

**Institut Farman – ENS de Cachan**

Appel à projets 2013

**Projet COMEDY**

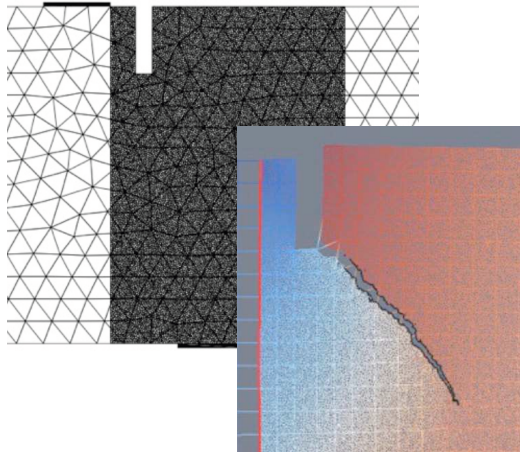
Collaboration LMT / CMLA

**Couplage de modèles multi-échelles espace/temps en dynamique**

LMT : C. Rey, L. Chamoin, J. Marchais  
CMLA : F. De Vuyst, D. Bouche

## Contexte

Le projet s'intéresse au couplage de modèles multi-échelles en dynamique. Modéliser, simuler un milieu, une structure, un fluide, intégrant tout la complexité et la richesse des modèles de comportement aux petites échelles restent aujourd'hui, notamment pour des raisons de coût de mise en œuvre, encore inaccessible. Il s'agit pourtant de défis indispensables à relever pour pouvoir envisager un jour, par exemple dans le monde aéronautique, la substitution des essais "structuraux" aux grandes échelles par des simulations numériques (virtual-testing), et obtenir, par la simulation, une prédiction fiable et robuste de l'intégrité des telles structures.



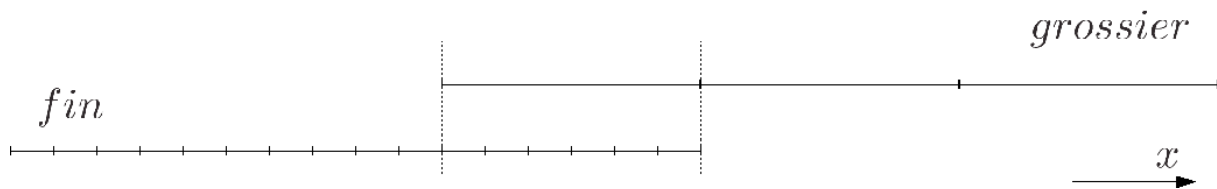
Un autre exemple est celui de certains matériaux en ingénierie (bétons, composites) pour lesquels l'analyse peut nécessiter une description de la structure et des hétérogénéités à l'échelle micro-voire nanoscopique (e.g. modèles discrets). Dans ces différents problèmes, les différentes échelles à la fois en espace et en temps concernées sont bien souvent incompatibles avec une étude de la propagation d'un signal, d'une onde, sur de longues distances. Toutefois, les effets d'intérêt aux petites échelles se concentrent bien souvent dans des régions localisées (présence de défauts, fortes déformations...) et le modèle le plus fin

n'est véritablement nécessaire que dans une zone restreinte. Un modèle plus grossier, obtenu par homogénéisation (sous des hypothèses de séparation d'échelles) permet quant à lui de pouvoir mener la simulation à un coût raisonnable tout en conservant l'information macro utile. Ainsi, un des objectifs des méthodes multi-échelles est de pouvoir prendre en compte la complexité des modèles à l'échelle micro dans une zone d'intérêt (localisée), tout en limitant drastiquement la complexité algorithmique et coût CPU, en ayant recours à des modèles grossiers pour le reste du milieu. Le développement de méthodes multi-échelles dans différents domaines a commencé il y a une vingtaine d'années et s'est particulièrement accéléré ces dernières années (voir par exemple quelques articles de synthèse [Curtin et al, 2003; Miller et al, 2009, ...] sur le couplage atomistique/continu). Il est à noter toutefois, que grand nombre de ces travaux se place dans le cadre statique. La littérature se révèle beaucoup moins riche en ce qui concerne le couplage de modèles en **dynamique**. La problématique du couplage de modèle en dynamique adresse de très nombreuses questions dont notamment la construction du modèle grossier pertinent/cohérent. Dans le cadre de ce projet, les modèles micro et macro seront donnés.

## Problématique scientifique

Intégrer et coupler des modèles, en dynamique, aux différentes échelles en **espace** et en **temps** en termes de modélisation et simulation sont des questions largement ouvertes. Une des questions centrales est comment « coller » ces modèles entre eux sans introduire d'artefact numérique (e.g. réflexion parasite ...). En effet, le couplage entre modèles introduit une interface « fictive » où les incompatibilités de modèles doivent être traitées pour permettre un dialogue pertinent entre les modèles. Les approches multi-échelles telles que les Quasi-Continuum Methods QCM [Tadmor 1996], les méthodes Arlequin ou Bridging domain [Ben Dhia, 1998, Chamoin et al 2008, Xu & Belytschko 2008, Aubertin et al 2009] et d'autres encore [Lubineau & al, 2012] ont en commun l'introduction d'une zone de transition volumique où les deux modèles coexistent (au travers de fonction de mélange sur une quantité

telle que l'énergie et un couplage volumique ou surfacique sur le bord de la zone de transition). Par exemple dans le cadre d'un couplage de modèles discrets nonlocal/local, il a été montré [Marchais et al, 2013] en statique que l'on pouvait définir des fonctions de mélange permettant le couplage « propre » (sans « ghost force ») entre ces deux modèles. Les premiers tests en dynamique montrent toutefois que ces méthodes de couplage, quoique cohérentes en statique, ne se comportent pas de la même manière en dynamique et des phénomènes de réflexion parasite peuvent malgré tout apparaître à l'interface. Ce point souligne l'influence de la définition du modèle dans la zone de transition volumique et constitue une motivation supplémentaire à ce projet. Hormis le **dialogue entre modèles grossier et fin**, un autre intérêt pratique des approches multiéchelle est la possibilité d'utiliser diverses échelles de discrétisation en espace et en temps (figure ci-dessous). En dynamique, diverses méthodes permettent de contrôler la qualité du couplage dans ce cadre [Combescuré & al, 2002, Rodriguez 2008, Diaz & Grote 2009, Ghanem et al 2013], avec une interface surfacique, et pourvu que les ondes propagées puissent être correctement représentées avec les différentes discrétisations mises en jeu.

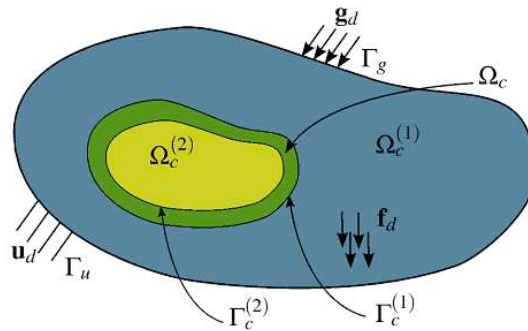


Que ce soit avec un couplage surfacique ou volumique, un point peu abordé en recherche est celui où le contenu **fréquentiel** du signal propagé, **non compatible** avec la discrétisation du modèle grossier. Cette incompatibilité, qui induit des phénomènes néfastes à l'interface, nécessite d'être prise en compte par un filtrage du signal. Certaines méthodes proposent ce type de filtrage, généralement avec une interface de couplage volumique [Jebahi et al 2013, Xu & Belytschko 2009, Aubertin et al 2009] et en introduisant un amortissement numérique par le schéma en temps utilisé ou le schéma de couplage. Néanmoins, ces méthodes sont assez empiriques et aucune ne permet de contrôler proprement le filtrage en sélectionnant la gamme de fréquence à filtrer en fonction de l'information transmissible par le modèle grossier. La problématique du filtrage du signal au niveau de l'interface de couplage est donc le point principal du projet.

### Description et originalité du projet de collaboration

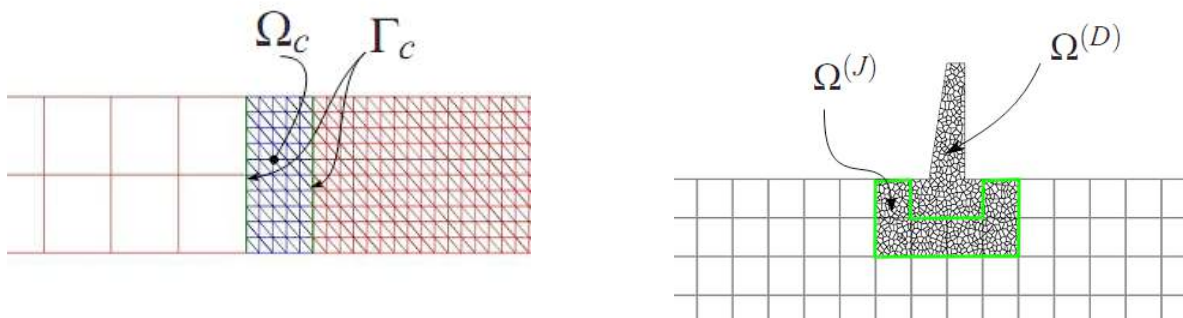
Le projet vise à étudier diverses stratégies de couplage en dynamique entre modèles multi-échelles, comprenant un filtrage partiel du signal, dans le cas où un des modèles n'est pas compatible avec l'information du propagée.

On se propose ici de séparer proprement les échelles spatiales et temporelles dans une zone de transition volumique telle que celle utilisée dans les méthodes Quasi-Continuum ou Arlequin (voir figure ci-dessous, la zone de transition étant indiquée en vert).



Plusieurs stratégies de séparation d'échelles seront alors envisagées : d'une part, l'utilisation d'opérateurs de projection d'une grille de discrétisation vers une autre ; d'autre part l'utilisation d'ondelettes. Les techniques de discrétisation à base d'ondelettes paraissent particulièrement appropriées puisqu'elles permettent une analyse fréquentielle, locale à la fois en temps et en espace [Goswami & Chan 2011]. Les opérateurs de synthèse permettent un filtrage naturel. Des méthodes de volumes finis dites multi-résolution peuvent aussi présenter un intérêt dans le filtrage spatial et temporel dans la zone de recouvrement. Il existe des approches dites par dictionnaires [Mallat 2001] qui permettent d'analyser sur une familles de motifs fréquentiels-temporels, puis de synthétiser sur ces motifs. Après séparation des échelles, on envisage de mener le filtrage partiel d'information avec une méthode dérivée de la PML [To & Li 2005]. Cette approche nous semble particulièrement adaptée car elle permet un contrôle précis et robuste du filtrage.

Dans un premier temps, les études seront menées en considérant le cas d'une incompatibilité entre modèles de calcul liée à des espaces de discrétisation (espace/temps) différents (voir figure ci-dessous, à gauche). Dans un second temps, on traitera le cadre plus général d'un couplage entre modèles décrits à différentes échelles, l'application visée étant le couplage entre modèles discrets et continus (voir figure ci-dessous, à droite).



## Planning

Ce projet à caractère exploratoire sera d'une durée de 24 mois. Il permettra de lancer un à deux stages de Master M2 sur les deux ans. Il pourra conduire à terme à un projet de plus grande envergure avec notamment un changement de dimension de l'équipe projet dans le cadre d'un projet de type ANR. Une réunion mensuelle est programmée sur ces deux années de projet pour régulièrement faire un état d'avancement du projet.

Pour résumer, les objectifs du projet sont :

- État de l'art
- Formalisation d'un problème modèle, cahier des charges
- Analyse du problème et expérimentation numérique
- Recherche et mise en place d'approches algorithmiques et numériques
- Application à une ou deux applications concrètes
- Publication d'un à deux articles + participation à conférences

## Compétences de l'équipe

Des travaux sur le couplage en dynamique entre modèles non-locaux et locaux ont déjà été réalisés dans le cadre de la thèse de J. Marchais, et ont mené à un couplage avec interface volumique dans laquelle la transition se fait progressivement. Les performances sont bonnes en statique. Un étudiant de Master 2, Q. Schmid, s'intéresse aussi dans le cadre de son stage de recherche à l'extension du couplage précédent pour la dynamique transitoire. L'ensemble des personnes amenées à collaborer dans ce projet est listé ci-dessous.

Nom	Statut	Participation au projet
Ludovic Chamoin	MCF LMT	15 %
Christian Rey	PU LMT	15 %
Jeremy Marchais	PhD LMT	60%
Quentin Schmid	Stagiaire LMT	100%
Florian De Vuyst	PU CMLA	15 %
Daniel Bouche	PAST CMLA/CEA	15 %

Ludovic Chamoin est spécialiste du contrôle des calculs et des modèles utilisés en simulation numérique. Il s'intéresse également au couplage multiéchelle des modèles et plus généralement à la réduction de modèle. Il anime au LMT-Cachan l'unité de recherche « Vérification et Validation de modèles ».

Christian Rey est spécialiste des approches par décomposition de domaine en mécanique du solide (linéaire et non linéaire). Il s'intéresse également au couplage multiéchelle des modèles et au contrôle des calculs. Il anime au LMT-Cachan l'unité de recherche « Problèmes couplés et parallélisme ».

Florian De Vuyst est un spécialiste de calcul scientifique et de méthodes numériques pour la discrétisation de problèmes aux dérivées partielles. Il possède une expertise sur les méthodes de volumes finis et leurs applications à des problèmes industriels réels.

Daniel Bouche est physicien/mathématicien, Professeur Associé ENSC (PAST) rattaché au

CMLA. Il est directeur du Laboratoire de Recherche Conventionné LRC MESO entre le CEA DAM DIF et le CMLA. Il est spécialiste de nombreux problèmes de couplages de modèles et de méthodes à différentes échelles, incluant fluides et matériaux (calculs particules-fluides, turbulence, couplage Vlasov-Maxwell, calcul ab initio, simulation multi-échelle des matériaux, etc.). Il est aussi chargé de mission au CEA pour le dimensionnement de la future machine exaflopique du CEA.

***Financements, fonctionnement et équipement (15 000 €) :***

Un total de 15 Keuros est demandé pour 2 ans, qui se décompose comme suit :

***Équipement (4 000 €):***

- Achat de nœuds pour le Cluster-LMT	4 000 €
<b>TOTAL (HT)</b>	<b>4 000 €</b>

***Fonctionnement (11 000 €):***

- Missions (conférences)	6 000 €
- Ordinateur portable	2 000 €
- Gratification de stage (420 €/mois)	3 000 €
<b>TOTAL (HT)</b>	<b>11 000 €</b>

## Références

- Abraham F. F., Broughton J. Q., Bernstein N., and Kaxiras E.. Spanning the continuum to quantum length scales in a dynamic simulation of brittle fracture. *Europhysics Letters*, 44(6):783–787, 1998.
- Anciaux G., Simulation multi-échelles des solides par une approche couplée dynamique moléculaire/éléments finis. De la modélisation à la simulation haute performance, Thèse de l'Université Bordeaux I, 2007.
- Aubertin P, Réthoré J., De Borst R., Energy conservation of atomistic/continuum coupling, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Volume 78, Issue 11, pages 1365–1386, 2009
- Bauman P. T., Ben Dhia H., Elkhodja N., Oden J. T., and Prudhomme S.. On the application of the Arlequin method to the coupling of particle and continuum models. *Computational Mechanics*, 42, 2008.
- Ben Dhia H., Multiscale mechanical problems: the Arlequin method. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences Paris Série IIB*, 326(12):899–904, 1998
- Blanc X., Le Bris C., Legoll F., Patz C., Finite-Temperature Coarse-Graining of One-Dimensional Models: Mathematical Analysis and Computational Approaches, *Journal of Nonlinear Science*, (2010), 20(2), pp 241-275.
- Capdeville Y., Guillot L., Marigo J.J, 2D non periodic homogenization to upscale elastic media for P-SV waves, *Geophys. J. Int.* (2010) 182, 903-922.
- Chamoin L., Prudhomme S., Ben Dhia H., Oden J.T., Ghost forces and spurious effects in atomic-to-continuum coupling methods by the Arlequin approach, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2010, 83:1081-1113.
- Chamoin L., Oden J.T., Prudhomme S., A stochastic coupling method for atomic-to-continuum Monte-Carlo simulations, *Computer Methods in Applied Mechanics & Engineering*, 2008, 197(43-44):3530-3546.
- Charpentier I. , De Vuyst F., Maday Y., A Component Mode Synthesis method of infinite order of accuracy using subdomain overlapping, *proceedings ENUMATH* (1995).
- Chilton S.H. and Colella P., Damping of spurious wave reflections from coarse-fine adaptive mesh refinement grid boundaries, *IEEE International Conference on Plasma Science*, DOI: 10.1109/PLASMA.2010.5534163 (2010).
- Cohen A., Kaber S.M., Muller S., Postel M., Fully adaptive multiresolution finite volume schemes for Conservation Laws, *Math. Comput.*, 71 (2003), pp. 183–225.
- Combescuré A., Gravouil A., A numerical scheme to couple subdomains with different time-steps for predominantly linear transient analysis, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 191 (2002), 1129-1157.
- Curtin W., Miller R. E., Atomistic/continuum coupling in computational materials science, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 11 (2003).
- Diaz J., Grote M.J., Energy conserving explicit local time stepping for second-order wave equations, *SIAM J. Sci. Comput.* Vol 31, #3, (2009) 1985-2014.
- Gavoille S., Rey C., Delaplace A., and Mariotti C. Stratégie de couplage de la méthode des éléments discrets avec la méthode des éléments spectraux, In 9e Colloque National en Calcul des Structures, 2009.

- Gavoille S., Delaplace A., Rey C., Application of recycling Krylov subspace strategy for discrete element method applied to brittle crack problems. *European Journal of Computational Mechanics*, (2009), 18(7-8):647-667.
- Ghanem A., Torkhani M., Mahjoubi N., Baranger T.N., Combescure A., Arlequin framework for multi-model, multi-time scale and heterogeneous time integrators for structural transient dynamics, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, in press.
- Gosselet P., Rey C. Non-overlapping domain decomposition methods in structural mechanics, *Archives of Computational Methods in Engineering*, vol 13, 4, pp 515-572, 2006.
- Goswami J.C., Chan A.K., *Fundamentals of wavelets: Theory, Algorithms, and Applications*, 2<sup>nd</sup> Edition, 359 p., Wiley (2011).
- Harten A., Discrete multi-resolution analysis and generalized wavelets, *Appl. Numer. Math.*, 12 (1993), pp. 153–193.
- Jebahi M., Charles J.-L., Dau, F., Illoul L., Iordanoff I., 3D coupling approach between discrete and continuum models for dynamic simulations (DEM–CNEM), *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Volume 255, 2013, Pages 196–209.
- Lubineau G., Azoud Y., Han F., Rey C., Askari A. A morphing strategy to couple non-local to local continuum mechanics, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. (2012), 60(6):1088-1102.
- Mallat, S., *Une exploration des signaux en ondelettes*, Editions de l'Ecole Polytechnique (2001).
- Marchais J., Rey C., Chamoin L., Geometrically consistent approximations of the energy for the transition between nonlocal and local particle models, submitted, 2013.
- Miller R. E. and Tadmor E.B.. The quasicontinuum method: Overview, applications and current directions. *J. Computer-Aided Mat. Design*, 9:203–239, 2002.
- Pebrel J., Rey C. and Gosselet P., A Nonlinear Dual-Domain Decomposition Method: Application to Structural Problems with Damage, *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, (2008), 6(3):251-262.
- Prudhomme S., Chamoin L., Ben Dhia H., Bauman P.T., An adaptive strategy for the control of modeling error in two-dimensional atomic-to-continuum coupling simulations, *Computer Methods in Applied Mechanics & Engineering*, 2009, 198(21-26):1887-1901.
- Rodríguez J., A Spurious-Free Space-Time Mesh Refinement for Elastodynamics, *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, vol. 6, 3, pp. 263--279, 2008.
- Tadmor E. B., *The Quasicontinuum Method*. PhD thesis, Brown University, 1996.
- To A.C., Li S., Perfectly matched multiscale simulations, *Physical Review B*, 72, 035414 (2005).
- Xiao S. P. and Belytschko T.. A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 193(17–20):1645–1669, 2004.
- Xu M., Belytschko T., Conservation properties of the bridging domain method for coupled molecular/continuum dynamics. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, vol. 76:278–294, 2008.