state, showing the potentiality of this model. Further investigations are required in order to validate the obtained results.



(a) *Neutral axis* (b) *Outer arc*

Figure 20: Time evolution of normal contact force between two crossing wires in the proximity of (a) neutral axis and (b) outer arc.



(a) *Neutral axis* (b) *Outer arc*

Figure 21: Time evolution of tangential contact force between two crossing wires in the proximity of (a) neutral axis and (b) outer arc.

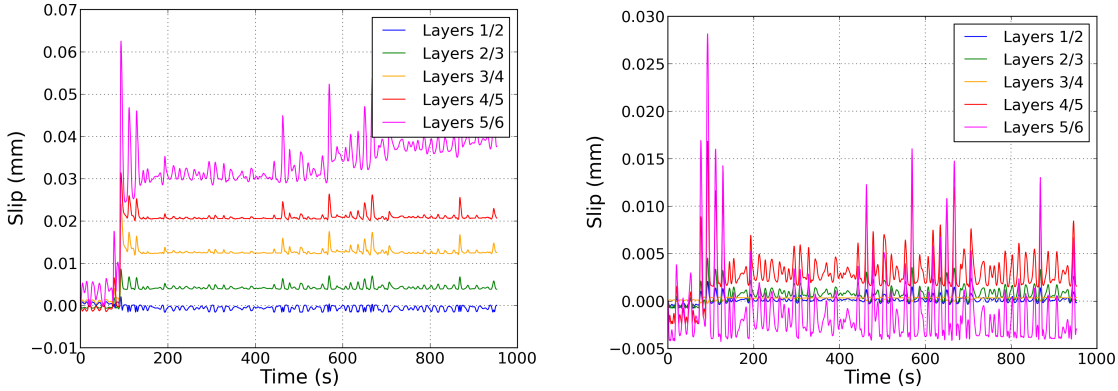
Additional work should be necessary to correct the linearization of the periodic boundary conditions. Also, a smaller-scale fretting fatigue analysis should be studied in a future work, including material and corrosion influences, in order to provide the designer a better physically-assessed fatigue constraint.

Acknowledgements

The authors acknowledge Baudin Chateauneuf company for having provided the data that inspired the six-layer wire rope model. Principia and FOWT team at IFPEN, in particular Y. Poirette, are thanked for their help in defining the Deeplines™ model. The authors also thank M. Martinez of IFPEN for his help to define the Abaqus/Standard® boundary value problem. This work has been realized during the doctoral thesis of the first author which has been funded by IFP Energies nouvelles.

References

[1] C. Chaplin and A. Potts, Wire rope offshore - a critical review of wire rope endurance research affecting offshore applications.



(a) *Neutral axis* (b) *Outer arc*

Figure 22: Time evolution of inter-wire slip between two crossing wires in the proximity of (a) neutral axis and (b) outer arc.

[2] M. Raoof, Free bending tests on large spiral strands, Proceedings of the Institution of Civil Engineers 87 (4) (1989) 605–626.

[3] F. Lévesque, S. Goudreau, S. Langlois, F. Légeron, Experimental study of dynamic bending stiffness of ACSR overhead conductors, IEEE Transactions on Power Delivery 30 (5) (2015) 2252–2259.

[4] M. Giglio, A. Manes, Bending fatigue tests on a metallic wire rope for aircraft rescue hoists, Engineering Failure Analysis 10 (2) (2003) 223–235.

[5] Det Norske Veritas, Design of floating wind turbine structures, Offshore Standard DNV-OS-J103.

[6] E. Fontaine, A. Kilner, C. Carra, D. Washington, K. Ma, A. Phadke, D. Laskowski, G. Kusinski, Industry survey of past failures, pre-emptive replacements and reported degradations for mooring systems of floating production units, in: Offshore Technology Conference, Offshore Technology Conference, 2014.

[7] M. Raoof, R. E. Hobbs, Analysis of multilayered structural strands, Journal of engineering Mechanics 114 (7) (1988) 1166–1182.

[8] C. Jolicoeur, A. Cardou, Analytical solution for bending of coaxial orthotropic cylinders, Journal of engineering mechanics 120 (12) (1994) 2556–2574.

[9] G. A. Costello, Theory of wire rope, Springer Science & Business Media, 1997.

[10] K. O. Papailiou, Bending of helically twisted cables under variable bending stiffness due to internal friction, tensile force and cable curvature, Doctoral thesis, ETH, Zurich, Swiss.

[11] K.-J. Hong, A. Der Kiureghian, J. L. Sackman, Bending behavior of helically wrapped cables, Journal of engineering mechanics 131 (5) (2005) 500–511.

[12] R. Judge, Z. Yang, S. Jones, G. Beattie, Full 3D finite element modelling of spiral strand cables, Construction and Building Materials 35 (2012) 452–459.

[13] D. Zhang, M. Ostoja-Starzewski, Finite element solutions to the bending stiffness of a single-layered helically wound cable with internal friction, Journal of Applied Mechanics 83 (3) (2016) 031003.

[14] S. Lalonde, R. Guilbault, F. Légeron, Modeling multilayered wire strands, a strategy based on 3D finite element beam-to-beam contacts - Part I: Model formulation and validation, International Journal of Mechanical Sciences 126 (2017) 281–296.

[15] P. Wriggers, G. Zavarise, On contact between three-dimensional beams undergoing large deflections, International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering 13 (6) (1997) 429–438.

[16] G. Zavarise, P. Wriggers, Contact with friction between beams in 3-D space, International Journal for Numerical Methods in Engineering 49 (8) (2000) 977–1006.

[17] P. Litewka, P. Wriggers, Contact between 3D beams with rectangular cross-sections, International Journal for Numerical Methods in Engineering 53 (9) (2002) 2019–2041.

[18] P. Litewka, P. Wriggers, Frictional contact between 3D beams, Computational mechanics 28 (1) (2002) 26–39.

[19] A. Konyukhov, K. Schweizerhof, Geometrically exact covariant approach for contact between curves, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 199 (37-40) (2010) 2510–2531.

[20] A. G. Neto, P. M. Pimenta, P. Wriggers, A master-surface to master-surface formulation for beam to beam contact. Part I: frictionless interaction, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 303 (2016) 400–429.

[21] A. G. Neto, P. M. Pimenta, P. Wriggers, A master-surface to master-surface formulation for beam to beam contact. Part II: Frictional interaction, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 319 (2017) 146–174.

[22] D. Durville, Contact-friction modeling within elastic beam assemblies: an application to knot tightening, Com-

putational Mechanics 49 (6) (2012) 687–707.
[23] F. Bussolati, Multi-scale model of the fatigue of mooring wire ropes for floating offshore wind turbines, Doctoral Thesis, Université Paris-Saclay.
[24] P.-A. Guidault, F. Bussolati, M. Guiton, O. Allix, A small-sliding node-to-node formulation for beam-to-beam frictional contact with large displacements, in: VI International Conference on Computational Contact Mechanics, 2019.
[25] F. Bussolati, M. Guiton, P.-A. Guidault, Y. Poirette, M. Martinez, O. Allix, A new fully-detailed finite element of spiral strand wire ropes for fatigue life estimate of a mooring line, in: ASME 2019 38th International Conference on Ocean, Offshore and Arctic Engineering, American Society of Mechanical Engineers, 2019.
[26] M. Raoof, Free bending fatigue of axially pre-loaded spiral strands, The Journal of Strain Analysis for Engineering Design 27 (3) (1992) 127–136.
[27] J. Jonkman, S. Butterfield, W. Musial, G. Scott, Definition of a 5-MW reference wind turbine for offshore system development, National Renewable Energy Laboratory, Golden, CO, Technical Report No. NREL/TP-500-38060.
[28] K. Hasselmann, T. Barnett, E. Bouws, H. Carlson, D. Cartwright, K. Enke, J. Ewing, H. Gienapp, D. Hasselmann, P. Kruseman, et al., Measurements of wind-wave growth and swell decay during the joint north sea wave project (JONSWAP), Ergänzungsheft 8-12.
[29] J. H. Nath, F. L. Ramsey, Probability distributions of breaking wave heights emphasizing the utilization of the JONSWAP spectrum, Journal of Physical Oceanography 6 (3) (1976) 316–323.
[30] H. Kim, M. Kim, Comparison of simulated platform dynamics in steady/dynamic winds and irregular waves for OC4 semi-submersible 5MW wind-turbine against DeepCWind model-test results, Ocean Syst. Eng 6 (1) (2016) 1–21.
[31] J-P. Fargues, Modélisation dynamique des risers pétroliers en grands déplacements, Doctoral thesis, École Centrale de Paris.
[32] E. Fontaine, J. Heurtier, D. Durville, S. Toumit, C. Prat, Modeling of riser contact-friction problems, in: Offshore Technology Conference, Offshore Technology Conference, 2002.
[33] B. Molin, Hydrodynamique des structures offshore, Editions Technip, 2002.
[34] M. T. J. Hall, Mooring line modelling and design optimization of floating offshore wind turbines, Master thesis, University of Victoria.
[35] D. Siegert, Mécanismes de fatigue de contact dans les câbles de haubanage du génie civil, Doctoral Thesis, École Centrale de Nantes.
[36] V. Perier, Etude de l'influence des conditions environnementales sur le comportement en fretting, fatigue et fretting-fatigue des câbles du génie civil, Doctoral Thesis, École Centrale de Lyon.

université PARIS-SACLAY

ÉCOLE DOCTORALE
Sciences mécaniques et énergétiques, matériaux et géosciences (SMEMAG)

Titre: Sur les interfaces en mécanique non-linéaire des structures

Mots clés: Couplage de modèles, Méthodes de décomposition de domaine, Modèles de liaison, Réduction de modèle, Calcul non-linéaire des structures, Mécanique du contact

Résumé : Face à la complexité croissante des modèles permettant de décrire des phénomènes toujours plus élaborés, des méthodes de couplage de modèles, de décomposition de domaine et de modélisation de liaisons localisées au sein des assemblages sont proposées pour le calcul de structures à grand nombre d'inconnues ou l'analyse de l'influence de phénomènes localisés sur le comportement global d'une structure. Dans ces approches, la notion d'interface au sens large est omniprésente : interface entre sous-domaines, interface de couplage, interface en tant qu'élément de jonction, de liaison ou d'interaction dans les assemblages. La majorité des travaux présentés ont été menés dans un contexte industriel et un environnement logiciel très cadrés, dans le souci de fournir à l'ingénieur des outils de simulation et des démarches de modélisation s'intégrant au mieux dans ses processus de dimensionnement et dans les codes éléments finis commerciaux couramment employés en calcul non-linéaire des structures.

Title: On the interfaces in nonlinear structural mechanics

Keywords: Model coupling, Domain decomposition methods, Linkage models, Model order reduction, Nonlinear computational mechanics, Contact mechanics

Abstract: Faced with the increasing complexity of the models making possible to describe more and more elaborated phenomena, methods for model coupling, domain decomposition and linkage modeling within assemblies are proposed for the computation of structures with a high number of unknowns or the analysis of the effect of localized phenomena on the global response of a structure. In these approaches, the notion of interface in the broad sense of the word is ubiquitous: interface between subdomains, coupling interface, interface as an element of linkage or interaction in the assemblies. Most of the presented works have been developed in a well-defined industrial context and software environment, with a view to providing engineers with simulation tools and modeling approaches which fit at best in the design process and the legacy finite element codes commonly used in nonlinear computational mechanics.

Université Paris-Saclay
Espace Technologique / Immeuble Discovery
Route de l'Orme aux Merisiers RD 128 / 91190 Saint-Aubin, France