

Méthodes multi-échelles pour les matériaux cimentaires.

Introduction.

On présente dans ce chapitre les méthodes multi-échelles qui ont été développées durant ce travail de thèse. Elles sont au nombre de trois et appartiennent à la catégorie des *méthodes multi-échelles de Galerkin directes*, telle que caractérisée à la section §2.2.

Dans tout ce qui suit, Ω est soit un domaine rectangulaire (dimension $d = 2$) ou parallélépipédique (dimension $d = 3$). On cherche à résoudre un problème de diffusion sur Ω .

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (D \nabla C) = f & \text{dans } \Omega, \\ C = g_D & \text{sur } \Gamma_D, \\ D \nabla C \cdot \mathbf{n} = g_N & \text{sur } \Gamma_N, \end{cases} \quad (3.1)$$

où (Γ_D, Γ_N) est une partition de $\Gamma = \partial\Omega$ la frontière du domaine Ω . f , g_D et g_N sont respectivement le terme source, la condition aux limites de Dirichlet et la condition aux limites de Neumann.

Ce problème est approché par un problème linéaire de Galerkin, que l'on appelle *problème grossier* et qui prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} &\text{Trouver } C_H \in V_H \text{ tel que :} \\ &\forall v_H \in V_H \quad B_H(C_H, v_H) = a_H(v_H) \end{aligned} \quad (3.2)$$

où V_H est un espace vectoriel «bien choisi», B_H une application bilinéaire symétrique de $V_H \times V_H$ dans \mathbb{R} , et a_H une application linéaire de V_H dans \mathbb{R} .

Chacune des méthodes présentées suit le processus multi-échelle décrit à l'Algorithme 3.1, qui reprend les étapes de l'Algorithme 2.1. Le domaine de travail est tout d'abord discrétisé par le biais d'un maillage grossier $T_H(\Omega)$ (Alg. 3.1 L.1).

Ensuite, afin de résoudre le problème (3.2), on détermine l'espace vectoriel V_H qui est construit à partir des solutions des problèmes de *cellules*. Il s'agit de problèmes particuliers de diffusion définis sur chaque élément $K \in T_H(\Omega)$, que l'on résout sur un maillage fin (Alg. 3.1 L.2). Le problème grossier est ensuite assemblé, une opération qui demande de calculer plusieurs termes à l'échelle fine, et résolu (Alg. 3.1 L.3). Enfin, on calcule une solution fine $C_{H,h}$ à partir de la solution grossière C_H de (3.2) (Alg. 3.1 L.4).

Algorithme 3.1 Étapes des méthodes multi-échelles.

- | | |
|--|----------------|
| 1: Découpage du domaine Ω . | |
| 2: Résolution des problèmes de cellules. | ▷ Alg. 2.1 L.2 |
| 3: Construction et résolution du problème grossier sur V_H . | ▷ Alg. 2.1 L.3 |
| 4: Reconstruction d'une solution $C_{H,h}$ à l'échelle fine. | ▷ Alg. 2.1 L.4 |
-

La spécificité des méthodes ici présentées tient en partie dans la résolution des problèmes de cellules. En effet, on utilise ici des méthodes Volumes Finis pour résoudre tous les problèmes fins, alors que ceux-ci sont généralement résolus, dans ce contexte multi-échelle, par des méthodes de Galerkin. En effet, coupler deux types différents de méthodes aux échelles fine et grossière introduit des difficultés supplémentaires, ne serait-ce que pour construire le schéma grossier. Ce choix a cependant été motivé par plusieurs études sur les matériaux cimentaires [5, 47, 96] qui ont montré la supériorité, notamment en termes de stabilité, des méthodes Volumes Finis sur les problèmes à forte anisotropie et forts sauts de diffusivité.

De plus, des méthodes d'Éléments Finis *conformes*, d'Éléments Finis *non-conformes* et de Galerkin discontinues sont utilisées à l'échelle grossière. Si les deux premières ont déjà fait l'objet de nombreux travaux [28, 120, 121], l'utilisation dans ce contexte d'une méthode de Galerkin discontinue est, à notre connaissance, inédite.

On décrit, dans la suite du chapitre, chaque étape de l'Algorithme 3.1. Les méthodes numériques utilisées sont donc présentées au moment où elles interviennent dans le processus multi-échelle, c'est-à-dire lors de la résolution des problèmes locaux pour les méthodes Volumes Finis, et lors de la construction du schéma grossier pour les méthodes de Galerkin.

La première méthode développée utilise un schéma de Volumes Finis à neuf points au niveau fin, et un schéma Éléments Finis Q_1 à l'échelle grossière. Cette méthode a fait l'objet d'une implémentation sur une maquette indépendante, dont on présentera l'architecture et les résultats numériques au chapitre §4.

Les seconde et troisième méthodes utilisent un schéma de Volumes Finis dit *VFDiam* au niveau fin. Au niveau grossier, il s'agit respectivement d'un schéma d'Éléments Finis Q_1 et d'une méthode de Galerkin Discontinue à pénalité intérieure

[82]. Elles ont été implémentées au sein du code de calcul *MPCube* [61]. On en présente les résultats au chapitre §5.

La dernière partie §3.6 de ce chapitre est consacrée aux matériaux cimentaires. On y présente le modèle, dit *par inclusions*, choisi pour décrire les matériaux cimentaires au cours de ces travaux de thèse. La modélisation des phénomènes de dégradation, de vieillissement, est également présentée.

3.1 Découpage du domaine Ω .

Définition 3.1 *On appelle division du milieu Ω ; et on note \mathcal{D} ; un d – uplet d’entiers strictement positifs. Le domaine Ω est alors uniformément divisé en $\mathcal{D}(i)$ éléments parallélépipédiques selon chaque direction i . Cette division construit donc une discrétisation grossière $T_H(\Omega)$ de Ω .*

Définition 3.2 *On appelle macroélément; et on note K ; un élément de la discrétisation grossière $T_H(\Omega)$. En appliquant l’ordre lexicographique aux barycentres des éléments de $T_H(\Omega)$, chaque macroélément K se voit attribuer un d – uplet d’entiers positifs. Ce d – uplet représente les coordonnées de K au sein de $T_H(\Omega)$. Généralement, on assimile le macroélément à ses coordonnées, que l’on note tous deux K .*

Dans le cas $3D$, chaque macroélément K est un parallélépipède rectangle dont les arêtes suivent les axes des coordonnées. En posant $m_K = (x_m, y_m, z_m)$ et $M_K = (x_M, y_M, z_M)$, on a l’égalité suivante :

$$K =]x_m, x_M[\times]y_m, y_M[\times]z_m, z_M[. \quad (3.3)$$

Définition 3.3 *On définit un ordre partiel \leq sur les macroéléments K_a et K_b par la relation suivante :*

$$K_a \leq K_b \quad \Leftrightarrow \quad \forall 1 \leq i \leq d \quad K_a(i) \leq K_b(i). \quad (3.4)$$

La Figure 3.1 (partie gauche) présente un exemple de division du domaine Ω , pour lequel on a choisi $\mathcal{D} = (2, 2)$.

Définition 3.4 *On appelle taux de sur-échantillonnage; et on note ρ ; un réel positif. On appelle découpage le couple (\mathcal{D}, ρ) . On appelle cellule; et on note \hat{K} ; l’union du macroélément K et d’une fraction ρ de ses voisins.*

Par définition, la cellule \hat{K} empiète sur les macroéléments connexes de K , comme l’illustre la Figure 3.1 (droite). Dans le cadre $3D$, on a l’égalité suivante :

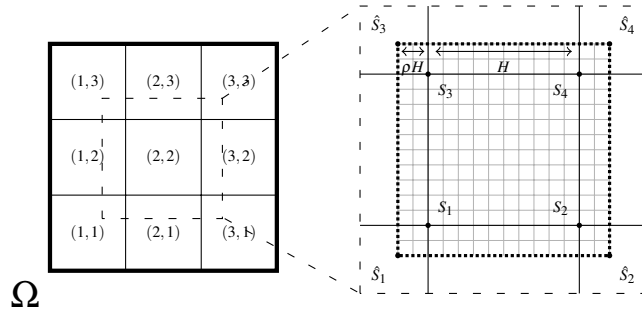


FIGURE 3.1 – Le domaine Ω (en gras) est divisé en macroéléments rectangulaires K (ligne solide). La cellule \hat{K} (en pointillé), construite à partir de K et d'une fraction ρ de ses voisins, est maillée finement (traits fins gris).

$$\hat{K} =]x_m - \rho(x_M - x_m), x_M + \rho(x_M - x_m)[\times \\]y_m - \rho(y_M - y_m), y_M + \rho(y_M - y_m)[\times \\]z_m - \rho(z_M - z_m), z_M + \rho(z_M - z_m)[. \quad (3.5)$$

La méthode multi-échelle n'utilise pas nécessairement le sur-échantillonnage : on peut choisir $\rho = 0$ et retrouver alors $\hat{K} = K$.

Remarque 3.1 *Il est important de noter que, en pratique, pour des raisons de gestion de la mémoire, le milieu n'est jamais créé entièrement puis découpé. En effet, même si l'on dispose bien d'une description globale du milieu (diffusivités, positions et formes des inclusions, etc.), la construction du milieu (création des géométries, maillage) se fait directement cellule par cellule. Il est cependant parfaitement possible de fusionner tout ou partie des macroéléments pour obtenir une vision d'ensemble du milieu. Les détails pratiques de la construction des cellules (champs de diffusivités, génération de maillages, etc.) sont décrites à la section §4.3, pour la première méthode, et au chapitre §6, pour les deuxième et troisième méthodes.*

3.2 Résolution des problèmes de cellules.

3.2.1 Problèmes de cellules et Volumes Finis.

3.2.1.1 Problèmes de cellules.

Soit $n = 4$ (dimension 2) ou $n = 8$ (dimension 3), on appelle $(S_i)_{1 \leq i \leq n}$ les sommets du macroélément K et $(\hat{S}_i)_{1 \leq i \leq n}$ les sommets de la cellule \hat{K} correspondante. Ces notations sont illustrées à la Figure 3.1 (droite).

Sur chaque cellule \hat{K} , pour chaque $1 \leq i \leq n$ on doit résoudre un *problème de cellule* :

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (D\nabla\Psi_{\hat{K}}^i) = 0 & \text{dans } \hat{K}, \\ \Psi_{\hat{K}}^i = \beta^i & \text{sur } \partial\hat{K}. \end{cases} \quad (3.6)$$

β^i est une fonction linéaire continue sur chaque face de $\partial\hat{K}$. En notant δ le symbole de Kronecker, on la définit univoquement par les conditions suivantes :

$$\forall 1 \leq j \leq n \quad \beta^i(\hat{S}_j) = \delta_{i,j}. \quad (3.7)$$

Remarque 3.2 *Les conditions aux limites utilisées ici sont des conditions aux limites linéaires mais d'autres possibilités existent. En particulier, on présente dans [28, 120] l'impact positif de conditions oscillantes sur la méthode. Le principe est d'utiliser la solution d'un problème de diffusion à la dimension $d - 1$ comme conditions aux limites des problèmes de cellule en dimension d . Ces conditions sont cependant difficiles à mettre en œuvre, surtout dans un contexte 3D, puisqu'elles nécessitent alors de résoudre, non pas un problème par sommet, mais un problème par arête, par face et par sommets de \hat{K} . Même si l'intérêt des conditions oscillantes est certains ; voir à ce sujet la section §3.3.1.1 ; on s'en tient donc, au cours de ces travaux, aux conditions linéaires.*

3.2.1.2 Principe des méthodes de Volumes Finis.

Pour résoudre les problèmes de cellule, deux méthodes numériques appartenant à la famille des Volumes Finis ont été utilisées : les méthodes *VF9* et *VFDiam*. On présente ici le principe général des méthodes de Volumes Finis, tandis que les spécificités des méthodes *VF9* et *VFDiam* sont l'objet des sections suivantes.

On quitte, pour le reste de la section, le cas particulier des problèmes de cellules, pour travailler sur un problème elliptique général. Soit Δ un domaine de \mathbb{R}^d et soit à résoudre le problème elliptique suivant :

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (A\nabla u) = 0 & \text{dans } \Delta, \\ u = u_D & \text{sur } \partial\Delta. \end{cases} \quad (3.8)$$

Soit $T_h(\Delta)$ une discrétisation du domaine Δ . Pour tout élément $k \in T_h(\Delta)$, en utilisant la formule de Green, l'équation (3.8) peut s'écrire sous la forme intégrale suivante :

$$\sum_{f \in \partial k} \int_f -A\nabla u \cdot \mathbf{n}_f = 0 \quad (3.9)$$

où \mathbf{n}_f est le vecteur normal à la face f , sortant de k .

Le principe des méthodes de Volumes Finis est de construire un schéma numérique en partant des propriétés du flux $L_{k,f}$ de u à travers une face f du maillage.

$$L_{k,f} = \int_f (A\nabla u \cdot \mathbf{n}_f) \quad (3.10)$$

Pour cela, on suppose généralement que u_h , la solution approchée de u , est constante sur chaque élément k de $T_h(\Delta)$. On réalise ensuite une approximation $\tilde{L}_{k,f}$ de $L_{k,f}$ à partir de points caractéristiques du milieu, comme les barycentres de k et f . Certaines des inconnues introduites par l'approximation sont supprimées en utilisant la continuité du flux à travers la face f :

$$\forall f \in \partial k_1 \cap \partial k_2 \quad L_{k_1,f} + L_{k_2,f} = 0 \quad (3.11)$$

Pour chaque méthode des Volumes Finis, il faut donc présenter l'approximation \tilde{L}_f utilisée. Il est également nécessaire, pour la suite du processus multi-échelle, de déterminer une valeur $u_h(f)$ pour chaque face f de $T_h(\Delta)$. Cette quantité n'étant pas naturellement calculée par les méthodes de Volumes Finis, on l'interpole à partir des valeurs connues de u_h .

Plus de détails sur les méthodes de Volumes Finis, ainsi qu'un grand nombre d'exemples, sont disponibles dans [95].

3.2.2 La méthode de Volumes Finis à neuf points VF9.

La première méthode que l'on présentera est la méthode de Volume Finis dite à *neuf points* ou VF9 introduite par *Faille* [97]. Cette méthode s'applique dans un cadre bidimensionnel uniquement, et permet de résoudre des problèmes sur un maillage quadrangulaire irrégulier où A est un tenseur discontinu.

Comme on le voit dans la suite, l'approximation de L_f fait intervenir quatre éléments du maillage. Utilisée tour à tour sur les quatre cotés d'un élément du maillage, on lie ainsi les valeurs de neuf éléments, d'où le nom de la méthode. Si l'on suppose A diagonal, et que le maillage est rectangulaire «parallèle aux axes», cette méthode est équivalente à la méthode classique des *Volumes Finis à cinq points* [95].

3.2.2.1 Approximation du flux à travers une face.

On considère deux éléments (k^-, k^+) adjacents du maillage fin $T_h(\Delta)$, et on appelle f leur arête commune, comme l'illustre la Figure 3.2. On note G_f , h_f et \mathbf{n}_f^+ respectivement le barycentre, la longueur et la normale extérieure à E^+ de l'arête f .

On suppose la matrice A constante sur chaque élément, de valeurs respectives A^- et A^+ . En notant tA la transposée de A , on a :

$$\begin{aligned} L_{k^+,f} &= \int_f (A^+ \nabla u \cdot \mathbf{n}_f^+) \\ &= \int_f (\nabla u \cdot {}^tA^+ \mathbf{n}_f^+) \end{aligned}$$

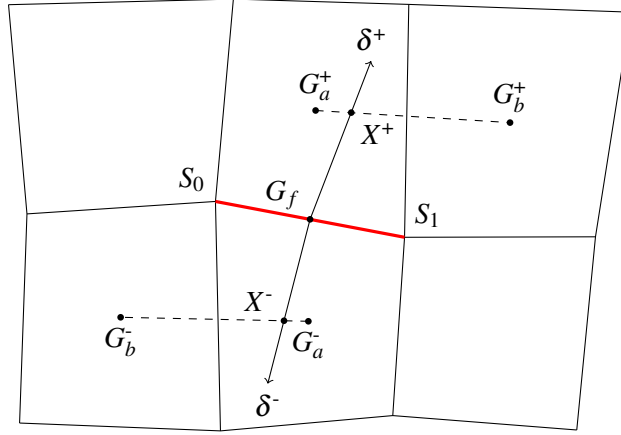


FIGURE 3.2 – Principaux points et droites introduits par le schéma VF9 afin d'approximer le flux à travers la face $f = S_0S_1$ (en rouge).

Soit δ^+ la demi-droite d'origine G_f et de vecteur directeur $-{}^tA^+\mathbf{n}_f^+$. Parmi les éléments voisins de f , il existe alors deux éléments adjacents k_a^+ et k_b^+ , de barycentres G_a^+ et G_b^+ , tel que δ^+ coupe le segment $[G_a^+G_b^+]$. Nécessairement, k^+ est l'un de ces deux éléments.

On note X^+ le point d'intersection de δ^+ et de $[G_a^+G_b^+]$. On introduit u_{X^+} et u_{G_f} les valeurs de u en X^+ et G_f . On approxime alors le flux à travers f par :

$$\tilde{L}_{k^+,f} = -h_f a^+ \frac{u_{X^+} - u_{G_f}}{d_f^+} \quad (3.12)$$

où on a posé $a^+ = \|{}^tA^+\mathbf{n}_f^+\|_2$ la norme du vecteur ${}^tA^+\mathbf{n}_f^+$ et d_f^+ la distance entre les points G_f et X^+ . On peut écrire une formulation similaire pour $L_{k^-,f}$. En utilisant (3.11), il vient alors :

$$u_{G_f} = \frac{d_f^- a^+ u_{X^+} + d_f^+ a^- u_{X^-}}{d_f^- a^+ + d_f^+ a^-} \quad (3.13)$$

On peut donc s'affranchir de u_{G_f} pour approximer $L_{k^+,f}$. Il ne reste plus qu'à exprimer u_{X^+} et u_{X^-} en fonction de valeurs aux barycentres des éléments de $T_h(\Delta)$. X^+ étant sur le segment $[G_a^+G_b^+]$, on note d_a^+ la distance entre G_a^+ et X^+ , et on définit alors u_{X^+} comme une interpolation linéaire de u_a^+ et u_b^+ :

$$u_{X^+} = \frac{1}{d_a^+ + d_b^+} (d_b^+ u_a^+ + d_a^+ u_b^+) \quad (3.14)$$

En utilisant (3.13) et (3.14), on obtient finalement l'approximation :

$$\tilde{L}_{k^+,f} = -h_f \frac{a^+ a^-}{d_f^+ a^+ + d_f^- a^-} \left[\frac{1}{d_a^+ + d_b^+} (d_a^+ u_a^+ + d_b^+ u_b^+) - \frac{1}{d_a^- + d_b^-} (d_a^- u_a^- + d_b^- u_b^-) \right] \quad (3.15)$$

3.2.2.2 Valeurs aux faces.

Soit f une face du maillage fin $T_h(\Delta)$. Si f est une face intérieure à $T_h(\Delta)$, on définit u_f la valeur en la face f par le biais de l'équation (3.13). Par définition, cette valeur permet de garantir la continuité des flux à travers f . Si f appartient à la frontière du domaine de travail Δ , on connaît explicitement la valeur de u , par le biais des conditions aux limites de Dirichlet du problème (3.8). On choisit de prendre la valeur en G_f .

$$u_f = \begin{cases} \frac{d_f^+ a^+ u_{X^+} + d_f^- a^- u_{X^-}}{d_f^+ a^+ + d_f^- a^-} & \text{si } f = \partial k^+ \cap \partial k^-, \\ u_D(G_f) & \text{si } f \subset \partial \Delta. \end{cases} \quad (3.16)$$

3.2.3 La méthode de Volumes Finis *VFDiam*.

Décrite en premier lieu par *Coudière* et al. dans [79], la méthode de Volumes Finis *VFDiam* est utilisée par le CEA pour résoudre des problèmes de diffusion dans des milieux où siègent de fortes anisotropies ou de forts contrastes de diffusivités [20], ce qui est le cas, notamment, des matériaux cimentaires.

Contrairement à de nombreuses méthodes de Volumes Finis, dont la méthode *VF9*, la méthode *VFDiam* s'applique aussi bien en deux qu'en trois dimensions et indépendamment de la forme des éléments du maillage (triangles, tétraèdres, quadrangles ou hexaèdres). On se concentre dans cette section sur le cadre bidimensionnel, où l'on travaille sur un maillage triangulaire. la description du cas 3D est disponible à l'annexe §A.

3.2.3.1 Approximation du flux à travers une face.

On considère deux éléments adjacents k^+ et k^- du maillage fin $T_h(\hat{K})$, et on note $f = S_0 S_1$ leur face commune. On note G_f le barycentre de f . Les inconnues, respectivement u^+ et u^- , sont situées aux barycentres G^+ et G^- des éléments. On suppose la matrice A constante sur chaque élément, de valeurs respectives A^+ et A^- . La Figure 3.3 illustre les notations employées.

La méthode *VFDiam* s'appuie sur la construction d'un volume autour de la face f , que l'on appelle le *volume VFDiam*. Il s'agit de l'union des deux demi-éléments diamant $k_f^+ = S_0 S_1 G^+$ et $k_f^- = S_0 S_1 G^-$, de volumes respectifs V^- et V^+ . On introduit ensuite G_f , le barycentre de f , et les inconnues intermédiaires u_{S_i} localisées sur les noeuds S_i .

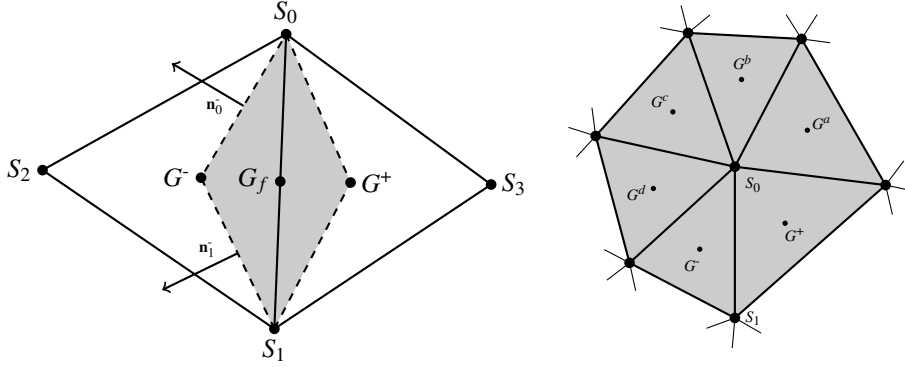


FIGURE 3.3 – À gauche : un élément $VFDiam$ (en gris) est défini le long de la face commune de deux éléments adjacents. À droite : l'ensemble \mathbb{S}_0 (en gris) regroupe tous les éléments contenant le noeud S_0 .

Afin de construire une approximation $\tilde{L}_{k^+,f}$ de $L_{k^+,f}$, on va tout d'abord moyenner la quantité $A\nabla u$ sur k_f^+ et k_f^- . Cette moyenne permet d'obtenir un premier lien entre les inconnues principales u^+ et u^- , les inconnues intermédiaires u_{S_i} et u_{G_f} , la valeur en G_f . On élimine ensuite la valeur en G_f en imposant la continuité sur f des flux moyens, sur le modèle de l'équation (3.11).

Sur le volume k_f^+ , on a :

$$\begin{aligned} \langle A\nabla u \rangle_{k_f^+} &= \frac{1}{V^+} \int_{k_f^+} A\nabla u \\ &= \frac{A^+}{V^+} \int_{\partial k_f^+} u \mathbf{n} \\ &= \frac{A^+}{V^+} \left(\int_{G^+S_0} u \mathbf{n} + \int_{S_0G_f} u \mathbf{n} + \int_{G_fS_1} u \mathbf{n} + \int_{S_1G^+} u \mathbf{n} \right) \end{aligned}$$

où \mathbf{n} désigne le vecteur normal unitaire extérieur à k_f^+ . Sur chaque face de k_f^+ , on approxime u par la moyenne des valeurs aux sommets correspondants. On note de plus respectivement \mathbf{n}_0^+ , \mathbf{n}_1^+ et \mathbf{n}_f^+ les vecteurs normaux à G^+S_0 , G^+S_1 et S_0S_1 , extérieurs à k_f^+ , de norme $\|G^+S_0\|$, $\|G^+S_1\|$ et $\|S_0S_1\|$. On a alors :

$$\langle A\nabla u \rangle_{k_f^+} \approx \frac{A^+}{V^+} \left(\frac{u^+ + u_{S_0}}{2} \mathbf{n}_0^+ + \frac{u_{S_0} + u_{G_f}}{2} \frac{\mathbf{n}_f^+}{2} + \frac{u_{G_f} + u_{S_1}}{2} \frac{\mathbf{n}_f^+}{2} + \frac{u_{S_1} + u^+}{2} \mathbf{n}_1^+ \right) \quad (3.17)$$

$$\approx \frac{A^+}{2V^+} \left(-\mathbf{n}_f^+ u^+ + \mathbf{n}_f^+ u_{G_f} + \left(\mathbf{n}_0^+ + \frac{\mathbf{n}_f^+}{2} \right) u_{S_0} + \left(\mathbf{n}_1^+ + \frac{\mathbf{n}_f^+}{2} \right) u_{S_1} \right) \quad (3.18)$$

où on a tenu compte du fait que $\mathbf{n}_0^+ + \mathbf{n}_1^+ + \mathbf{n}_f^+ = \mathbf{0}$. De même, on peut calculer une formule similaire pour l'élément k_f^- :

$$\langle A\nabla u \rangle_{k_f^-} \approx \frac{A^-}{2V^-} \left(-\mathbf{n}_f^- u^- + \mathbf{n}_f^- u_{G_f} + \left(\mathbf{n}_0^- + \frac{\mathbf{n}_f^-}{2} \right) u_{S_0} + \left(\mathbf{n}_1^- + \frac{\mathbf{n}_f^-}{2} \right) u_{S_1} \right) \quad (3.19)$$

On suppose maintenant que ces deux approximations vérifient la continuité des flux à travers la face f , c'est-à-dire que l'on a :

$$\langle A\nabla u \rangle_{k_f^+} \mathbf{n}_f^+ + \langle A\nabla u \rangle_{k_f^-} \mathbf{n}_f^- = 0 \quad (3.20)$$

On pose $a^+ = A^+/(2V^+)$, $\mathbf{t}_0^+ = \mathbf{n}_0^+ + \mathbf{n}_f^+/2$ et $\mathbf{t}_1^+ = \mathbf{n}_1^+ + \mathbf{n}_f^+/2$, ainsi que des quantités similaires sur k^- . On pose également $\mathbf{n}_f = \mathbf{n}_f^+ = -\mathbf{n}_f^-$ pour alléger les notations. En rapportant (3.18) et (3.19) dans (3.20), il est possible d'obtenir une expression de u_{G_f} :

$$u_{G_f} = \frac{u^+(a^+ \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f + u^-(a^- \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f + u_{S_0} [(a^- \mathbf{t}_0) \cdot \mathbf{n}_f - (a^+ \mathbf{t}_0^+) \cdot \mathbf{n}_f]}{(a^+ \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f + (a^- \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f} + u_{S_1} \frac{(a^- \mathbf{t}_1) \cdot \mathbf{n}_f - (a^+ \mathbf{t}_1^+) \cdot \mathbf{n}_f}{(a^+ \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f + (a^- \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f} \quad (3.21)$$

En reportant (3.21) dans (3.18) ou (3.19), on dispose de l'approximation de flux suivante :

$$\begin{aligned} \tilde{L}_{k^+,f} &= \langle A\nabla u \rangle_{k_f^+} \cdot \mathbf{n}_f^+ \\ \tilde{L}_{k^+,f} &= \frac{(a^- \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f (a^+ \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f}{(a^+ \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f + (a^- \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f} (u^- - u^+) \\ &\quad + \frac{(a^- \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f (a^+ \mathbf{t}_0^+) \cdot \mathbf{n}_f + (a^+ \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f (a^- \mathbf{t}_0) \cdot \mathbf{n}_f}{(a^+ \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f + (a^- \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f} u_{S_0} \\ &\quad + \frac{(a^- \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f (a^+ \mathbf{t}_1^+) \cdot \mathbf{n}_f + (a^+ \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f (a^- \mathbf{t}_1) \cdot \mathbf{n}_f}{(a^+ \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f + (a^- \mathbf{n}_f) \cdot \mathbf{n}_f} u_{S_1} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Pour obtenir cette approximation, on a introduit les inconnues intermédiaires $\{u_{S_i}\}$. Pour que le problème reste bien posé, il devient donc nécessaire d'imposer une relation supplémentaire liant nos inconnues. On utilise pour cela une méthode d'interpolation par moindres carrés sur S_i , l'ensemble des éléments incidents au noeud S_i (cf. Figure 3.3, partie droite). On suppose que u est linéaire sur S_i , et qu'il existe donc des coefficients $(w_{i,j})_{0 \leq j \leq d}$ tels que :

$$u(\mathbf{x}) = w_{i,0} + \sum_{1 \leq j \leq d} w_{i,j} x_j \quad \text{sur } S_i \quad (3.23)$$

En appliquant (3.23) aux barycentres $\{G_j\}$ des éléments composants \mathbb{S}_i , on obtient un système linéaire liant les coefficients $(w_{i,j})_{0 \leq j \leq d}$ aux inconnues principales $\{u^j\}$. Ce système est ensuite résolu par décomposition en valeurs singulières [19, 40, 61]. Par le biais de (3.23), u_{S_i} est alors exprimé comme combinaison linéaire des inconnues principales $\{u^j\}$.

3.2.3.2 Valeurs aux faces.

Afin de déterminer une valeur approchée de u en la face f , on utilise les inconnues intermédiaires $\{u_{S_i}\}$ introduites par le schéma *VFDiam*. Une fois le problème (3.8) résolu, il est facile de calculer ces valeurs à partir des inconnues principales $\{u_i\}$. On calcule alors sur la face $f = \{S_i\}$ intérieure au maillage fin, la moyenne des valeurs $\{u_{S_i}\}$ correspondantes. C'est cette valeur que l'on choisit comme valeur de \tilde{u}_f .

Si f appartient à $\partial\Delta$, la frontière du domaine Δ , on connaît explicitement la valeur de u par le biais des conditions aux limites de Dirichlet du problème (3.8). On choisit de prendre la valeur en G_f .

On a donc :

$$u_f = \begin{cases} u_D(G_f) & \text{si } f \subset \partial\Delta. \\ \frac{1}{n_f} \sum_{S_i \in f} u_{S_i} & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.24)$$

où n_f est le nombre de sommets de la face f .

3.3 Résolution du problème grossier.

Au cours de ces travaux, deux schémas grossiers ont été étudiés.

Tout d'abord, le problème grossier a été résolu par une méthode d'Éléments Finis. On a choisi de garder la méthode conforme, c'est-à-dire de ne pas tenir compte des discontinuités créées par la méthode de sur-échantillonnage. En effet, les précédents usages en la matière donnaient à penser que ces discontinuités resteraient faibles et ne pénaliseraient pas la méthode [90]. Comme on le verra au chapitre §4, cela n'a pas été le cas pour les exemples d'applications de ces travaux de thèse, où les contraintes de diffusivités sont très fortes.

C'est pourquoi on a implémenté une seconde méthode grossière, qui prend cette fois-ci en compte la non-conformité de l'espace discret grossier V_H . Le choix s'est porté sur une méthode discontinue de Galerkin à pénalité intérieure [29].

On rappelle que Ω est un domaine rectangulaire, respectivement parallélépipédique, et $T_H(\Omega)$ sa discrétisation grossière en rectangles, respectivement parallélépipèdes, issue de la définition 3.1.

On suppose en outre que le maillage $T_H(\Omega)$ est cohérent avec la partition de la frontière $\partial\Omega$ en (Γ_D, Γ_N) , les surfaces où s'appliquent respectivement les condi-

tions aux limites de Dirichlet et de Neumann du problème (3.1). À partir des faces de $T_H(\Omega)$, on peut donc définir $T_H(\Gamma_D)$ et $T_H(\Gamma_N)$ les discrétisations de Γ_D et Γ_N .

3.3.1 Méthode des Éléments Finis Q_1 .

La première méthode grossière que l'on a testé fut une méthode d'Éléments Finis Q_1 [50, 94]. Elle a tout d'abord été implémentée dans une maquette Python indépendante (§4) puis intégrée au sein du code de calcul *MPCube* (§5).

3.3.1.1 L'espace de discrétisation V_H .

Sur chaque macroélément $K \in T_H(\Omega)$, on construit les fonctions $(\Phi_K^i)_{1 \leq i \leq n}$ par combinaison linéaire des fonctions $(\Psi_{\hat{K}}^i)_{1 \leq i \leq n}$, les solutions des problèmes de cellules (3.6). On détermine les coefficients $a_{i,l}$ en imposant, pour tout $1 \leq i \leq n$:

$$\forall 1 \leq j \leq n \quad \Phi_K^i(S_j) = \sum_{1 \leq l \leq n} a_{i,l} \Psi_{\hat{K}}^l(S_j) = \delta_{i,j}. \quad (3.25)$$

Soit \mathcal{J} l'ensemble des nodes du maillage grossier $T_H(\Omega)$, et $N_{\mathcal{J}}$ le cardinal de \mathcal{J} . On définit la fonction Φ^I , associée au noeud $I \in \mathcal{J}$, morceau par morceau sur chaque macroélément K contenant I . Si I coïncide avec le sommet S_j de K , on a donc :

$$\Phi_{|K}^I = \Phi_K^j.$$

On définit alors l'espace de discrétisation V_H par :

$$V_H = \text{Vect}((\Phi^I)_{I \in \mathcal{J}}). \quad (3.26)$$

À cause du sur-échantillonnage des cellules, les fonctions $(\Phi^I)_{I \in \mathcal{J}}$ ne sont pas nécessairement continues à travers les frontières ∂K des macro-éléments K . La méthode Q_1 est donc *non-conforme*. En pratique cependant, on suppose que cette non-conformité est négligeable, et on n'en tient pas compte dans l'implémentation de la méthode.

Il est à noter que sur-échantillonner les macroéléments n'est pas strictement nécessaire à la méthode multi-échelle. On peut choisir un découpage du milieu où $\rho = 0$ et donc avoir $\hat{K} = K$. Dans ce cas, cette étape de la méthode devient triviale, puisque l'on a :

$$\forall K, \forall 1 \leq i \leq n \quad \Phi_K^i = \Psi_{\hat{K}}^i$$

Cependant, quand ρ est nul, la méthode multi-échelle est moins efficace. En effet, de part les conditions aux limites (3.7) imposées aux problèmes de cellules

(3.6), les fonctions $(\hat{\Psi}_K^I)_{1 \leq I \leq n}$ sont linéaires sur les frontières $\partial \hat{K}$. Sans recouvrement, il en est alors de même des fonctions $(\Phi^I)_{I \in \mathcal{J}}$, et donc également de la solution au problème (3.2). Imposer ainsi une linéarité artificielle sur une partie du milieu pénalise la méthode en créant des *effets de bords* le long des frontières des macroéléments K . Ce problème a été identifié très tôt dans l'histoire de la méthode d'Éléments Finis multi-échelles, dès l'article original de *Hou et Wu* [120]. Les auteurs ont alors proposé deux techniques pour résoudre ce problème : utiliser des conditions limites oscillantes (cf. §3.2.1) ou une méthode du sur-échantillonnage. Les apports qualitatifs et quantitatifs du sur-échantillonnage ρ n'ont cependant été démontrés que plus tard [90].

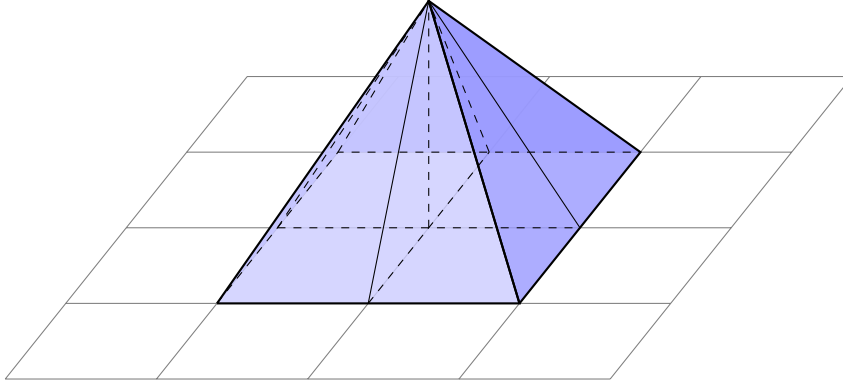


FIGURE 3.4 – Méthode d'Éléments Finis : un élément Φ^I de la base de V_H a pour support tous les macroélément $K \in T_H(\Omega)$ contenant le noeud I .

3.3.1.2 Problème discret.

Pour tout $v_H \in V_H$, $v_H = 0$ sur Γ_D , on peut écrire (3.1) sous la forme intégrale suivante :

$$\int_{\Omega} D \nabla C \cdot \nabla v_H = \int_{\Omega} f v_H + \int_{\Gamma_N} g_N v_H \quad \text{sur } \Gamma_D$$

$C = g_D$

On note $T_H(\Gamma_D)$ et $T_H(\Gamma_N)$ les discrétisations respectives de Γ_D et Γ_N . Le problème grossier (3.2) est alors défini par les fonctions B_H et a_H suivantes :

$$\forall (v_H, w_H) \in V_H^2 \quad B_H(u_H, v_H) = \int_{\Omega} D \nabla u_H \cdot \nabla v_H \quad (3.27)$$

$$\forall v_H \in V_H \quad a_H(v_H) = \int_{\Omega} f v_H + \int_{\Gamma_N} g_N v_H \quad (3.28)$$

$$\text{Sur } \Gamma_D \quad C_H = g_D. \quad (3.29)$$

3.3.1.3 Forme matricielle.

Soient \mathcal{I} , \mathcal{I}_N et \mathcal{I}_D les ensembles des noeuds du maillage grossier $T_H(\Omega)$ décrivant respectivement Ω , Γ_N et Γ_D . On suppose les termes source, de Neumann et de Dirichlet suffisamment réguliers, et on les assimile alors à leur projection sur V_H .

$$f = \sum_{I \in \mathcal{I}} F(I) \Phi_I \quad (3.30)$$

$$g_D = \sum_{I \in \mathcal{I}_D} G_D(I) \Phi_I \quad (3.31)$$

$$g_N = \sum_{I \in \mathcal{I}_N} G_N(I) \Phi_I. \quad (3.32)$$

Résoudre le problème discrétisé (3.2) revient alors à résoudre le problème matriciel suivant :

$$\mathcal{L}_D(\mathbb{K})C_H = \mathcal{S}_D(\mathbb{M}F + \mathbb{M}_b G_N), \quad (3.33)$$

où \mathcal{L}_D et \mathcal{S}_D représentent un traitement particulier permettant d'imposer les conditions aux limites de Dirichlet au système linéaire. Il est décrit plus bas, à la section §3.3.1.4. Les matrices de raideur \mathbb{K} , de masse \mathbb{M} et de masse de bord \mathbb{M}_b sont définies par :

$$\forall (I, J) \in \mathcal{I}^2 \quad \mathbb{K}(I, J) = \int_{\Omega} D \nabla \Phi^I \cdot \nabla \Phi^J. \quad (3.34)$$

$$\forall (I, J) \in \mathcal{I}^2 \quad \mathbb{M}(I, J) = \int_{\Omega} \Phi^I \Phi^J. \quad (3.35)$$

$$\forall (I, J) \in \mathcal{I}_N \quad \mathbb{M}_b(I, J) = \int_{\Gamma_N} \Phi^I \Phi^J. \quad (3.36)$$

Ces trois matrices sont assemblées à partir de leurs versions locales \mathbb{K}_K , \mathbb{M}_K et $\mathbb{M}_{b,F}$, où $K \in T_H(\Omega)$ et $F \in T_H(\Gamma_N)$. Cela permet d'une part de distribuer le calcul fin sur plusieurs processeurs, et d'autre part de s'affranchir des sauts aux interfaces ∂K que peuvent présenter les fonctions $(\Phi^I)_{I \in \mathcal{I}}$. De cette manière, on n'utilise qu'une seule méthode que les Éléments Finis soient conformes ($\rho = 0$) ou non ($\rho \neq 0$), méthode dont la stabilité est prouvée [169].

$$\forall 1 \leq i, j \leq n \quad \mathbb{K}_K(i, j) = \int_K D \nabla \Phi_K^i \cdot \nabla \Phi_K^j \quad (3.37)$$

Matrice de raideur \mathbb{K} . On calcule, à l'échelle fine, les versions locales \mathbb{K}_K de la matrice de raideur.

Pour tout macroélément $K \in T_H(\Omega)$, les fonctions $(\Phi_K^i)_{1 \leq i \leq n}$ sont combinaisons linéaires des $(\Psi_K^i)_{1 \leq i \leq n}$, les solutions des problèmes de cellules (3.6). Sur K , elles vérifient donc :

$$-\nabla \cdot (D\nabla \Phi_K^i) = 0.$$

En utilisant la formule de Green sur (3.37), et en supposant D symétrique, il vient :

$$\begin{aligned} \forall 1 \leq i, j \leq n \quad \mathbb{K}_K(i, j) &= \frac{1}{2} \left(\int_{\partial K} \Phi_K^i (D\nabla \Phi_K^j \cdot \mathbf{n}) + \int_{\partial K} \Phi_K^j (D\nabla \Phi_K^i \cdot \mathbf{n}) \right) \\ &\approx \frac{1}{2} \sum_{f \in \partial K} \left(\Phi_K^i(f) \int_f (D\nabla \Phi_K^j \cdot \mathbf{n}) + \Phi_K^j(f) \int_f (D\nabla \Phi_K^i \cdot \mathbf{n}) \right) \end{aligned} \quad (3.38)$$

où \mathbf{n} est le vecteur normal sortant de ∂K . $\Phi_K^i(f)$ est une valeur interpolée de Φ_K^i en l'arête f d'un microélément de K . Ces interpolations dépendent de la méthode Volumes Finis utilisée pour résoudre les problèmes de cellules. Elle ont été définies à la section §3.2 par les équations (3.16) pour la méthode *VF9* et (3.24) pour la méthode *VDiam*. De la même façon, les flux des $(\Phi_K^i)_{1 \leq i \leq n}$ sur les faces f sont calculés grâce à l'approximation des flux réalisée par les méthodes des Volumes Finis, voir l'équation (3.15) pour la méthode *VF9* et l'équation (3.22) pour la méthode *VDiam*.

Matrice de masse \mathbb{M} . \mathbb{M}_K est construit à partir des valeurs, à l'échelle fine, des fonctions $(\Phi_K^i)_{1 \leq i \leq n}$. On a :

$$\begin{aligned} \forall 1 \leq i, j \leq n \quad \mathbb{M}_K(i, j) &= \int_K \Phi_K^i \Phi_K^j \\ &\approx \sum_{k \in K} |k| \Phi_K^i(k) \Phi_K^j(k) \end{aligned} \quad (3.39)$$

Matrice de masse de bord \mathbb{M}_b . Le calcul de \mathbb{M}_b se décompose très simplement en un ensemble de calculs locaux sur les faces $F \in T_H(\Gamma_N)$. Compte tenu des supports des fonctions $(\Phi^I)_{I \in \mathcal{I}}$, on a :

$$\int_F \Phi^I \Phi^J = \begin{cases} 0 & \text{si } I \notin F \text{ ou } J \notin F \\ \int_F \Phi_K^{\chi(K,I)} \Phi_K^{\chi(K,J)} & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.40)$$

où K est l'unique macro-élément vérifiant $F \in \partial K$, et $\chi(K, I) = j$ si le noeud I coïncide avec le sommet S_j de K . Cette nouvelle intégrale est alors approximée, au niveau fin, de la manière suivante :

$$\int_F \Phi_K^i \Phi_K^j \approx \sum_{f \in F} |f| \Phi_K^i(f) \Phi_K^j(f). \quad (3.41)$$

3.3.1.4 Construction du second membre : \mathcal{L}_D et \mathcal{S}_D .

On impose maintenant les conditions aux limites de Dirichlet au problème discrétisé. Pour cela, on élimine du problème linéaire, d'une certaine façon, les noeuds \mathcal{S}_D de $\Gamma_{D,H}$. On s'affranchit ainsi du besoin de calculer un relèvement \tilde{g}_D de g_D sur le domaine Ω .

Ce traitement calcule également $\mathcal{L}_D(\mathbb{K})$ à partir de \mathbb{K} , rendant le problème linéaire bien posé. En effet, la matrice \mathbb{K} élaborée directement à partir des matrices locales \mathbb{K}_k n'est pas inversible.

On pose $T = \mathbb{M}F + \mathbb{M}_b G_N$. La construction de $\mathcal{L}_D(\mathbb{K})$ et $\mathcal{S}_D(T)$ suit alors l'Algorithme 3.2, extrait de [50] :

Algorithme 3.2 Application des conditions aux limites de Dirichlet.

- 1: $\mathcal{L}_D(\mathbb{K}) \leftarrow \mathbb{K}$.
 - 2: $\mathcal{S}_D(T) \leftarrow T - \mathbb{K}G_D$.
 - 3: **Pour tout** $I \in \mathcal{S}_D$ **faire**
 - 4: $\mathcal{S}_D(T)(I) \leftarrow \mathbb{K}(I, I)G_D(I)$
 - 5: **Pour tout** $I \in \mathcal{S} \setminus \{I\}$ **faire**
 - 6: $\mathcal{L}_D(\mathbb{K})(I, J) \leftarrow 0$
 - 7: $\mathcal{L}_D(\mathbb{K})(J, I) \leftarrow 0$
 - 8: **Fin Pour**
 - 9: **Fin Pour**
 - 10: **Renvoi** $\mathcal{L}_D(\mathbb{K})$ et $\mathcal{S}_D(T)$.
-

3.3.2 Méthode discontinue de Galerkin.

3.3.2.1 Choix de la méthode.

La première méthode discontinue de Galerkin a été introduite par *Reed et Hill* [158] dans le cadre des équations hyperboliques. Durant la même période, des méthodes de Galerkin, utilisant des Éléments Finis discontinus, ont été développées dans le cadre des équations paraboliques et elliptiques, par exemple par *Babuška et Zlámal* [31]. Les méthodes de Galerkin discontinues ont depuis été utilisées sur un grand nombre d'équations différentielles. Pour un état de l'art sur ce sujet, on pourra se référer aux travaux de *Cockburn* [74] ou à ceux de *Ern et Guermond* [94].

En 2002, *Arnold* et al. [30] ont réalisé une analyse unifiée des méthodes discontinues de Galerkin pour les problèmes elliptiques, reprenant les méthodes de *Babuška et Zlámal* [31], *Arnold* (méthode *Interior Penalty* ou IP) [29, 82], *Bassi et Rebay* [37], *Bassi* et al. [38], *Cockburn et Shu* [75] (méthode *Local Discontinuous*

Galerkin ou LDG) , *Baumann et Oden* [39], *Rivière et al.* [160] (méthode *Non Symmetric Interior Penalty Galerkin* ou NIPG) et *Brezzi et al.* [56, 57]. Ce travail a ensuite été complété par *Castillo* [64] qui a évalué les performances numériques de ces méthodes en termes de stabilité, taux de convergence, de précision et de coût stockage.

On s'est concentrés ici sur les méthodes symétriques, comme IP et LDG, qui apparaissent, dans cette étude, plus stables. Leur taux de convergence, notamment, est peu volatile aux fluctuations du terme de pénalisation. À choisir entre les méthodes LDG et IP, c'est cette dernière qui l'a emporté, pour plusieurs raisons.

Tout d'abord, le seul avantage de la méthode LDG vis-à-vis de la méthode IP semble être sa plus grande stabilité. En effet, le terme de pénalisation LDG ne dépend ni du maillage grossier ni de l'ordre des polynômes utilisés. Le schéma grossier étant particulièrement simple (éléments quadrangulaires réguliers, polynômes d'ordre 1), il est peu probable que cette stabilité soit réellement utile.

De plus, la méthode IP ne nécessite qu'un *stencil* peu étendu, chaque macroélément n'interagissant qu'avec ses voisins directs. La méthode LDG, au contraire, à un stencil bien plus grand, puisque chaque macroélément interagit avec ses voisins et les voisins de ceux-ci. Le calcul des termes matriciels est l'étape la plus complexe à mettre en œuvre dans les méthodes multi-échelles. il est donc intéressant de les limiter autant que possible.

3.3.2.2 Problème discret.

On considère les fonctions $(\Phi_K^i)_{1 \leq i \leq n}$ définies par (3.25) sur chaque macroélément $K \in T_H(\Omega)$. On les renumérote par macroélément et sommet i croissant, en l'ensemble de fonctions $(\Phi^I)_{I \in \mathcal{I}}$. On appelle V_H l'espace vectoriel engendré par les fonctions $(\Phi^I)_{I \in \mathcal{I}}$, qui est donc de dimension $2^d \times \text{Card}(T_H(\Omega))$. La Figure 3.5 présente un exemple de fonction Φ^I . Dans tout ce qui suit, soit $I \in \mathcal{I}$, on note $K(I)$ et $s(I)$, le macroélément et le sommet tel que :

$$\Phi^I = \Phi_{K(I)}^{s(I)} \quad (3.42)$$

On rappelle que si $T_H(\Omega)$ est la discrétisation du milieu Ω , on note $T_H(\Gamma_D)$ et $T_H(\Gamma_N)$ les discrétisations respectives de Γ_D et Γ_N . On note Γ_H^0 l'ensemble des faces intérieures à la discrétisation, c'est-à-dire commune à deux éléments de $T_H(\Omega)$.

Pour tout $v_H \in V_H$, en utilisant la formule de Green sur chaque macroélément K de $T_H(\Omega)$, on peut écrire (3.1) sous la forme intégrale suivante :

$$\sum_{K \in T_H(\Omega)} \left(\int_K D\nabla C \cdot \nabla v_H - \sum_{F \in \partial K} \int_F D\nabla C \cdot v_H \mathbf{n}_{K,F} \right) = \sum_{K \in T_H(\Omega)} \int_K f v_H \quad (3.43)$$

où $\mathbf{n}_{K,F}$ est le vecteur normal à la face F sortant de K .

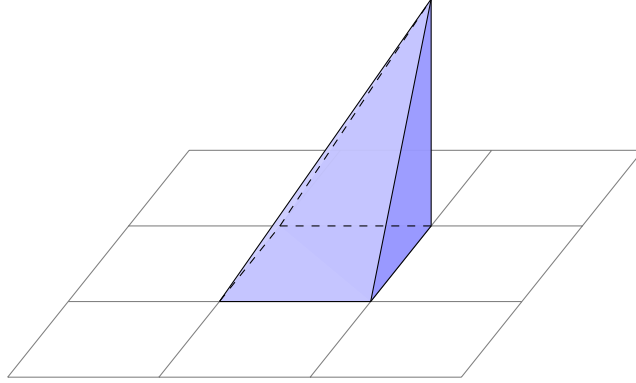


FIGURE 3.5 – Méthode Discontinue de Galerkin : un élément Φ^I de la base de V_H a pour support un unique macroélément $K \in T_H(\Omega)$.

Définition 3.5 Soit $F \in \Gamma_H^0$ l'arête commune aux deux éléments K_1 et K_2 de $T_H(\Omega)$. Soit ζ une fonction continue par éléments, dont on note ζ_1 et ζ_2 la trace sur F suivant les éléments K_1 et K_2 . On définit le saut $[[\zeta]]$ et la moyenne $\{\zeta\}$ d'une quantité ζ à travers F par :

$$[[\zeta]] = \zeta_1 \mathbf{n}_{K_1, F} + \zeta_2 \mathbf{n}_{K_2, F} \quad \{\zeta\} = \frac{1}{2}(\zeta_1 + \zeta_2).$$

Il est à noter que $[[\zeta]]$ est un vecteur si ζ est une valeur scalaire et vice-versa. On étend ces définitions au cas des faces $F \in K$ de $T_H(\Gamma_D)$ en posant :

$$[[\zeta]] = \zeta \mathbf{n}_{K, F} \quad \{\zeta\} = \zeta.$$

En tenant compte de la condition limite de Neumann, on peut alors réécrire (3.43) sous la forme :

$$\begin{aligned} \sum_{K \in T_H(\Omega)} \int_K D\nabla C \cdot \nabla v_H - \sum_{F \in \Gamma_H^0 \cup T_H(\Gamma_D)} \int_F \{D\nabla C\} \cdot [[v_H]] \\ = \sum_{K \in T_H(\Omega)} \int_K f v_H + \sum_{F \in T_H(\Gamma_N)} \int_F g_N v_H. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Pour rendre symétrique cette équation, on soustrait un terme $\int_F \{D\nabla v_H\} \cdot [[C]]$, qui est nul sur toutes les faces de Γ_H^0 , puisque C est continue. En tenant compte de la condition limite de Dirichlet, on a donc :

$$\begin{aligned}
& \sum_{K \in \mathcal{T}_H(\Omega)} \int_K D\nabla C \cdot \nabla v_H - \sum_{F \in \Gamma_H^0 \cup \mathcal{T}_H(\Gamma_D)} \int_F (\{D\nabla C\} \cdot \llbracket v_H \rrbracket + \{D\nabla v_H\} \cdot \llbracket C \rrbracket) \\
&= \sum_{K \in \mathcal{T}_H(\Omega)} \int_K f v_H + \sum_{F \in \mathcal{T}_H(\Gamma_N)} \int_F g_N v_H \\
&\quad - \sum_{F \in \mathcal{T}_H(\Gamma_D)} \int_F g_D (D\nabla v_H) \cdot \mathbf{n}_F.
\end{aligned}$$

Enfin, on ajoute un terme de pénalisation sur chaque face F qui impose faiblement la continuité à notre solution approchée C_H . De la forme $\int_F \mu_F \llbracket C \rrbracket \cdot \llbracket v_H \rrbracket$, il est, comme le terme de symétrie, nul sur toutes les faces de Γ_H^0 car C est continue. On pose $\mu_F = \mu h_F^{-1}$, où $\mu > 0$ est un terme de pénalisation indépendant de la taille du maillage et h_F le diamètre de la face F , et on a alors :

$$\begin{aligned}
& \sum_{K \in \mathcal{T}_H(\Omega)} \int_K D\nabla C \cdot \nabla v_H - \sum_{F \in \Gamma_H^0 \cup \mathcal{T}_H(\Gamma_D)} \int_F (\{D\nabla C\} \cdot \llbracket v_H \rrbracket + \{D\nabla v_H\} \cdot \llbracket C \rrbracket) \\
&+ \sum_{F \in \Gamma_H^0 \cup \mathcal{T}_H(\Gamma_D)} \int_F \mu_F \llbracket C \rrbracket \cdot \llbracket v_H \rrbracket \\
&= \sum_{K \in \mathcal{T}_H(\Omega)} \int_K f v_H + \sum_{F \in \mathcal{T}_H(\Gamma_N)} \int_F g_N v_H \\
&- \sum_{F \in \mathcal{T}_H(\Gamma_D)} \int_F g_D (D\nabla v_H) \cdot \mathbf{n}_F + \sum_{F \in \mathcal{T}_H(\Gamma_D)} \int_F \mu_F \llbracket g_D \rrbracket \cdot \llbracket v_H \rrbracket.
\end{aligned}$$

Finalement, le problème grossier (3.2) est défini par les fonctions B_H et a_H suivantes :

$$\begin{aligned}
\forall (u_H, v_H) \in V_H^2 \quad B_H(u_H, v_H) &= \sum_{K \in \mathcal{T}_H(\Omega)} \int_K D\nabla u_H \cdot \nabla v_H \\
&- \sum_{F \in \Gamma_H^0 \cup \mathcal{T}_H(\Gamma_D)} \int_F (\{D\nabla u_H\} \cdot \llbracket v_H \rrbracket + \{D\nabla v_H\} \cdot \llbracket u_H \rrbracket) \\
&+ \sum_{F \in \Gamma_H^0 \cup \mathcal{T}_H(\Gamma_D)} \int_F \mu_F \llbracket u_H \rrbracket \cdot \llbracket v_H \rrbracket \\
\forall v_H \in V_H \quad a_H(v_H) &= \sum_{K \in \mathcal{T}_H(\Omega)} \int_K f v_H + \sum_{F \in \mathcal{T}_H(\Gamma_N)} \int_F g_N v_H \\
&- \sum_{F \in \mathcal{T}_H(\Gamma_D)} \int_F g_D (D\nabla v_H) \cdot \mathbf{n}_F \\
&+ \sum_{F \in \mathcal{T}_H(\Gamma_D)} \int_F \mu_F \llbracket g_D \rrbracket \cdot \llbracket v_H \rrbracket. \tag{3.45}
\end{aligned}$$

3.3.2.3 Forme matricielle.

Comme pour la méthode des Éléments Finis, on suppose les termes source, de Neumann et de Dirichlet suffisamment réguliers, et on les assimile alors à leur projection sur V_H . Les formules de projection (3.30), (3.31) et (3.32) sont donc valides.

Résoudre le problème discrétisé (3.2) revient alors à résoudre le problème matriciel suivant :

$$(\mathbb{K} - \mathbb{T} + \mathbb{Y})C_H = \mathbb{M}F + \mathbb{M}_b G_N - \mathbb{T}_b G_D + \mathbb{Y}_b G_D \quad (3.46)$$

où les matrices de raideur \mathbb{K} , de masse \mathbb{M} et de masse de bord \mathbb{M}_b ont été précédemment définies par les formules (3.34), (3.35) et (3.36). Les matrices de saut \mathbb{T} , de pénalisation \mathbb{Y} , de saut Dirichlet \mathbb{T}_b et de pénalisation Dirichlet \mathbb{Y}_b sont quant à elles définies par :

$$\forall (I, J) \in \mathcal{I}^2 \quad \mathbb{T}(I, J) = \sum_{F \in \Gamma_H^0 \cup T_H(\Gamma_D)} \int_F (\{D\nabla\Phi^I\} \cdot \llbracket \Phi^J \rrbracket + \{D\nabla\Phi^J\} \cdot \llbracket \Phi^I \rrbracket), \quad (3.47)$$

$$\forall (I, J) \in \mathcal{I}^2 \quad \mathbb{Y}(I, J) = \sum_{F \in \Gamma_H^0 \cup T_H(\Gamma_D)} \int_F \mu_F \llbracket \Phi^I \rrbracket \cdot \llbracket \Phi^J \rrbracket, \quad (3.48)$$

$$\forall I \in \mathcal{I}, \forall J \in \mathcal{I}_D \quad \mathbb{T}_b(I, J) = \sum_{F \in T_H(\Gamma_D)} \int_F (D\nabla\Phi^I \cdot \mathbf{n}_F) \Phi^J, \quad (3.49)$$

$$\forall I \in \mathcal{I}, \forall J \in \mathcal{I}_D \quad \mathbb{Y}_b(I, J) = \sum_{F \in T_H(\Gamma_D)} \int_F \mu_F \Phi^I \Phi^J. \quad (3.50)$$

Les matrices \mathbb{K} , \mathbb{M} et \mathbb{M}_b sont assemblées à partir de leurs versions locales, que l'on a calculées sur chaque $K \in T_H(\Omega)$. L'assemblage est légèrement différent du cas des Éléments Finis ; la numérotation des noeuds n'étant pas la même ; mais respecte le même principe. On a :

$$\forall (I, J) \in \mathcal{I}^2 \quad \mathbb{K}(I, J) = \delta_{K(I), K(J)} \int_{K(I)} D\nabla\Phi_{K(I)}^{s(I)} \cdot \nabla\Phi_{K(J)}^{s(J)}. \quad (3.51)$$

Une formule similaire existe pour \mathbb{M} et \mathbb{M}_b .

Les autres matrices intervenant dans le problème matriciel (3.46) nécessitent de calculer des termes de saut et de moyenne à travers les arêtes des macroéléments. Compte tenu des supports des fonctions $(\Phi^I)_{I \in \mathcal{I}}$, bon nombre des termes de saut et des moyenne sont nuls. Soit F une face de $\Gamma_H^0 \cup T_H(\Gamma_D)$, pour tout $(I, J) \in \mathcal{I}^2$, on pose :

$$\varepsilon(I, J, F) = \begin{cases} 1 & \text{si } K(I) = K(J), \\ -1 & \text{si } \partial K(I) \cap \partial K(J) = F, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

On a alors :

$$\forall (I, J) \in \mathcal{I}^2 \quad \int_F \mu_F \llbracket \Phi^I \rrbracket \cdot \llbracket \Phi^J \rrbracket = \varepsilon(I, J, F) \int_F \mu_F \Phi_{K(I)}^{s(I)} \Phi_{K(J)}^{s(J)},$$

les autres termes des matrices de saut et de pénalité se réécrivant de façon identique.

3.3.2.4 Calcul des termes matriciels.

Soit F une face de $\Gamma_H^0 \cup T_H(\Gamma_D)$, on suppose disposer d'une discrétisation fine $T_h(F)$ de F sur laquelle des valeurs de Φ^I et de $D\nabla\Phi^I$ ont été interpolées des deux côtés K_1 et K_2 . En pratique, cela suppose que les maillages fins $T_h(K_1)$ de K_1 et $T_h(K_2)$ de K_2 coïncident sur F . On approxime alors les termes de saut et de pénalisation de la manière suivante :

$$\int_F \mu_F \llbracket \Phi^I \rrbracket \cdot \llbracket \Phi^J \rrbracket \approx \varepsilon(I, J, F) \mu_F \sum_{f \in T_h(F)} |f| \Phi_{K(I)}^{s(I)}(f) \Phi_{K(J)}^{s(J)}(f)$$

Remarque 3.3 *Le calcul des termes des matrices de sauts et de pénalisation est représentatif des avantages et inconvénients de la méthode discontinue de Galerkin. En effet c'est l'existence de ces termes qui permet de contrôler plus efficacement les discontinuités créées par la méthode de sur-échantillonnage. En contrepartie, ils demandent d'imposer des contraintes fortes sur les maillages des macro-éléments, afin que ceux-ci coïncident sur les faces de calculs. Les moyens techniques mis en œuvre pour obtenir un tel résultat sont décrits à la section §6.3.*

Remarque 3.4 *Compte tenu de la forme des matrices de saut et de pénalisation, il n'est pas possible de calculer les termes macroélément par macroélément, puis d'assembler les résultats, comme on le fait pour la matrice de rigidité. On peut cependant utiliser un procédé similaire qui fonctionne face par face : les calculs de saut sont en effet techniquement indépendants et on pourrait ainsi distribuer le travail sur plusieurs processeurs.*

Cependant, pour des raisons pratiques, cette idée n'a pas été implémentée car elle est difficilement applicable au contexte de simulation MPCube. En effet, de tels calculs nécessitent de lancer un nouveau jeu de simulations, non plus macroélément par macroélément, mais face par face. Bon nombre de valeurs, calculées au

cours des premières simulations mais non stockées, seraient perdues d'une simulation à l'autre, demandant ainsi au programme d'effectuer un travail redondant. Il nous a donc paru préférable de calculer, macroélément par macroélément, les valeurs de chaque fonction élémentaire sur les bords de chaque macroélément, puis de stocker ces valeurs. Le calcul des matrices de saut et de pénalisation se fait donc séquentiellement lors de la résolution du problème grossier.

3.4 Reconstruction de la solution et du flux au niveau fin.

La dernière étape de l'algorithme calcule, au niveau fin, la solution $C_{H,h}$, en pondérant les fonctions $(\Phi^I)_{I \in \mathcal{J}}$ par les valeurs de la solution grossière.

$$C_{H,h} = \sum_{I \in \mathcal{J}} C_H(I) \Phi^I . \quad (3.52)$$

Par principe, on cherche à résoudre des problèmes de *très grandes tailles* pour lesquels une résolution classique est techniquement irréalisable, soit parce que le système prend trop de temps à résoudre, soit parce que la place mémoire exigée pour la résolution et le stockage de la solution est trop importante. Il est donc généralement impossible de stocker et, à plus fortes raisons, de visualiser la concentration (ou le gradient, la densité de flux $\|D\nabla C\|$) d'un seul tenant. Par contre, il peut être intéressant de reconstruire la solution sur une zone déterminée, par exemple autour d'une singularité. On ne manipule ainsi que des blocs de tailles raisonnables, qui n'excèdent pas les capacités informatiques disponibles.

Pour reconstruire la solution sur une zone, il est nécessaire de fusionner les champs solutions sur des macroéléments adjacents. Cette tâche est plus élégante quand les maillages concernés coïncident le long des frontières des macroéléments mais, à ce stade de la méthode, ce n'est pas une obligation. En effet, deux outils seulement demandent une solution fine : la visualisation et les calculs des taux d'erreur, et tout deux n'utilisent que les volumes des maillages, non les faces. Avoir deux discrétisations disparates des ∂K est donc sans réelle importance.

De plus, ni la méthode des Éléments Finis, ni la méthode de Galerkin Discontinue n'étant conformes, aucune forme de continuité n'est imposée à la solution le long des ∂K , quand bien même les maillages y coïncideraient.

3.5 Estimation du coût de calcul.

On présente maintenant une estimation du coût en temps de calcul des méthodes multi-échelles. On divise le domaine en M macroéléments, et chaque macroélément en N microéléments. Compte tenu du recouvrement, chaque cellule dispose donc d'environ $(1 + 2\rho)^d N$ microéléments. Soit $\mathcal{F}(\mathcal{N})$ une fonction estimant

le coût, en termes de calcul, de la résolution d'un problème linéaire de taille \mathcal{N} , le Tableau 3.1 reprend le coût approché des diverses parties de la méthode.

Étapes	Coût
Division du domaine	$M \times O(N)$
Problèmes de cellules	$M \times \mathcal{F}((1 + 2\rho)^d N)$
Calcul de la base	$M \times O(N)$
Calcul de K , M et M_b	$M \times O(N) + O(M)$
Problème grossier	$\mathcal{F}(M)$
Recalcul à l'échelle fine	$M \times O(N)$
Total	$M \times (\mathcal{F}((1 + 2\rho)^d N) + O(N)) + O(M) + \mathcal{F}(M)$

TABLE 3.1 – Coût calcul des méthodes multi-échelles.

Il s'agit ici d'une approximation des coûts de la méthode, et certaines étapes ont été ignorées. Par exemple, obtenir la base $(\Phi^I)_{I \in \mathcal{I}}$ nécessite la résolution de M problèmes linéaires à 2^d inconnues ; résolution dont le coût est négligeable devant celui de la sommation des $(\Psi_K^s)_{s \in \mathcal{I}}$ qui en résulte.

Le coût total d'une méthode multi-échelle peut-être donc être estimée par :

$$\mathcal{C}^{tot} = \underbrace{M \times \mathcal{F}((1 + 2\rho)^d N)}_{\text{Problèmes de cellule}} + \underbrace{\mathcal{F}(M)}_{\text{Problème grossier}} + M \times O(N), \quad (3.53)$$

où on utilise la notation de Landau $O(N)$ pour désigner une fonction d'ordre N à l'infini.

Ce résultat est à comparer à celui d'une résolution directe par la méthode des Éléments Finis ou des Volumes Finis, qui est de $\mathcal{F}(MN)$. Généralement, nous avons $\mathcal{F}(MN) = O(M^3 N^3)$ si on utilise une méthode de résolution directe sur une matrice pleine, ou $\mathcal{F}(MN) = O(M^2 N^2)$ pour une méthode itérative sur une matrice creuse. Les méthodes directes sont donc beaucoup plus coûteuse que la méthode multi-échelle.

À ce coût en temp calcul s'ajoute le coût en termes de place mémoire qui devient rédibitoire pour les grands et très grands problèmes. La méthode multi-échelle est dans ces cas beaucoup plus économique, car les problèmes résolus sont petits. Bien entendu, ce gain de calcul et de mémoire a un prix et les résultat obtenus par des méthodes multi-échelles sont, par principe, moins précis qu'une résolution directe.

D'autre part, il est bon de souligner le second avantage des méthodes multi-échelles sur une résolution directe : leur parallélisme. La plupart des étapes de ces méthodes peuvent en effet être effectuées en parallèle (les termes de la forme

$M \times \dots$). Seules les étapes d'assemblages des matrices globales et la résolution du problème grossier ne peuvent être effectuées de front.

En supposant qu'on dispose de suffisamment de processeurs, de l'ordre de M , on peut donc espérer un coût en temps de calcul très bas :

$$\mathcal{C}^{\text{tot}} = \mathcal{F}((1+2\rho)^d N) + \mathcal{F}(M) + O(N). \quad (3.54)$$

3.6 Modélisation des matériaux cimentaires.

3.6.1 Description générale.

Définition 3.6 Dans cette thèse, sont dits cimentaires les deux ensembles de matériaux suivants :

- les pâtes de ciment, c'est-à-dire une poudre de ciment hydraté puis séché.
- les bétons et les mortiers.

On fabrique un béton en mélangeant des granulats, généralement du sable et des gravillons, avec de la poudre de ciment et de l'eau. Ce mélange, une fois homogénéisé et séché, forme un tout solide, la poudre de ciment servant de liant. On parle de *mortier* quand les granulats utilisés sont très fins, se réduisant généralement à du sable. Ces trois processus, hydratation, brassage et séchage, n'affectent pas chimiquement les granulats en tant que tels [150]. Puisque chaque granulat conserve ses caractéristiques individuelles (forme, taille, diffusivité, résistance), il est alors possible de déterminer précisément celles-ci par des mesures industrielles indépendantes [89].

On ne peut utiliser une telle méthode pour la pâte de ciment, qui est affectée par la présence des granulats. En effet, lors de la fabrication du béton, on observe que la pâte de ciment adopte une structure particulière au voisinage des granulats. Ces structures jouent un rôle fondamental dans le comportement macroscopique du béton [166, 176]. On peut par exemple citer, dans les mortiers, la formation d'une *auréole de transition*, de très haute diffusivité, autour des grains de sables [52]. Alors que les grains de sables sont nécessairement séparés les uns des autres, les auréoles de transition correspondantes peuvent fusionner les unes les autres. Au delà d'une certaine concentration de sable, de véritables chemins de haute diffusivité apparaissent à travers le milieu, un phénomène appelé *percolation* [168] et illustré à la Figure 3.6.

Lors de l'étude d'un béton, l'échelle de travail choisie est généralement de l'ordre du centimètre, voire du millimètre. À cette échelle, on considère que la pâte de ciment est homogène. Il est alors possible de représenter le béton comme un ensemble d'*inclusions*, modélisant les gravillons et les grains de sable, enchâssés dans un milieu homogène, la pâte de ciment. Les structures particulières de la pâte de ciment sont alors considérées comme des agglomérats, et non plus comme de la pâte. Dans le cas du mortier décrit plus haut, les inclusions représentant le

sable possèdent alors un noyau (modélisant le grain de sable) entouré d'une fine couche (l'auréole de transition).

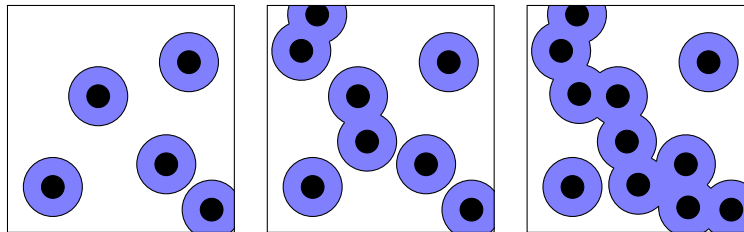


FIGURE 3.6 – Illustration du phénomène de percolation dans le béton. La pâte de ciment (en blanc) forme une auréole de transition (en bleu) autour des grains de sable (en noir). Quand le nombre de grain de sable augmente, ces auréoles fusionnent (au milieu), jusqu'à former des voies très diffusives dans le béton (à droite).

La composition de la poudre de ciment est bien connue : il s'agit d'un mélange de silice, d'alumine, de carbonate de chaux que l'on a broyé et cuit à environ 1450°C. Les proportions de ce mélange, ainsi que l'ajout de composants en très faible quantité, varient en fonction du ciment que l'on souhaite obtenir [148].

Pour autant, l'étude précise de la pâte de ciment en elle-même est plus ardue que celle du béton dans son ensemble. En effet, le processus permettant de passer de la poudre à la pâte de ciment (hydratation, brassage puis séchage) est le siège de nombreuses transformations chimiques [115, 150] : hydratation et précipitation des espèces chimiques, migration et réarrangement des composés en de nouvelles structures... Le résultat final, c'est-à-dire la pâte de ciment, n'a alors plus grand chose de comparable avec la poudre de ciment originelle.

Il est donc nécessaire d'analyser chaque structure de la pâte de ciment pour en déterminer les caractéristiques physico-chimiques, une analyse compliquée par l'échelle des tailles caractéristiques mises en jeu. En effet, si on se place à l'échelle microstructurale de la pâte cimentaire, la taille des microstructures minérales étudiées varie entre 1 et 30 μm environ. Il est relativement aisé de différencier visuellement ces micro-structures, par exemple par microscopie optique [83] ou microscopie électronique à balayage [165]. Identifier la composition et estimer les caractéristiques mécaniques et diffusives de chaque phase est par contre un travail de longue haleine. Généralement, une fois identifiée la composition d'une structure par spectrométrie, on recherche un minéral naturel composé de cette unique phase. On supposera alors que les caractéristiques mécaniques de cette phase dans la pâte de béton sont celles du composé «pure». On se reportera aux travaux de *Constantinides et Ulm* [78] et *Haecker et al.* [110] et aux références associées pour de plus amples détails à ce sujet.

Quatre composés principaux sont identifiables dans la pâte de ciment durcie [159]. Les *résidus anhydres* n'ont pas été chimiquement liés lors de l'hydratation

du ciment. Même s'ils sont agglomérés au sein de la pâte, ils ne participent pas au processus de diffusion. La *portlandite* est la seule phase qui se présente sous une forme relativement pure. Elle s'organise en plaquettes hexagonales. L'*ettringite* et ses dérivées, qui forment des structures en aiguilles. Enfin, les *silicates de calcium hydratés* ou $C - S - H$ forment généralement un gel aforme au sein de la pâte. Au voisinage d'autres composés, notamment les résidus anhydres, ils peuvent cependant s'organiser en couches de différentes densités (*Low Density C - S - H* ou *High Density C - S - H*). L'espace de la pâte de ciment qui n'est pas occupé par ces structures est généralement appelé *porosité capillaire* [102].

On voit donc que ces matériaux, bien qu'agissant à des échelles différentes, possèdent en fait une structure semblable. Pour les modéliser, on place, au sein d'un milieu homogène que l'on nomme la *matrice*, une série d'*inclusions* représentant les structures importantes. Le nombre, la forme et la diffusivité associés à ces inclusions dépendent bien entendu de la phase représentée.

Dans le cas du béton, la matrice représente la pâte de ciment, tandis que les gravillons, les grains de sables et les auréoles de transitions sont représentés par des inclusions.

Dans le cas de la pâte de ciment, le $C - S - H$ compose la matrice et les anhydres, la portlandite et l'*ettringite* sont des inclusions. Si on veut différencier les deux types de $C - S - H$, la matrice représente la porosité capillaire, et les anhydres, la portlandite, l'*ettringite*, le *LD C - S - H* et le *HD C - S - H* sont des inclusions. Le Tableau 3.2 résume ces informations et cite quelques publications ayant utilisées une telle modélisation.

	Milieu homogène	Inclusions	Références
Béton	Pâte de ciment	Gravillons Sable Auréoles de transition	[52, 166, 176]
Pâte de ciment I	$C - S - H$	Anhydres Portlandite Ettringite	[36, 70]
Pâte de ciment II	Porosité capillaire	Anhydres Portlandite Ettringite <i>LD C - S - H</i> <i>HD C - S - H</i>	[21, 43, 45]

TABLE 3.2 – Tableau récapitulatif de la modélisation des matériaux cimentaires sous la forme d'inclusions enchâssées dans un milieu homogène. On référence à droite quelques publications ayant utilisées ces modélisations.

3.6.2 Dégradation des matériaux cimentaires.

La dégradation des matériaux cimentaires par une solution agressive, généralement de l'eau, conduit à la mise en place de deux phénomènes physico-chimique [159]. Les gradients de concentration entre la solution interstitielle, c'est-à-dire initialement présente dans le béton, et la solution agressive initie tout d'abord un transport de matière par diffusion. Les variations de concentrations résultant de la diffusion favorisent ensuite des réactions chimiques de dissolution-précipitation.

Ces phénomènes physico-chimiques modifient les propriétés des différentes phases des matériaux cimentaires. Certaines inclusions disparaissent tout simplement du milieu, d'autres voient leurs propriétés évoluer.

Du point de vue de la simulation numérique, cette dégradation se traduit soit par un changement du champ de diffusivité, soit par une extension du domaine de travail. Le cas de l'évolution du champ de diffusivité est simple à gérer : il suffit d'effectuer une nouvelle simulation avec les valeurs adéquates. L'extension du domaine de travail demande un effort supplémentaire, au sens où il affecte la discrétisation des milieux correspondants, et non plus un simple paramètre numérique de la simulation.

Si on considère par exemple une composante non-diffusive du milieu, modélisant une espèce *anhydre*. Au sein de cette composante, il n'y a pas lieu de résoudre une équation de diffusion. Le domaine de travail tient donc compte de cette zone, et impose des frontières non-diffusives aux frontières des inclusions appartenant à cette phase. Cependant, une fois dissoute la composante, la zone correspondante est, schématiquement, vide. Elle est alors diffusive et elle joue donc un rôle dans les phénomènes de diffusion. On doit donc l'inclure dans les simulations de diffusion et d'homogénéisation.

Dans le cadre de ces travaux de thèse, on souscrit à l'hypothèse de l'équilibre chimique local, communément admise dans le cas de la dégradation des matériaux cimentaires, qui stipule que les cinétiques chimiques réactionnelles sont beaucoup plus rapides que le transport diffusif. L'étude du phénomène de dégradation prend donc ici la forme de plusieurs simulations de *diffusion stationnaire* sur des matériaux cimentaires à différents stades de dégradation. On considère de plus que les phénomènes de dégradation agissent globalement sur le milieu : il n'y a pas de *front de dégradation* [159] et les inclusions sont dégradées par jeux complets.

Au cours d'un processus de dégradation, on travaille donc sur une succession de domaines qu'il faut discrétiser. On suppose ici que cette succession de dégradations est connue à l'avance, par exemple grâce à des observations physiques. Le milieu à un instant donné ne dépend donc pas de simulations effectuées sur le domaine à des instants antérieurs comme c'est le cas entre autres pour les problèmes de *frontières mobiles* [99, 118].

Ce processus de dégradation a été mis en œuvre dans le cadre de la chaîne de calcul *SALOME-MPCube*. On présente ainsi à la section §6.4 les solutions tech-