

# Mise en œuvre dans le cas 3D : simulations.

## Introduction.

Dans les deux précédents chapitres, on a présenté la chaîne de calcul multi-échelle *SALOME-MPCube* (§5) et les méthodes mises en œuvre afin de construire des maillages adaptés aux matériaux cimentaires (§6). On a de plus effectué des tests de l'implémentation des méthodes multi-échelles, qui ont été présentés à la section §5.2.

Ce chapitre présente des simulations effectuées par le biais de la chaîne de calcul *SALOME-MPCube* complète. Il s'agit d'exemples particuliers du problème de diffusion général que l'on rappelle ici :

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (D \nabla C) = f & \text{dans } \Omega, \\ C = g_D & \text{sur } \Gamma_D, \\ D \nabla C \cdot \mathbf{n} = g_N & \text{sur } \Gamma_N, \end{cases} \quad (7.1)$$

où  $(\Gamma_D, \Gamma_N)$  forme une partition de  $\Gamma = \partial\Omega$  la frontière du domaine de travail  $\Omega$ .  $\mathbf{n}$  désigne le vecteur normal unitaire extérieure au domaine.  $f$ ,  $g_D$  et  $g_N$  sont respectivement le terme source, la condition aux limites de Dirichlet et la condition aux limites de Neumann.

Ce chapitre se décompose en deux parties. On présente en premier lieu des exemples théoriques où la solution  $C$  du problème est connue, à commencer par une série de problèmes en milieu homogène qui permettent de vérifier l'implémentation du couplage entre les parties locale (problèmes de cellules, calcul des matrices locales) et globale (méthodes d'Éléments Finis et de Galerkin discontinue) de la chaîne de calcul (§7.1.1). Un exemple de milieu périodique est étudié à la section suivante §7.1.2. La section §7.1.3 présente la réponse de la chaîne de calcul à un découpage fin du domaine de travail  $\Omega$ , quand le maillage grossier  $T_H(\Omega)$  comporte un grand nombre de macro-éléments.

Dans une seconde partie, on présente des simulations effectuées sur des exemples de matériaux cimentaires, comme un échantillon de mortier (§7.2.1), une pâte cimentaire périodique (§7.2.2) et un échantillon aléatoire de pâte cimentaire (§7.2.3). Ce dernier exemple en particulier est représentatif des simulations que l'on souhaite réaliser sur les matériaux cimentaires : plusieurs dizaines de milliers d'inclusions, des sauts de diffusivité d'un facteur  $1 \times 10^{11}$  et une discrétisation du domaine  $\Omega$  en près de 100 millions de tétraèdres.

## 7.1 Exemples théoriques.

### 7.1.1 Qualification de la chaîne de calcul *SALOME-MPCube*.

Au chapitre §5, l'implémentation de chaque partie de la chaîne de calcul *SALOME-MPCube* a été qualifiée séparément. La partie locale de la chaîne (résolution des problèmes de cellules, calcul des matrices locales) a ainsi été testée par le biais des Exemples 5.1 et 5.2, présentés à la section §5.2.2.5. À la section §5.2.3.2, les Exemples 5.3 à 5.8 valident l'implémentation des méthodes d'Éléments Finis et de Galerkin discontinue en dimension 2 et 3.

On présente maintenant plusieurs exemples du problème de diffusion (7.1) permettant d'assurer que le couplage entre les parties locale et globale de la chaîne de calcul *SALOME-MPCube* a été correctement implémenté.

**Exemple 7.1** On considère dans cet exemple le domaine  $\Omega = ]0, 1[^2$  où l'on pose :

$$D = \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & 4a \end{bmatrix}$$

où  $a$  est un réel strictement positif. On choisit ici  $a = 2$ .

Dans ce cas, les fonctions  $(\Phi_K^i)_{1 \leq i \leq n}$  sont explicitement connues car elles correspondent aux fonctions d'Éléments Finis classiques  $Q_1$ , et ce pour toute valeur de  $\rho$  :

$$\begin{aligned} \Phi_K^1 &= (1-x)(1-y) & \Phi_K^3 &= (1-x)y \\ \Phi_K^2 &= x(1-y) & \Phi_K^4 &= xy \end{aligned}$$

On étudie trois problèmes de diffusion distincts sur le domaine  $\Omega$ , inspirés des Exemples 5.3 à 5.5.

**Exemple 7.1.1** On considère dans cet exemple que :

$$\begin{aligned} f &= 0, \\ \Gamma_D &= \partial\Omega, \\ g_D &= \sin(2q\pi x) \sinh(q\pi y), \end{aligned}$$

où  $q$  est un réel strictement positif. On choisit ici  $q = 3/4$ .

La solution du problème est alors :

$$C = \sin(2q\pi x) \sinh(q\pi y).$$

**Exemple 7.1.2** On note  $\Gamma_{y,m}$  et  $\Gamma_{y,p}$  les faces du domaine  $\Omega$  pour lesquelles on a  $\{y = 0\}$  et  $\{y = 1\}$  respectivement. On considère dans cet exemple que :

$$\begin{aligned} f &= 0, \\ \Gamma_N &= \Gamma_{y,m} \sqcup \Gamma_{y,p}, \\ g_N &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} (\sin(2q\pi x) \sinh(q\pi y)), \\ \Gamma_D &= \partial\Omega \setminus \Gamma_N, \\ g_D &= \sin(2q\pi x) \sinh(q\pi y), \end{aligned}$$

où  $q$  a été défini à l'exemple précédent.

La solution du problème est alors :

$$C = \sin(2q\pi x) \sinh(q\pi y)$$

**Exemple 7.1.3** On considère dans cet exemple que :

$$\begin{aligned} f &= 8aq^2\pi^2 \sin(2q\pi x) \sin(q\pi y), \\ \Gamma_D &= \partial\Omega, \\ g_D &= \sin(2q\pi x) \sin(q\pi y) \end{aligned}$$

La solution du problème est alors :

$$C = \sin(2q\pi x) \sin(q\pi y).$$

On résout ces problèmes par les deux méthodes multi-échelles  $Q_1/VFDiam$  et  $GD/VFDiam$ , en suivant les étapes de la chaîne de calcul *SALOME-MPCube* présentée au chapitre §5.

On discrétise tout d'abord le domaine  $\Omega$  en un maillage  $T_H(\Omega)$  composé de macroéléments carrés de longueur  $H$ . Une fois fixé le taux de sur-échantillonnage  $\rho$ , chaque cellule  $\hat{K}$  est construite puis discrétisée *via SALOME* en un maillage  $T_h(\hat{K})$  de pas  $h = \alpha H$ , avec  $\alpha = 1/20$ .

On traite ensuite chaque cellule  $\hat{K}$  du domaine : résolution des problèmes locaux, détermination de la base locale  $(\Phi_K^i)_{1 \leq i \leq n}$  et enfin calcul des matrices locales. On rappelle que cette étape ne dépend que du milieu  $\Omega$  où l'on travaille, et non des problèmes de diffusion à résoudre. Cette tâche est donc effectuée une seule fois pour les trois exemples.

**Remarque 7.1** Le domaine étant homogène, les résultats (base et matrices locales) sont identiques d'une cellule à l'autre. Il n'est donc pas nécessaire de traiter toutes les cellules  $\hat{K}$ . Il est en effet plus simple et plus économique de travailler sur une unique cellule puis de reporter les résultats sur les autres cellules. Cette astuce de calcul est utilisée à nouveau dans l'Exemple 7.5, décrit à la section §7.2.2.

Une fois les exemples résolus à l'échelle grossière, on dispose de leur solution grossière  $C_H$ . L'erreur normalisée maximale entre valeurs calculées et théoriques aux noeuds  $I \in \mathcal{I}$  a été définie par la formule (5.7) :

$$e_\infty(C_H) = \max_{I \in \mathcal{I}} \frac{|C_H(I) - C(I)|}{1 + |C(I)|} \quad (7.2)$$

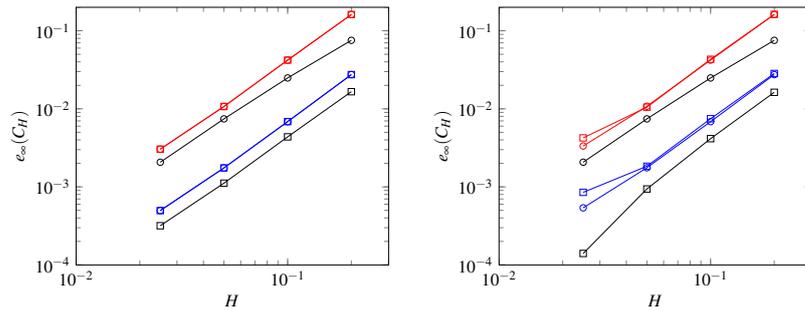


FIGURE 7.1 – Erreur  $e_\infty(C_H)$  en fonction de  $H$  pour les Exemples 7.1.1 ( $\circ$ ), 7.1.2 ( $\ominus$ ) et 7.1.3 ( $\ominus$ ) pour les méthodes d'Éléments Finis ( $\circ$ ) et de Galerkin discontinue ( $\square$ ). Deux cas sont représentés :  $\rho = 0$  (en haut) et  $\rho = 0.5$  (en bas).

La Figure 7.1 présente l'évolution de l'erreur  $e_\infty(C_H)$  en fonction de  $H$  lors de la résolution par la méthode d'Éléments Finis (cercle) et de Galerkin discontinue (carré) des exemples précédents : Exemple 7.1.1 ( $\circ$  et  $\square$ ), Exemple 7.1.2 ( $\ominus$  et  $\square$ ) et Exemple 7.1.3 ( $\ominus$  et  $\square$ ). Deux valeurs du sur-échantillonnage  $\rho$  sont représentées  $\rho = 0$  (en haut) et  $\rho = 0.5$  (en bas).

On retrouve ici des résultats similaires à ceux obtenus sur les exemples de qualification de l'implémentation du problème grossier, présentés à la Figure 5.12. En effet, que ce soit pour la méthode d'Éléments Finis ou celle de Galerkin discontinue, tous les exemples convergent en  $\mathcal{O}(H^2)$  quand  $H$  tend vers 0.

Il est à noter que la méthode de Galerkin discontinue est plus sensible que la méthode d'Éléments Finis au choix du taux de sur-échantillonnage  $\rho$ . Comme on l'a présenté à la section §3.3, le calcul des termes matriciels des méthodes grossières dépend de la valeur de  $\rho$ . Si le sur-échantillonnage est nul, les matrices sont calculées à partir des conditions aux limites des problèmes de cellules, qui sont explicitement connues. Dans le cas contraire, on interpole des valeurs aux faces de la frontière  $\partial K$  du macroélément  $K$  à partir des valeurs de la base locale sur la cellule  $\hat{K}$  correspondante. La méthode de Galerkin discontinue faisant intervenir plusieurs matrices supplémentaires par rapport à la méthode d'Éléments Finis, notamment les matrices de saut  $\mathbb{T}$  et de pénalité  $\mathbb{Y}$ , il est logique que l'influence du sur-échantillonnage soit plus marqué.

Aux vues de ces résultats, on peut considérer que le couplage entre les parties locale et globale de la chaîne de calcul *SALOME-MPCube* est correctement implémenté.

## 7.1.2 Cas d'un milieu périodique.

### 7.1.2.1 Description du milieu.

On étudie maintenant les résultats des méthodes multi-échelles  $Q_1/VFDiam$  et  $GD/VFDiam$  sur un exemple théorique où le milieu  $D$  est périodique et oscillant.

**Exemple 7.2** On considère dans cet exemple le domaine  $\Omega = ]0, 1[^2$  où l'on pose :

$$D = \begin{bmatrix} \cos(2n\pi x) \cos(2n\pi y) + 2 & 0 \\ 0 & \cos(2n\pi x) \cos(2n\pi y) + 2 \end{bmatrix}$$

où  $n$  est un entier strictement positif. On choisit ici  $n = 7$ .

On résout le problème défini par :

$$\begin{aligned} f &= 2n\pi (\sin(2n\pi x) \cos(2n\pi y) - \cos(2n\pi x) \sin(2n\pi y)), \\ \Gamma_D &= \partial\Omega, \\ g_D &= x - y. \end{aligned}$$

La solution du problème est alors :

$$C = x - y.$$

Comme dans la section précédente, on discrétise le domaine  $\Omega$  en un maillage  $T_H(\Omega)$  composé de macroéléments carrés  $K$  de longueur  $H$ . Les cellules  $\hat{K}$  sont ensuite construites puis discrétisées *via SALOME* pour obtenir les maillages  $T_h(\hat{K})$  de pas  $h = \alpha H$ .

On traite ensuite chaque cellule  $\hat{K}$  du domaine : résolution des problèmes locaux, détermination des bases locales  $(\Phi_K^i)_{1 \leq i \leq n}$  et enfin calcul des matrices locales. Cette étape achevée, on résout le problème par les méthodes d'Éléments Finis ou de Galerkin discontinue pour obtenir la solution grossière  $C_H$ . Le terme de pénalité  $\mu$  de la méthode de Galerkin discontinue vaut ici 100.

À partir  $C_H$  et de la base  $(\Phi^J)_{J \in \mathcal{J}}$ , on reconstruit ensuite la solution fine  $C_{H,h}$ .

### 7.1.2.2 Base locale.

La Figure 7.2 présente la différence entre la fonction de base locale  $\Phi_K^0$  issue de la cellule  $\hat{K} = (0, 0)$  et la fonction  $(1 - x/H)(1 - y/H)$ , le polynôme de Lagrange correspondant à la méthode d'Éléments Finis  $Q_1$  classique. On a choisit ici  $H = 1/5$  et  $\alpha = 1/20$ . Trois valeurs de sur-échantillonnage sont illustrées :  $\rho = 0$  (en

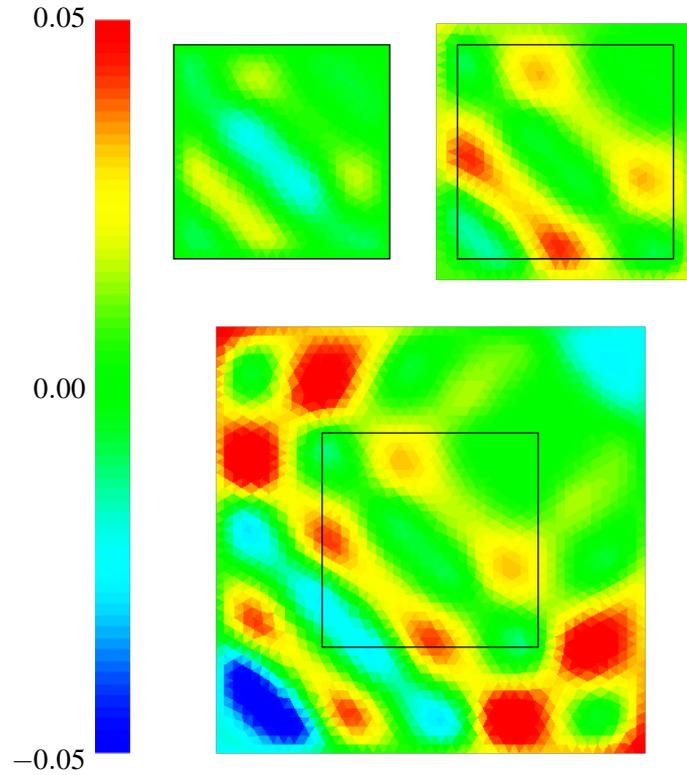


FIGURE 7.2 – Exemple 7.2 : différence entre la fonction de base locale  $\Phi_K^0$  issue de la cellule  $\hat{K} = (0, 0)$  et la fonction de référence  $(1 - x/H)(1 - y/H)$ . Pour  $H = 1/5$ ,  $\alpha = 1/20$ , trois cas sont représentés :  $\rho = 0$  (en haut à gauche),  $\rho = 0.1$  (en haut à droite) et  $\rho = 0.5$  (en bas). On a tracé en noir la frontière  $\partial K$  du macroélément.

haut à gauche),  $\rho = 0.1$  (en haut à droite) et  $\rho = 0.5$  (en bas). Les fonctions sont représentées sur la cellule  $\hat{K}$  entière, le macroélément  $K$  étant délimité d'un trait noir.

L'influence du taux de sur-échantillonnage  $\rho$  est très visible sur cette illustration. Dans le cas où  $\rho$  est nul, la fonction de base  $\Phi_K^0$  ne présente que peu d'écart avec la fonction polynômiale classique. Elle n'est donc pas adaptée au milieu oscillant.

Au contraire, pour  $\rho = 0.1$  et  $\rho = 0.5$ , on distingue nettement les oscillations de la fonction  $\Phi_K^0$ . Comme on l'avait escompté, la technique de sur-échantillonnage remplit donc son rôle, en permettant de s'affranchir des contraintes de linéarités imposées par les conditions aux limites des problèmes de cellule, le phénomène de *couches limites* décrit à la section §3.3.1.1.

### 7.1.2.3 Erreurs à l'échelle fine.

Afin d'estimer l'erreur entre la solution fine  $C_{H,h}$  et la solution théorique  $C$ , on introduit l'erreur  $L^2$  discrète suivante :

$$e_2(C_{H,h}) = \sqrt{\sum_{K \in \mathcal{T}_H(\Omega)} \sum_{k \in \mathcal{T}_h(K)} |k| (C_{H,h}(k) - C(x_k))^2}, \quad (7.3)$$

où  $x_k$  est le barycentre de l'élément  $k$  du maillage fin  $\mathcal{T}_h(K)$ .

Dans tout ce qui suit, on note  $C_{H,h}^{EF}$  et  $C_{H,h}^{GD}$  les solutions fines obtenues respectivement par les méthodes multi-échelles  $Q_1/VFDiam$  et  $GD/VFDiam$ .

La Figure 7.3 présente les erreurs  $e_2(C_{H,h}^{EF})$  (cercle) et  $e_2(C_{H,h}^{GD})$  (carré) en fonction de  $H$ . Chaque figure présente les erreurs pour trois valeurs de  $\alpha$  :  $\alpha = 1/5$  ( $\circ$  et  $\square$ )  $\alpha = 1/10$  ( $\odot$  et  $\square$ ), et  $\alpha = 1/20$  ( $\ominus$  et  $\ominus$ ). Trois valeurs de  $\rho$  sont ici représentées :  $\rho = 0$  (en haut),  $\rho = 0.1$  (au milieu) et  $\rho = 0.5$  (en bas).

La Figure 7.4 présente les erreurs  $e_2(C_{H,h}^{EF})$  (cercle) et  $e_2(C_{H,h}^{GD})$  (carré) en fonction de  $H$  lorsqu'on impose  $\alpha = 1/10$ . Trois valeurs de  $\rho$  sont représentées :  $\rho = 0$  ( $\circ$  et  $\square$ ),  $\rho = 0.1$  ( $\odot$  et  $\square$ ) et  $\rho = 0.5$  ( $\ominus$  et  $\ominus$ )

**Remarque 7.2** *Comme on l'a expliqué à la section §4.2.1, les courbes présentées ici ne sont pas des courbes de convergence des méthodes  $Q_1/VFDiam$  et  $GD/VFDiam$ , mais des courbes d'évolution de l'erreur en fonction d'un paramètre ( $h$ ,  $H$  ou  $\alpha = h/H$ ), les autres étant fixés.*

Il apparaît sur ces courbes que les méthodes  $Q_1/VFDiam$  et  $GD/VFDiam$  ont sensiblement le même comportement. Les deux erreurs  $e_2(C_{H,h}^{EF})$  et  $e_2(C_{H,h}^{GD})$  décroissent globalement en  $\mathcal{O}(H^{\frac{3}{2}})$  quand  $H$  diminue. On peut toutefois signaler que la méthode Galerkin discontinue donne de meilleurs résultats dans le cas d'un découpage très grossier ( $H = 1/5$ ).

Pour les deux méthodes, l'évolution de l'erreur avec  $H$  n'est que peu influencée par les différents choix de  $\alpha$  et de  $\rho$ . Comme on l'a expliqué à la section §3.3.1.1, le rôle du sur-échantillonnage dans les méthodes multi-échelles est d'éviter que les conditions aux limites des problèmes de cellules imposent leur linéarité sur les frontières des macroéléments  $K$ . La solution du problème étudié ici étant linéaire, cette linéarité artificielle ne pose pas problème. La technique de sur-échantillonnage est donc sans effet, puisqu'il n'y a pas de couche limite à corriger.

On présente à la Figure 7.5 une visualisation de l'écart  $|C - C_{H,h}|$  entre la solution théorique  $C$  et la solution fine recalculée  $C_{H,h}$  sur l'ensemble du domaine  $\Omega$ . Pour un taux  $\alpha$  fixé ( $\alpha = 1/20$ ), on a représenté les écarts à l'échelle logarithmique pour  $H = 1/5$  (en bas) et  $H = 1/20$  (en haut) et pour deux valeurs de  $\rho$  :  $\rho = 0$  (première et troisième lignes en partant du bas) et  $\rho = 0.5$  (seconde et quatrième lignes). Les

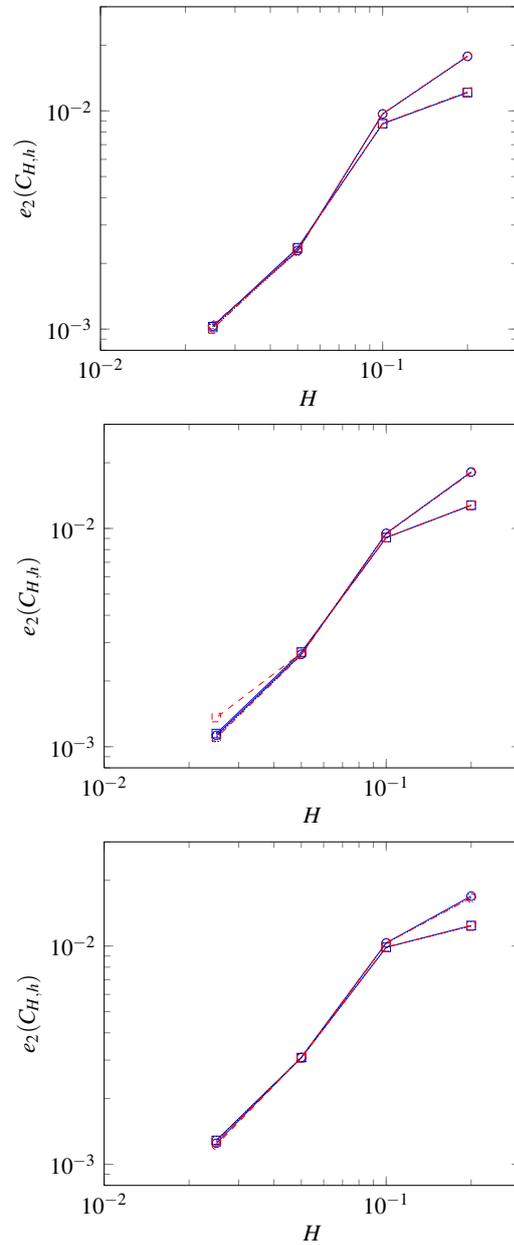


FIGURE 7.3 – Exemple 7.2 : erreurs  $e_2(C_{H,h}^{EF})$  (cercle) et  $e_2(C_{H,h}^{GD})$  (carré) en fonction de  $H$ . Chaque figure présente ici les erreurs pour trois valeurs de  $\alpha$  :  $\alpha = 1/5$  ( $\text{---}\circ\text{---}$  et  $\text{---}\square\text{---}$ )  $\alpha = 1/10$  ( $\text{---}\diamond\text{---}$  et  $\text{---}\square\text{---}$ ), et  $\alpha = 1/20$  ( $\text{---}\diamond\text{---}$  et  $\text{---}\square\text{---}$ ). Trois cas sont représentés :  $\rho = 0$  (en haut),  $\rho = 0.1$  (au milieu) et  $\rho = 0.5$  (en bas).

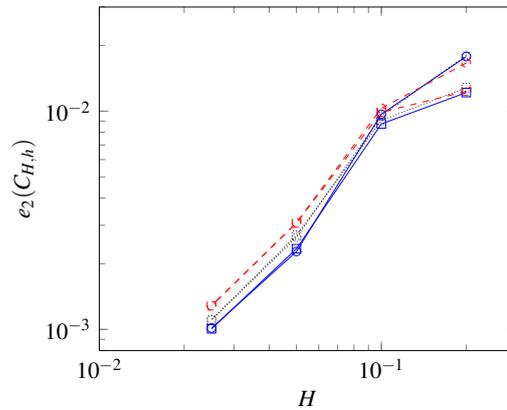


FIGURE 7.4 – Exemple 7.2 : erreurs  $e_2(C_{H,h}^{EF})$  (cercle) et  $e_2(C_{H,h}^{GD})$  (carré) en fonction de  $H$ , à  $\alpha = 1/10$  fixé. On présente ici les erreurs pour trois valeurs de  $\rho$  :  $\rho = 0$  ( $- \circ -$  et  $- \square -$ ),  $\rho = 0.1$  ( $- \circ \cdot -$  et  $- \square \cdot -$ ) et  $\rho = 0.5$  ( $- \circ -$  et  $- \square -$ ).

deux méthodes grossières sont illustrées : Éléments Finis (à gauche) et Galerkin discontinue (à droite).

Dans le cas  $H = 1/5$ , on aperçoit les avantages qualitatifs de la méthode de Galerkin discontinue sur la méthode Éléments Finis. Le maximum de l'erreur est plus faible, et l'erreur en elle-même est mieux répartie. En particulier, dans le cas où le sur-échantillonnage  $\rho$  vaut 0.5, les sauts de discontinuités sont plus amortis par la méthode de Galerkin discontinue. Ce lissage des discontinuités se retrouve également quand  $H$  vaut 1/20, même si son intérêt est moindre car les sauts de discontinuités  $y$  sont naturellement plus faible qu'au cas précédent.

### 7.1.3 Réponse de la chaîne de calcul à un grand nombre de macroéléments.

**Exemple 7.3** On considère le problème suivant :

$$\begin{cases} -\Delta C = 0 & \text{dans } \Omega = ]0, 1[^3 \\ C = xyz & \text{sur } \Gamma = \partial\Omega. \end{cases} \quad (7.4)$$

La solution du problème est alors :

$$C = xyz$$

On divise le domaine en 50 macroéléments dans chaque direction et on utilise un sur-échantillonnage de 10%. On a donc  $\mathcal{D} = (50, 50, 50)$  et  $\rho = 0.1$ .

L'intérêt de l'Exemple 7.3 ne réside pas dans la résolution proprement dite du problème. La solution étant linéaire, les méthodes multi-échelles permettent de déterminer la solution à la précision machine près.

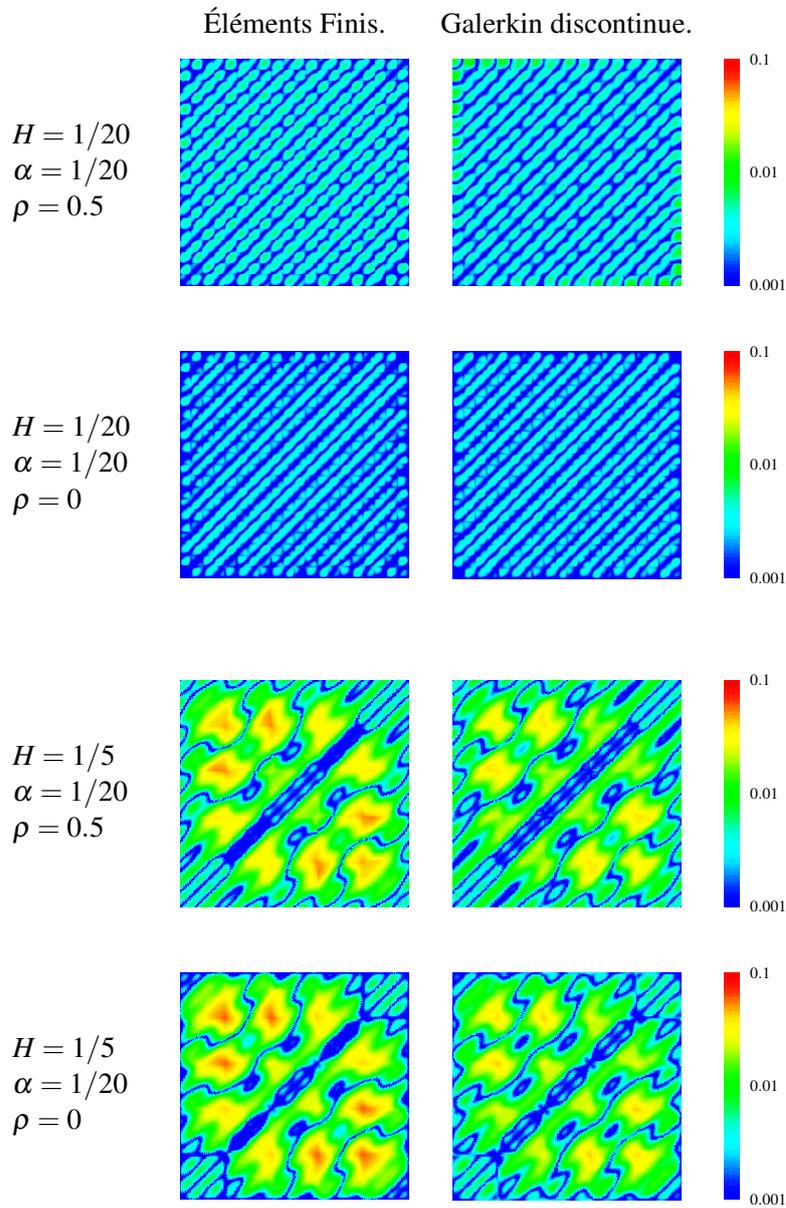


FIGURE 7.5 – Exemple 7.2 : écart entre solution théorique  $C$  et solution fine recalculée  $C_{H,h}$  pour les méthodes Éléments Finis (à gauche) et Galerkin discontinue (à droite). On a fixé  $\alpha = 1/20$  et représenté les écarts à l'échelle logarithmique pour  $H = 1/5$  (en bas) et  $H = 1/20$  (en haut) et pour deux valeurs de  $\rho$  :  $\rho = 0$  et  $\rho = 0.5$ .

Le but de cet exemple est de tester la réponse de la chaîne de calcul *SALOME-MPCube* à une division importante du milieu. Les méthodes multi-échelles sont en effet conçues pour résoudre des problèmes de grandes et très grandes tailles, et il est donc important que l'architecture informatique implémentant ces méthodes soit robuste.

Avec  $\mathcal{D} = (50, 50, 50)$ , on construit un maillage grossier  $T_H(\Omega)$  de 125000 éléments. Il est donc nécessaire de construire 125000 maillages fins  $T_h(\hat{K})$  de cellules, puis de résoudre un million de problèmes de cellules (8 par cellule).

### 7.1.3.1 Stockage et manipulation de fichiers.

Un problème concernant la gestion des capacités de stockage a été révélé par cette simulation. Elle a mis en évidence la nécessité d'utiliser une arborescence de fichiers à plusieurs niveaux afin de sauvegarder les données manipulées. En effet, le nombre de fichiers et de répertoires que peut contenir un répertoire est limité, les chiffres exacts dépendant du système de fichiers choisi (ext3, ext4, Reiser4, FAT32, exFAT, etc.).

Ces limites sont en deçà des besoins de l'Exemple 7.3, même pour les plus récents des systèmes de fichiers. Par exemple, au sein d'un système de fichier ext4 le nombre maximal de sous-répertoires d'un même répertoire est 64000. Le nombre maximal de fichiers par répertoire au sein d'un système exFAT est de 2796202, ce qui permet dans cet exemple un maximum de 22 fichiers par cellule.

Afin de s'affranchir de ces limites, les cellules se voient attribuer une arborescence unique en fonction de leur numéro. Pour la cellule  $\hat{K}$  numérotée  $(p, q, r)$ , l'arborescence choisie est  $./wXp/wYq/wZr$ . Cette arborescence est ajoutée aux répertoires de travail ; utilisé lors de la résolution des problèmes de cellules ; et de stockage, où l'on enregistre la base et les matrices locales. Ainsi, si on nomme  $./Work$  et  $./Data$  les répertoires de travail et de stockage, le travail sur la cellule  $(2, 1, 5)$  utilise le répertoire  $./Work/wX2/wY1/wZ5$ . Les résultats sont ensuite stockés dans le répertoire  $./Data/wX2/wY1/wZ5$ .

### 7.1.3.2 Génération des maillages.

On construit les maillages  $T_h(\hat{K})$  des cellules  $\hat{K}$  issues des macroéléments  $K$  de  $T_H(\Omega)$ . Les maillages sont générés les uns après les autres au sein de *SALOME*. Ils ne sont pas coïncidents (cf. §6.3) et se composent d'environ 4000 tétraèdres. Ce nombre peut paraître peu élevé, mais on rappelle que le but de cet exemple n'est pas d'obtenir une simulation précise, mais d'étudier la réponse de la chaîne de calcul à une division importante du milieu.

On présente à la Figure 7.6 le temps nécessaire à la génération des maillages. On utilise pour cela un noeud du serveur de calcul *pax*, un biprocesseur *AMD Opteron 252* (cadence 2.6Ghz, mémoire vive 16Go). Seuls les 8000 premiers maillages ont été représentés.

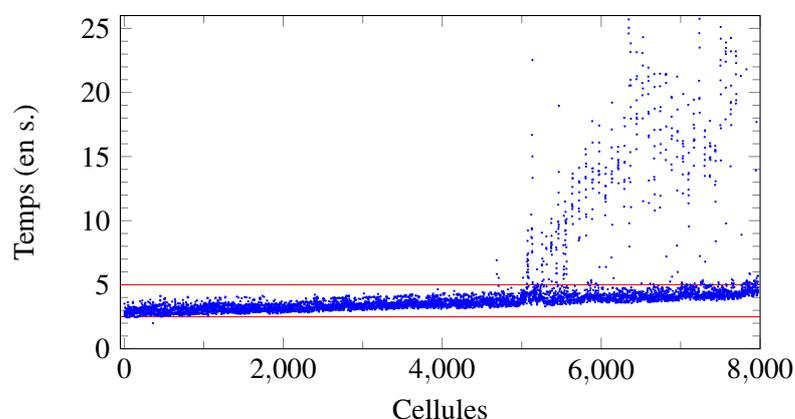


FIGURE 7.6 – Exemple 7.3 : temps de génération de huit mille maillages fins  $T_h(\hat{K})$  en seconde. Le temps moyen augmente au fur et à mesure du nombre de maillages à cause de fuites mémoires dans *SALOME*. Quand la mémoire est saturée, le temps de génération peut être multiplié par 5 par les opérations de *swap* et de nettoyage mémoire.

Le temps de génération augmente au fur et à mesure du nombre de maillages, passant de 2.5s à 5s, pour une moyenne de 4.39s. Cette augmentation est causée par des fuites mémoires au sein de *SALOME* déclenchées par les routines Python de génération de maillages. Un travail conséquent a été fourni pour rendre ces routines, décrites en détail au chapitre §6, neutres du point de vue de la mémoire. Cependant, la plate-forme *SALOME* a des difficultés de gestion de mémoire, et les ressources allouées à un objet ne sont pas nécessairement libérées quand l'utilisateur demande la destruction de l'objet.

Quand la mémoire disponible commence à manquer, la génération du maillage est interrompue, le temps que le serveur de calcul utilise ses fonctionnalités de nettoyage mémoire, ou procède au *swap* de données. Le temps de génération peut ainsi être multiplié par 5 ou plus. Plus la mémoire est saturée, plus ces générations «interrompues» sont fréquentes, jusqu'à devenir la règle plutôt que l'exception. À terme, le travail s'interrompt faute de mémoire.

Afin de pallier ce problème, il suffit de quitter périodiquement l'instance *SALOME* en cours pour en lancer une nouvelle. Le travail de génération peut alors reprendre. Les routines Python de génération des maillages ont été adaptées en ce sens : elles peuvent travailler sur un nombre limité de cellules plutôt que sur l'ensemble des cellules. Il revient cependant à l'utilisateur de décider de la valeur de ce nombre en fonction des ressources informatiques disponibles.

Cette solution mise en place, le gain de temps est important. Si on génère les maillages par groupe de 1000, le temps moyen de construction est de 3.23s, contre 4.39s précédemment.

### 7.1.3.3 Résolution des problèmes locaux.

Pour traiter les cellules, on utilise un cluster de calcul, nommé *awa*, composé d'un noeud maître quadiprocresseur *AMD Opteron 852* (cadence 2.6Ghz) et de six noeuds esclaves, chaque noeud étant un biprocresseur *AMD Opteron 250* (cadence 2.4Ghz, mémoire vive 4Go).

On traite les cellules cinq par cinq, chaque cellule se voyant attribuer un noeud, et donc deux cœurs, de calcul. Comme expliqué à la section §5.1.3, une instance *MPCube* est lancée pour chaque quintuplet de cellules. Sur chaque cellule, on résout les huit problèmes de cellules, puis on calcule les matrices locales correspondantes.

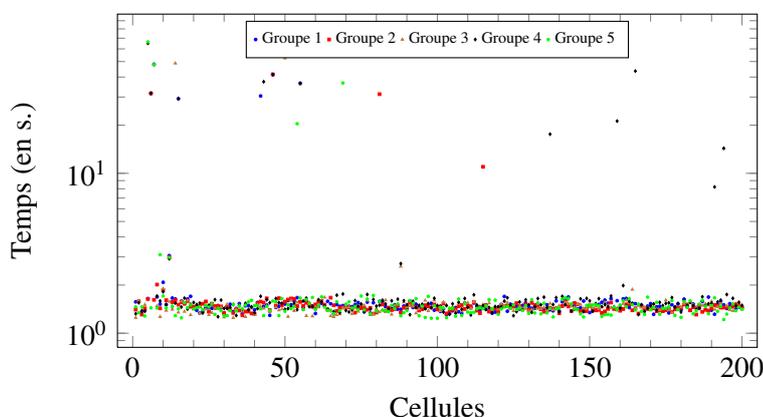


FIGURE 7.7 – Exemple 7.3 : temps de résolution des problèmes locaux et de calcul des matrices locales, en seconde. La majorité des cellules est traitée entre 1s et 2s.

On présente à la Figure 7.7 la durée en seconde de ces opérations. 200 traitements, soit 1000 cellules au total réparties en 5 groupes, sont représentés. Le temps de travail oscille dans la très grande majorité des cas entre 1s et 2s. On peut en conclure qu'il n'y a pas de pertes mémoires lors de ces opérations.

Certaines cellules sont traitées en un temps anormalement élevé, de l'ordre de quelques dizaines de secondes. Dans la majorité des cas, ces écarts se retrouvent sur plusieurs cellule d'un même groupe. Ils ne dépendent donc pas des cellules traitées proprement dites, mais du quintuplet en entier, et donc de l'instance *MPCube* correspondante. On attribue donc ces écarts à une utilisation des noeuds de calcul par des programmes tierces, extérieurs à la chaîne de calcul multi-échelle.

### 7.1.3.4 Mise en forme des résultats.

Telle qu'on l'a décrite à la section §5.1, la chaîne de calcul *SALOME-MPCube* met en forme les résultats locaux (base locale  $(\Phi_K^i)_{1 \leq i \leq n}$ , flux) une fois terminé le

travail sur les cellules : résolution des problèmes de cellules (§5.1.3) puis construction de la base locale et calcul des matrices locales (§5.1.4). La mise en forme des données, détaillée à la section §5.1.5, permet de concentrer les résultats sur un seul fichier, tout en supprimant les fichiers temporaires créés plus tôt dans la chaîne de calcul. On ne peut attribuer qu'un seul cœur de calcul par cellule à cette tâche, mais plusieurs cellules peuvent être formatées en même temps (parallélisme *extra-cellulaire*).

Afin de limiter le nombre de fichiers temporaires et les besoins en matière de stockage, la chaîne de calcul a été modifiée afin d'alterner les étapes de travail et de mise en forme. Ainsi, si on attribue  $p$  cœurs de calcul à la résolution des problèmes locaux, une étape de mise en forme est effectuée après  $p$  étapes de travail. Dans l'Exemple 7.3, on traite donc 2 jeux de 5 cellules avant de mettre en forme les résultats des 10 cellules correspondantes.

## 7.2 Applications aux matériaux cimentaires.

### 7.2.1 Application à un échantillon de mortier.

#### 7.2.1.1 Description du milieu.

On s'intéresse dans cette section aux mortiers. Il s'agit de mélanges de poudre de ciment, de sable et d'eau que l'on a laissé reposer et séché. La présence ou non de grains de sables au sein de la pâte de ciment a une forte influence sur la diffusion des ions au sein du matériau. En effet, lors de la fabrication du mortier, on observe la formation d'une *auréole de transition*, de très haute diffusivité, autour des grains de sables [52, 176]. 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].

Les mortiers et les matériaux cimentaires en général sont détaillés à la section §3.6. En particulier la Figure 3.6 illustre le phénomène de percolation.

Les résultats présentés dans cette section ont été partiellement rédigés dans un article [14], reproduit à l'Annexe §C.

**Exemple 7.4** On considère un domaine cubique  $\Omega = [0, L]^3$ , avec  $L = 5$ , représentant un échantillon de  $125\text{mm}^3$  de mortier. Il est composé d'une matrice, modélisant la pâte de ciment, de diffusivité adimensionnée  $D_m = 5$ . Cette matrice intègre des inclusions sphériques, les grains de sable, de diffusivité  $D_s = 1$ . Chaque sphère est enveloppée d'une couche de  $30\mu\text{m}$  d'épaisseur, de diffusivité  $D_t = 15$ , modélisant l'auréole de transition.

Les diffusivités ont été mesurées par porosimétrie au mercure sur un échantillon de mortier avant d'être adimensionnées [52]. Le sable occupe 35% du volume total

du domaine, soit environ 2600 inclusions. La répartition des tailles des grains de sable est issues de mesures industrielles par granulométrie [89]. Elle est détaillée à la Figure 7.8.

Les fonctionnalités *SALOME* développées au cours de ces travaux de thèse travaillent sur des jeux d'inclusions disjointes les unes des autres. Pour ces raisons techniques, on suppose donc que les auréoles de transition sont distinctes les unes des autres, ainsi donc que les grains de sable correspondants, bien que ce soit physiquement peu probable étant donnée le volume relativement important occupé par le sable.

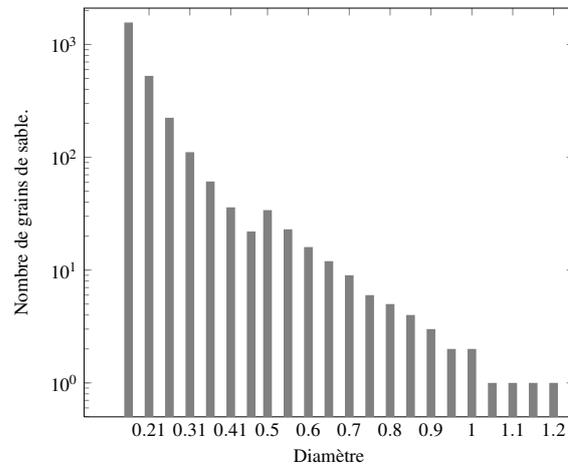


FIGURE 7.8 – Exemple 7.4 : distribution de la taille des grains de sable dans le ciment, calculée à partir des courbes granulométriques du sable. On a exclu les plus grandes tailles, de 1.2mm à 4mm, car le domaine de travail est long de 5mm seulement.

### 7.2.1.2 Résolutions de problèmes.

Le domaine est divisé en 5 macroéléments dans chaque direction de l'espace,  $\mathcal{D} = (5,5,5)$  pour un total de 125 macroéléments. On n'a pas utilisé la technique de sur-échantillonnage :  $\rho$  est nul.

Chaque cellule est discrétisée en utilisant les outils de maillage BLSURF et GHS3D *via* la plate-forme *SALOME*, comme on l'a présenté au chapitre §6. Les maillages obtenus comportent entre  $1 \times 10^5$  et  $5 \times 10^5$  volumes tétraédriques. Cet écart est dû aux spécificités locales de la géométrie de la cellule. Par exemple, la présence de points de tangences entre les inclusions sphériques et les frontières de la cellule augmente énormément le nombre de tétraèdres nécessaires à une discrétisation appropriée de la cellule. On discute ce point plus en détails à la section §6.2.4.

Sur l'ensemble du domaine  $\Omega$ , la discrétisation totalise approximativement  $2 \times 10^7$  éléments. La Figure 7.9 présente la maillage d'une cellule, comportant près de

$2 \times 10^5$  éléments.

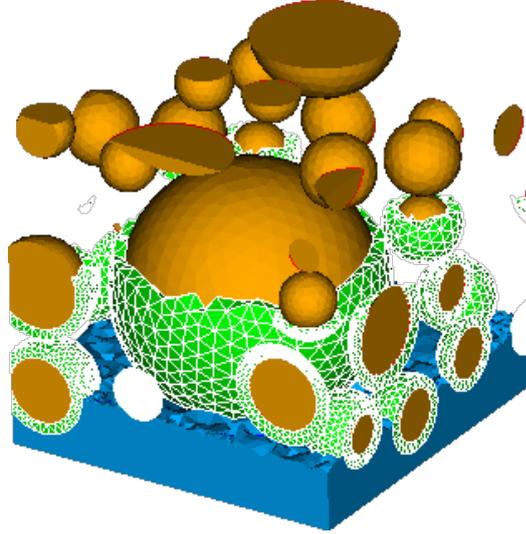


FIGURE 7.9 – Exemple 7.4 : maillage d’une cellule du domaine. La pâte de ciment (en bas) n’est que partiellement représentée afin de montrer les grains de sable sphériques et leurs auréoles de transition (en surbrillance, invisibles dans la partie supérieure de la cellule).

**Exemple 7.4.1** On note  $\Gamma_{x,m}$  et  $\Gamma_{x,p}$  les faces du domaine  $\Omega$  pour lesquelles on a  $\{x = 0\}$  et  $\{x = L\}$  respectivement. On définit de même les faces  $\Gamma_{y,m}$ ,  $\Gamma_{y,p}$ ,  $\Gamma_{z,m}$ ,  $\Gamma_{z,p}$ .

Sur l’échantillon de mortier, on résout le problème de diffusion suivant :

$$\begin{cases} -\nabla(D\nabla C) = 0 & \text{dans } \Omega, \\ C = 1 & \text{sur } \Gamma_{x,m}, \\ C = 0 & \text{sur } \Gamma_{x,p}, \\ D\nabla C \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sur les autres faces,} \end{cases} \quad (7.5)$$

où  $\mathbf{n}$  désigne le vecteur normal extérieur à  $\Omega$ .

Avec les mêmes notations, on définit deux exemples similaires à l’Exemple 7.4.1, la différence tenant dans les faces du domaine  $\Omega$  où l’on impose les conditions limites de Dirichlet.

**Exemple 7.4.2**

$$\begin{cases} -\nabla(D\nabla C) = 0 & \text{dans } \Omega, \\ C = 1 & \text{sur } \Gamma_{y,m}, \\ C = 0 & \text{sur } \Gamma_{y,p}, \\ D\nabla C \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sur les autres faces.} \end{cases} \quad (7.6)$$

**Exemple 7.4.3**

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla(D\nabla C) = 0 \quad \text{dans } \Omega, \\ C = 1 \quad \text{sur } \Gamma_{z,m}, \\ C = 0 \quad \text{sur } \Gamma_{z,p}, \\ D\nabla C \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur les autres faces.} \end{array} \right. \quad (7.7)$$

On résout les problèmes des Exemples 7.4.1, 7.4.2 et 7.4.3 par la méthode multi-échelle  $Q_1/VFDiam$ , puis on recalcule les solutions fines  $C_{H,h}^x$ ,  $C_{H,h}^y$  et  $C_{H,h}^z$  correspondantes.

On présente à la Figure 7.10 la solution  $C_{H,h}^x$  et le gradient longitudinal  $\nabla_x C_{H,h}^x$ . On représente des coupes des coupes des solutions pour les valeurs de  $x$  allant de 1 à 3, les coordonnées  $(y,z)$  étant fixées. Les sauts de concentration, et surtout de gradient, identifient le passage de la solution à travers les auréoles de transition.

**7.2.1.3 Calcul de la diffusivité équivalente.**

Les problèmes que l'on résout ici reproduisent les mesures expérimentales de diffusivité équivalente [48, 49, 63, 73]. L'Exemple 7.4.1 permet ainsi de calculer  $D_x^*$ , une *diffusivité équivalente du milieu*  $D^*$  selon la direction  $x$ , à partir des flux entrant et sortant :

$$D_{x,m}^* = -\frac{1}{L} \int_{\Gamma_{x,m}} D\nabla C \cdot \mathbf{n}, \quad (7.8)$$

$$D_{x,p}^* = \frac{1}{L} \int_{\Gamma_{x,p}} D\nabla C \cdot \mathbf{n}. \quad (7.9)$$

Compte tenu des propriétés de la solution  $C$  de l'Exemple 7.4.1, on a :

$$D_{x,m}^* = D_{x,p}^*$$

La notion de diffusivité équivalente est liée à la définition d'un *Volume Élémentaire Représentatif* (VER). Il s'agit d'un échantillon type du matériau, dont on suppose qu'il renferme toutes les structures, toutes les informations nécessaires pour prédire correctement le comportement macroscopique du matériau. À l'échelle macroscopique, un volume quelconque du matériau pourra donc être remplacé par un assemblage de ses VER sans affecter les résultats des simulations.

La diffusivité équivalente  $D^*$  doit être cohérente avec la définition du VER du milieu et avec le comportement attendu à l'échelle supérieure. On considère généralement dans la littérature que le mortier se comporte comme un matériau homogène isotrope [52]. Les valeurs de  $D^*$  calculées à partir du VER doivent donc l'être aussi.

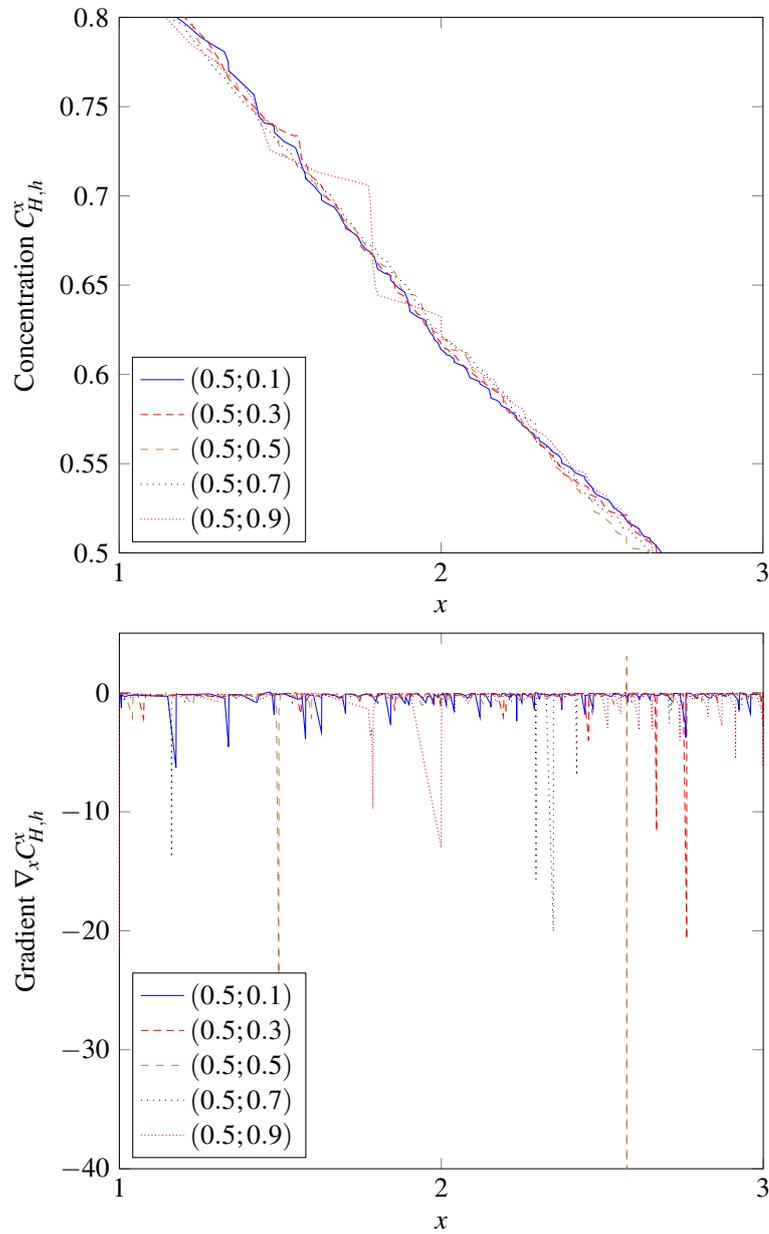


FIGURE 7.10 – Exemple 7.4.1 : concentration  $C_{H,h}^x$  et gradient longitudinal  $\nabla_x C_{H,h}^x$  à travers le domaine  $\Omega$ . Les coupes s'étendent de  $x = 1$  à 3, les coordonnées  $(y; z)$  étant constantes. On reconnaît facilement les *auréoles de transition* par les sauts qu'elles provoquent sur les profils de concentration.

	$D_{.,m}^*$	$D_{.,p}^*$
$D_{x,.}^*$	8.41	10.43
$D_{y,.}^*$	8.70	8.48
$D_{z,.}^*$	9.52	9.07

TABLE 7.1 – Exemple 7.4 : diffusivités équivalentes  $D^*$  calculées selon les deux directions des trois axes de l'espace. Les diffusivités sont différentes les unes des autres, l'échantillon choisi du milieu n'est donc pas représentatif.

À partir des solutions fines  $C_{H,h}^x$ ,  $C_{H,h}^y$  et  $C_{H,h}^z$ , on calcule six diffusivités équivalentes, que l'on présente au Tableau 7.1.

Selon les directions  $y$  et  $z$ , l'écart entre les diffusivités  $D_{.,m}^*$  et  $D_{.,p}^*$  est faible (moins de 5%). L'écart est en revanche très net selon la direction  $x$  (25%). De plus le milieu homogénéisé n'est pas isotrope, les diffusivités équivalentes n'étant pas identiques selon chaque direction. L'échantillon ici considéré n'est donc pas représentatif du mortier.

Ces résultats peuvent être imputés d'une part à la petite taille physique de l'échantillon par rapport à celles des inclusions et au découpage grossier du domaine généré d'autre part.

En effet, on considère ici un échantillon de 5mm de coté, alors que certains grains de sables font jusqu'à 4mm de long. Par conséquent, le plus grand grain de sable présent dans cet échantillon a un diamètre de 1.2mm, et seuls 6 grains de sable sur 2600 ont un diamètre supérieur ou égal à 1mm. Compte tenu de leurs volumes respectifs, la structure des macroéléments change donc du tout au tout selon qu'ils possèdent ou non l'un de ces «grands» grains de sable. Cette variété des macroéléments se transmet naturellement aux fonctions de bases locales  $(\Phi_K^i)_{1 \leq i \leq n}$ , aux matrices locales et aux flux sortants.

Pendant, on a ici découpé le domaine en 5 macroélément selon chaque direction. Compte tenu des conditions limites de Dirichlet, le nombre réel de degrés de liberté du problème grossier est très faible, trop pour que les variations des matrices locales se retrouvent dans la solution grossière. La solution grossière  $C_H$  décroît donc uniformément, sans tenir compte des différences entre les macroéléments.

Lorsqu'on reconstruit la solution fine  $C_{H,h}$  on pondère donc les fonctions oscillantes  $(\Phi^I)_{I \in \mathcal{J}}$  par des coefficients qui ne tiennent pas compte de leurs spécificités. Toute différence sur la structure des macroéléments se répercute alors sur la solution fine, et sur son flux, sans aucune contrepartie. En particulier, puisqu'un des grands grains de sable, et son auréole de transition, occupe une importante portion de la face  $\Gamma_{x,p}$ , le flux de  $C_{H,h}$  sur cette face du domaine est anormalement élevé, ce qui explique l'écart de valeur de  $D_{x,p}^*$ . Cette différence ne se retrouve pas sur les autres faces de  $\Omega$ .

En conclusion, on a montré par le biais de cet exemple l'utilité de la méthode multi-échelle  $Q_1/VFDiam$ , en permettant de réaliser facilement plusieurs simulations sur un domaine nécessitant une discrétisation fine (environ  $2 \times 10^7$  éléments).

L'échantillon modélisé n'est cependant pas représentatif du mortier. Pour cela, il conviendrait de travailler sur un domaine plus large, de l'ordre de 20mm ou 50mm de côté, afin de prendre en compte toute l'étendue des tailles de grains de sable.

## 7.2.2 Application à un échantillon périodique de pâte de ciment.

### 7.2.2.1 Description du milieu.

Cet exemple se concentre sur un échantillon de pâte de ciment qui sera reproduit périodiquement pour former le domaine  $\Omega$ . Ici, le macroélément  $K$  n'est pas défini à partir d'un découpage du domaine  $\Omega$ , mais c'est l'échantillon  $\Omega$  qui est construit par assemblage périodique du macroélément  $K$ , que l'on peut donc considérer comme un VER. En ce sens, on travaille donc *a contrario* de l'ordre habituel.

On appelle *pâte de ciment* une poudre de ciment qui a été hydratée, brassée puis séchée. Pendant ces opérations, de nombreuses transformations chimiques ont lieu, ce qui entraîne l'apparition de nouvelles espèces chimiques, ainsi que le réarrangement de composés en de nouvelles structures [115, 150]. On peut trouver plus de détails sur la pâte de ciment et ses principaux composés à la section §3.6.1.

**Exemple 7.5** On considère un macroélément cubique  $K = [0, L]^3$ , avec  $L = 50\mu\text{m}$ , représentant un échantillon de  $125\mu\text{m}^3$  de pâte cimentaire. Il est composé d'une matrice, modélisant la porosité capillaire, de diffusivité  $D_0 = 2.24 \times 10^{-9}\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ .

Cette matrice intègre des inclusions sphériques modélisant les composés principaux de la pâte de ciment. Les phases non diffusives (résidus anhydres, portlandite, ettringite et hydrogrenats) sont fixées à une valeur basse (diffusivité  $D_a = 1 \times 10^{-20}\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ ). Les silicates de calcium hydratés ou  $C-S-H$  sont répartis en deux densités différentes : Low Density  $C-S-H$  (diffusivité  $D_l = 9 \times 10^{-12}\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ ) et High Density  $C-S-H$  (diffusivité  $D_h = 1 \times 10^{-12}\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ ).

La majorité des inclusions sont de petites tailles (rayon  $r$  inférieur à  $5\mu\text{m}$ ), mais il existe aussi des inclusions plus grandes ( $r > 6\mu\text{m}$ ) possédant une structure multi-couche : un coeur de portlandite (ou d'aluminates, d'anhydre) occupant 40% du rayon, une coquille de HD  $C-S-H$  (de  $0.4r$  à  $0.9r$ ) et une coquille de LD  $C-S-H$  (de  $0.9r$  à  $r$ ).

La minéralogie de la pâte de ciment et la diffusivité des différentes phases correspondent à une pâte de ciment *CEMI* [42, 43, 45]. On présente à la Figure 7.11 (cas  $\rho = 0$ ) la distribution de la taille des inclusions dans le macroélément  $K$ . Les barres présentent la répartition des inclusions sur les différentes phases considérées.

Ces inclusions sont placées aléatoirement au sein du macroélément  $K$  par le module COMBS, décrit à la section §4.3.1.

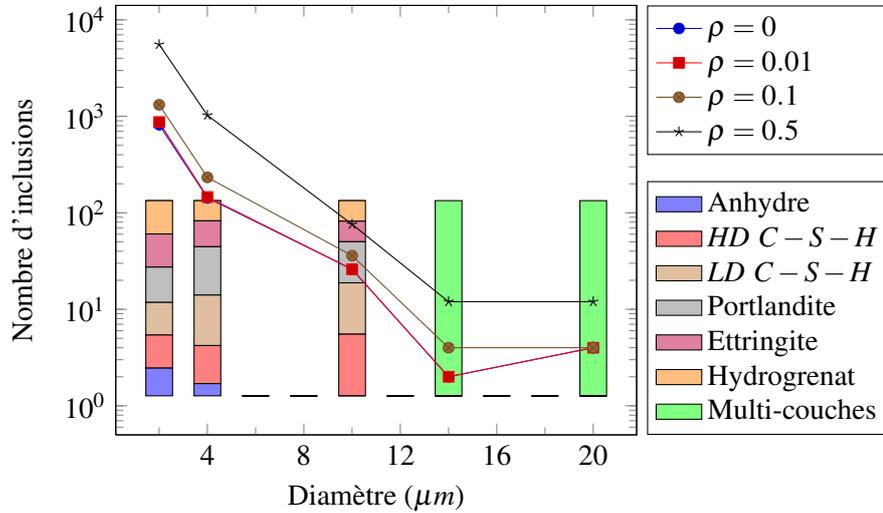


FIGURE 7.11 – Exemple 7.5 : distribution de la taille des inclusions dans la cellule périodique en fonction de  $\rho$ . Les barres présentent la répartition des inclusions sur les différentes phases considérées.

### 7.2.2.2 Travail sur le macroélément $K$ .

Les différentes étapes de la chaîne de calcul *SALOME-MPCube* sont appliquées au macroélément  $K$ .

Soit  $\rho$  un taux de sur-échantillonnage donné, on construit et on discrétise la cellule  $\hat{K}$  correspondante par le biais de la plate-forme *SALOME*. Les méthodes utilisées pour obtenir  $T_h(\hat{K})$ , la discrétisation de la cellule  $\hat{K}$ , ont été décrites en détails au chapitre §6, et plus précisément à la section §6.3. De légères modifications ont cependant été effectuées afin d'assurer que les faces opposées du macroélément  $K$  soient discrétisées de manière identique.

Le Tableau 7.2 présente, pour quatre valeurs de  $\rho$ , le nombre d'inclusions présentes dans la cellule  $\hat{K}$  et le nombre de tétraèdres des maillages  $T_h(\hat{K})$  correspondants. Une visualisation du maillage du macroélément  $K$  dans le cas  $\rho = 0$  se trouve à la Figure 7.12.

$\rho$	Nombre d'inclusions	Nombre de tétraèdres
0	594	1 110 928
0.01	594	1 217 065
0.1	1115	1 889 902
0.5	5486	8 877 141

TABLE 7.2 – Exemple 7.5 : nombre d'inclusions de la cellule  $\hat{K}$  et nombre de tétraèdres du maillage  $T_h(\hat{K})$  pour plusieurs valeurs de  $\rho$ .

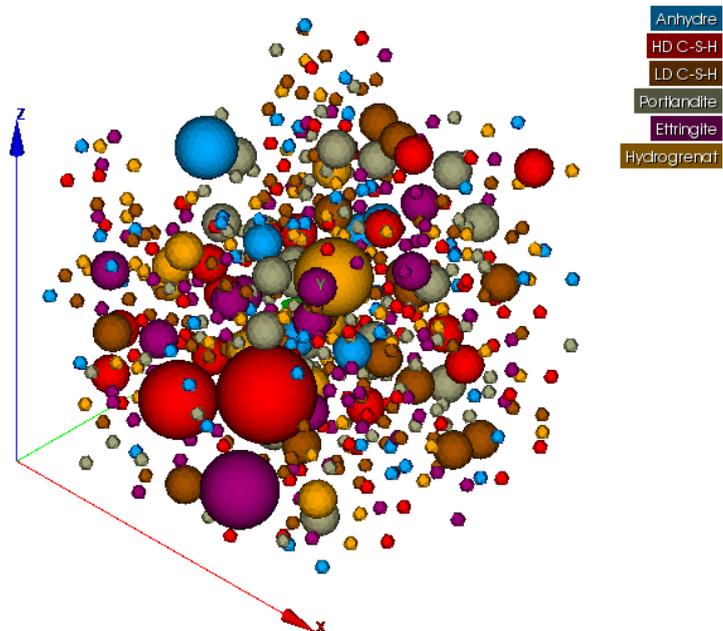


FIGURE 7.12 – Exemple 7.5 : visualisation *via SALOME* du maillage du macro-élément  $K$ , dans le cas  $\rho = 0$ . Seul le maillage des inclusions est ici représenté, la matrice ayant été rendue invisible. Chaque couleur correspond à une phase différente.

**Remarque 7.3** *Pour des raisons techniques, on doit ignorer les inclusions qui touchent l'une ou l'autre des faces du macroélément  $K$ . Les chiffres présentés au Tableau 7.2 sont donc inférieurs à ceux présentés à la Figure 7.11, qui correspondent aux nombres d'inclusions générées par le module COMBS. On revient plus en détails sur ce problème à la Remarque 7.4.*

Une fois la cellule  $\hat{K}$  discrétisée, on résout les problèmes de cellules par le biais de *MPCube*. On calcule ensuite la base locale  $(\Phi_K^i)_{1 \leq i \leq n}$  et les matrices locales associées, ce qui achève le travail sur la cellule  $\hat{K}$ .

### 7.2.2.3 Résolution de problèmes grossiers.

Soit  $p$  un entier strictement positif, on note  $\Omega^p$  le domaine cubique  $[0, pL]^3$  composé de l'assemblage de  $p^3$  exemplaires du macroélément  $K$  décrit ci-dessus.

Compte tenu de sa périodicité, la résolution d'un problème sur le milieu  $\Omega^p$  par une méthode multi-échelle a un coût très faible. En effet, les résultats des calculs locaux (base et matrices locales) sont ici identiques d'une cellule à l'autre. Une fois effectués ces calculs sur l'unique cellule  $\hat{K}$  de référence, il suffit donc de les reporter sur les autres cellules pour pouvoir assembler le problème grossier.

On résout sur  $\Omega^p$  les trois problèmes d'homogénéisation précédemment décrit à la section §7.2.1.2 sous les noms des Exemples 7.4.1, 7.4.2 et 7.4.3. Ce problème est défini, pour la direction  $x$ , par :

#### Exemple 7.5.1

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\nabla(D\nabla C) = 0 & \text{dans } \Omega^p, \\ C = 1 & \text{sur } \Gamma_{x,m}^p, \\ C = 0 & \text{sur } \Gamma_{x,p}^p, \\ D\nabla C \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{sur les autres faces,} \end{array} \right. \quad (7.10)$$

où  $\mathbf{n}$  désigne le vecteur normal extérieur à  $\Omega^p$  et où on a noté  $\Gamma_{x,m}^p$  et  $\Gamma_{x,p}^p$  les faces du domaine  $\Omega^p$  pour lesquelles on a  $\{x=0\}$  et  $\{x=pL\}$  respectivement. On définit de même les faces  $\Gamma_{y,m}^p$ ,  $\Gamma_{y,p}^p$ ,  $\Gamma_{z,m}^p$ ,  $\Gamma_{z,p}^p$ .

Par le biais des équations (7.8) et (7.9), on construit six diffusivités équivalentes à partir des solutions des problèmes d'homogénéisation. On présente au Tableau 7.3 l'évolution de ces valeurs en fonction de  $p$  pour les deux méthodes d'Éléments Finis et de Galerkin discontinue. Deux valeurs de  $\rho$  sont représentées :  $\rho = 0$  et  $\rho = 0.1$ .

Étant donné la périodicité des milieux  $\Omega^p$ , leurs diffusivités équivalentes ne doivent pas évoluer avec  $p$ , mais correspondre aux diffusivités équivalentes du macroélément  $K$  de référence. De plus, on considère dans la littérature que la pâte cimentaire se comporte comme un matériau homogène isotrope [42, 43]. Les valeurs de  $D^*$  calculées ici doivent donc l'être aussi.

Dans le cas où on n'utilise pas de sur-échantillonnage ( $\rho = 0$ ), les diffusivités calculées varient très peu avec  $p$ , que ce soit pour la méthode Éléments Finis ou celle de Galerkin discontinue. En outre, elles sont très proches les unes des autres. En effet, que ce soit selon les directions ( $D_{.,m}^*$  et  $D_{.,p}^*$ ), selon les axes ( $D_{x,.}^*$ ,  $D_{y,.}^*$  et  $D_{z,.}^*$ ) ou bien selon les méthodes, l'écart entre les valeurs de diffusivité ne dépasse pas 5%.

Le milieu homogénéisé est donc homogène et isotrope. On peut donc considérer que le macroélément de référence  $K$  est un *Volume Élémentaire Représentatif* (VER) de pâte de ciment.

Pour  $\rho = 0.1$ , l'évolution des coefficients  $D^*$  en fonction de  $\Omega^p$  est visible, surtout pour le coefficient  $D_{y,m}^*$  qui atteint un écart de 9% avec  $D_{y,p}^*$  dans le cas de la méthode Éléments Finis et de 15% pour la méthode Galerkin discontinue. On attribue cette évolution à un problème d'approximation des flux numériques : l'erreur dans le calcul du flux sur la cellule de référence  $\hat{K}$  se répercute et se multiplie avec le nombre de macroéléments  $p$ .

Dans le cas  $\rho = 0$ , le calcul du flux s'appuie sur les conditions aux limites des problèmes de cellules, qui sont connues explicitement. Pour  $\rho = 0.1$ , le flux est calculé à partir des valeurs numériques des fonctions de bases locales  $\Phi_K^i$ . Si la discrétisation de la couronne  $\hat{K} \setminus K$  est trop grossière, le flux n'est pas approximé correctement. Quel axe est le plus influencé par cette erreur d'approximation ne dépend alors que de la position des inclusions de la couronne, qui conditionnent la génération du maillage  $T_h(\hat{K})$ .

On note de plus que les valeurs calculées par le biais de la méthode de Galerkin discontinue sont systématiquement inférieures à leurs équivalentes par la méthode Éléments Finis. On a vu à l'Exemple 7.2 que la méthode de Galerkin discontinue permet généralement d'obtenir une solution plus lisse, où l'erreur de résolution est répartie au sein du domaine au lieu d'être concentrée le long des frontières des macroéléments. Pour cette raison, on conjecture que les valeurs de diffusivités de la méthode de Galerkin discontinue sont plus justes, plus proches de la réalité, que leurs contreparties Éléments Finis. Faute de simulations ou d'expérimentations de référence à l'heure actuelle, il n'est cependant pas possible d'infirmer ou de confirmer ce point.

Méthode Éléments Finis,  $\rho = 0$ .

$p$	$D_{x,m}^*$	$D_{x,p}^*$	$D_{y,m}^*$	$D_{y,p}^*$	$D_{z,m}^*$	$D_{z,p}^*$
5	2097.46	2035.23	2071.56	2082.11	2054.37	2068.02
10	2096.89	2034.67	2071.00	2081.54	2053.80	2067.45
20	2094.57	2032.42	2068.71	2079.24	2051.54	2065.17

Méthode Éléments Finis,  $\rho = 0.1$ .

$p$	$D_{x,m}^*$	$D_{x,p}^*$	$D_{y,m}^*$	$D_{y,p}^*$	$D_{z,m}^*$	$D_{z,p}^*$
5	2116.06	2067.39	2105.23	2106.16	2080.85	2093.43
10	2120.40	2066.18	2166.11	2099.90	2081.80	2090.98
20	2129.40	2063.68	2292.32	2086.93	2083.78	2085.90

Méthode Galerkin discontinue,  $\rho = 0$ .

$p$	$D_{x,m}^*$	$D_{x,p}^*$	$D_{y,m}^*$	$D_{y,p}^*$	$D_{z,m}^*$	$D_{z,p}^*$
5	2005.43	1943.91	2043.39	1946.57	1965.16	1985.57
10	2004.91	1943.38	2042.86	1946.04	1964.65	1985.07
20	2003.89	1942.40	2039.72	1942.90	1962.39	1982.80

Méthode Galerkin discontinue,  $\rho = 0.1$ .

$p$	$D_{x,m}^*$	$D_{x,p}^*$	$D_{y,m}^*$	$D_{y,p}^*$	$D_{z,m}^*$	$D_{z,p}^*$
5	2022.63	1978.32	2074.75	1976.12	1990.09	2005.36
10	2028.75	1975.82	2136.04	1968.25	1991.22	2002.12
20	2035.91	1972.93	2242.98	1956.03	1994.96	1996.40

TABLE 7.3 – Exemple 7.5 : diffusivités équivalentes  $D^*$  calculées selon les deux directions des trois axes de l'espace pour différents domaines  $\Omega^p$ . Les valeurs sont exprimées en  $\mu\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ .

### 7.2.3 Application à un échantillon aléatoire de pâte de ciment.

#### 7.2.3.1 Description du milieu.

On étudie ici un milieu semblable à celui décrit à la section §7.2.2, puisqu'il s'agit d'un échantillon de pâte de ciment de type *CEMI* [43, 42, 45]. Cependant, contrairement à l'Exemple 7.5 le milieu n'est pas construit périodiquement à partir d'un unique macroélément, mais généré aléatoirement par le biais du module COMBS (cf. §4.3.1).

Il s'agit d'un exemple représentatif des différents ordres de grandeur que l'on rencontre lors de simulations réalistes sur les matériaux cimentaires. On travaille en effet avec plusieurs dizaines de milliers d'inclusions qui provoquent des sauts de diffusivité d'un facteur  $1 \times 10^{11}$  au sein du milieu. La discrétisation complète du domaine  $\Omega$  demande près de 100 millions de tétraèdres, ce qui exclut toute résolution d'un problème de diffusion par une méthode numérique classique.

**Exemple 7.6** *On considère un domaine cubique  $K = [0, L]^3$ , où on a posé  $L = 250 \mu\text{m}$ . Cet échantillon de pâte cimentaire occupe donc un volume de  $15.625 \times 10^6 \mu\text{m}^3$ .*

*La structure de ce milieu est semblable à celle de l'Exemple 7.5. Le milieu est donc composé d'une matrice, modélisant la porosité capillaire, de diffusivité  $D_0 = 2.24 \times 10^{-9} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ , qui intègre des inclusions sphériques modélisant les composés principaux de la pâte de ciment :*

- Résidus anhydres, portlandite, ettringite et hydrogrenats de diffusivité  $D_a = 1 \times 10^{-20} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ .*
- Low Density C – S – H de diffusivité  $D_l = 9 \times 10^{-12} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ .*
- High Density C – S – H de diffusivité  $D_h = 1 \times 10^{-12} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ .*

*Au contraire de l'Exemple 7.5, cet échantillon de pâte cimentaire ne comporte pas d'inclusions multi-couches.*

Environ 42000 inclusions sont placées au sein du domaine  $\Omega$ . On présente à la Figure 7.13 la distribution de la taille des inclusions, les barres illustrant la répartition des inclusions sur les différentes phases considérées.

#### 7.2.3.2 Partie locale de la chaîne de calcul.

On prépare le milieu  $\Omega$  afin de pouvoir y résoudre des problèmes par les méthodes multi-échelles  $Q_1/VFDiam$  et  $GD/VFDiam$ . On divise  $\Omega$  en 10 macroéléments dans chaque direction de l'espace,  $\mathcal{D} = (10, 10, 10)$ . Le maillage grossier  $T_H(\Omega)$  correspondant comprend donc 1000 macroéléments  $K$ .

Pour des raisons techniques décrites à la Remarque 7.4, on doit s'assurer ici que les inclusions ne touchent pas les faces des macroéléments  $K$ . Seules 60% des inclusions générées sont donc placées au sein du domaine  $\Omega$ , soit en moyenne 25 par macroélément. Deux valeurs du taux de sur-échantillonnage  $\rho$  sont considérées :  $\rho = 0$  et  $\rho = 0.2$ .

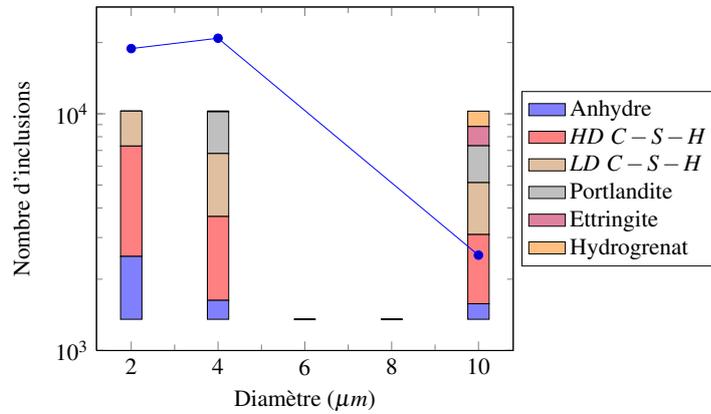


FIGURE 7.13 – Exemple 7.6 : distribution de la taille des inclusions dans le domaine  $\Omega$ . Les barres présentent la répartition des inclusions sur les différentes phases considérées.

Afin de pouvoir utiliser la méthode  $GD/VFDiam$ , chaque face  $F$  du maillage grossier  $K$  doit disposer d'une unique discrétisation  $T_h(F)$ , indépendamment de la cellule considérée. En d'autres termes, si  $F$  est la face commune aux macroéléments  $K^+$  et  $K^-$ , les restrictions à  $F$  des maillages  $T_h(\hat{K}^+)$  et  $T_h(\hat{K}^-)$  doivent être identiques. On dit que les maillages  $T_h(\hat{K}^+)$  et  $T_h(\hat{K}^-)$  coïncident sur  $F$ .

Cette problématique est détaillée à la section §6.3, qui présente notamment l'Algorithme 6.9 utilisé pour construire les maillages de cellules coïncidents. On discrétise tout d'abord l'ensemble des faces  $F$  de  $T_H(\Omega)$ , en imposant un rapport  $\alpha = h/H$  valant  $1/20$ . Le maillage  $T_h^{\mathcal{D}}(\Omega)$  de référence 2D ainsi obtenu comporte près de trois millions de faces.

Dans un second temps, et pour chaque valeur de  $\rho$ , on construit et on discrétise l'ensemble des cellules  $\hat{K}$ , en imposant la discrétisation issue de  $T_h^{\mathcal{D}}(\Omega)$  sur les faces  $\partial K$  correspondantes. En moyenne, chaque maillage  $T_h(\hat{K})$  possède 100000 éléments tétraédriques ( $\rho = 0$ ) ou 268000 éléments ( $\rho = 0.2$ ). On présente à la Figure 7.14 un exemple de maillage de cellules, dans le cas où  $\rho = 0$  (à gauche) et  $\rho = 0.2$  (à droite).

**Remarque 7.4** On doit s'assurer ici que les inclusions ne touchent pas les faces du macroélément  $K$ . En effet, les surfaces des inclusions sont maillées au sein de chaque cellule par un algorithme 2DD spécifique, généralement BLSURF. L'intersection d'une inclusion et de la face du macroélément se voit donc assigner deux algorithmes de discrétisation : d'une part la discrétisation imposée par le maillage 2DD de référence  $T_h^{\mathcal{D}}(\Omega)$  et le mailleur 2DD de la cellule d'autre part. Ces deux algorithmes se perturbent l'un l'autre et le maillage obtenu ne coïncide pas sur les faces du macroélément  $K$ .

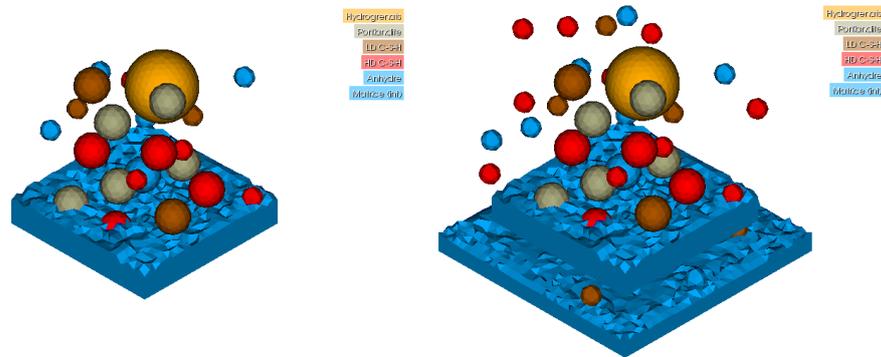


FIGURE 7.14 – Exemple 7.6 : visualisation *via SALOME* du maillage de la cellule  $\hat{K} = (1, 2, 3)$  pour  $\rho = 0$  (gauche) et  $\rho = 0.2$  (droite). Le maillage de la matrice a été rendu invisible à partir d’une certaine hauteur afin de faire apparaître les inclusions. Chaque couleur correspond à une phase différente.

Une fois les maillages générés, les problèmes de cellules ont été résolus sur un cluster de calcul nommé *eris*. Il est composé de deux serveurs contenant chacun quatre cartes-mères. Une carte-mère contenant deux processeurs quadricoeurs *Intel(R) Xeon(R) X5667* (cadence 3GHz, 48Go de mémoire vive par carte), on dispose au total de 64 cœurs de calcul. 40 d’entre eux ont été utilisés pour cette opération. À chaque cellule ont été attribués 2 (cas  $\rho = 0$ ) ou 4 cœurs de calcul (cas  $\rho = 0.2$ ). Selon les cas, 20 ou 10 cellules ont donc été traitées de front.

On présente à la Figure 7.15 les temps de résolution des problèmes locaux en seconde, pour les cas  $\rho = 0$  (•) et  $\rho = 0.2$  (◊). Le temps moyen nécessaire pour résoudre un problème local est respectivement de 19s et 18s, auquel il faut ajouter 1s environ pour le traitement et le formatage des résultats. Construire la base locale et calculer les matrices locales demandent en moyenne 56s, respectivement 61s, portant à 216s, respectivement 213s, le temps total des opérations liés à une cellule.

Compte tenu des capacités de calculs disponibles, l’ensemble des cellules a donc été traité en 3h00 pour le cas  $\rho = 0$ , et 5h55 pour le cas  $\rho = 0.2$ , dont environ 2h15, respectivement 4h12, consacré à la résolution des 8000 problèmes de cellules.

### 7.2.3.3 Résolution de problèmes grossiers.

On résout sur  $\Omega$  les trois problèmes d’homogénéisation précédemment décrit à la section §7.2.1.2 sous les noms des Exemples 7.4.1, 7.4.2 et 7.4.3. Ce problème est défini, pour la direction  $x$ , par :

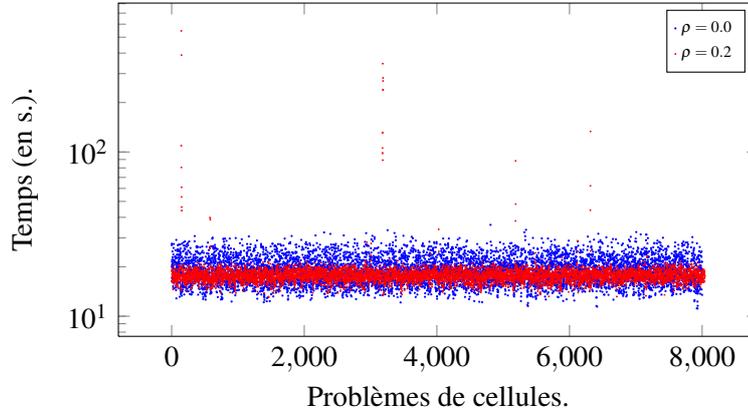


FIGURE 7.15 – Exemple 7.6 : temps de résolution des problèmes locaux en seconde, pour les cas  $\rho = 0$  (•) et  $\rho = 0.2$  (•). Les temps moyens sont respectivement de 19s. et 18s.

### Exemple 7.6.1

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla(D\nabla C) = 0 \quad \text{dans } \Omega^p, \\ C = 1 \quad \text{sur } \Gamma_{x,m}^p, \\ C = 0 \quad \text{sur } \Gamma_{x,p}^p, \\ D\nabla C \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur les autres faces,} \end{array} \right. \quad (7.11)$$

où  $\mathbf{n}$  désigne le vecteur normal extérieur à  $\Omega^p$  et où on a noté  $\Gamma_{x,m}^p$  et  $\Gamma_{x,p}^p$  les faces du domaine  $\Omega^p$  pour lesquelles on a  $\{x=0\}$  et  $\{x=pL\}$  respectivement. On définit de même les faces  $\Gamma_{y,m}^p$ ,  $\Gamma_{y,p}^p$ ,  $\Gamma_{z,m}^p$ ,  $\Gamma_{z,p}^p$ .

La Figure 7.16 visualise la solution fine  $C_{H,h}$  du problème (7.11), pour la méthode Éléments Finis sans recouvrement ( $\rho = 0$ ). On a ici reconstruit la solution fine sur la portion  $\{100 \leq y, z \leq 125\}$  du domaine  $\Omega$ . Ce volume correspond aux macroéléments numérotés  $(i, 4, 4)_{0 \leq i < 10}$ .

À gauche, a représenté la solution fine proprement dite, sur laquelle on a fait ressortir la discrétisation du milieu. À droite, on présente les surfaces d'iso-valeurs de  $C_{H,h}$ , qui illustent l'influence des inclusions sur la diffusion au sein du milieu.. Les couleurs s'étalonnent du rouge (en haut  $x = 0$ ,  $C_{H,h} = 1$ ) au bleu (en bas  $x = 1$ ,  $C_{H,h} = 0$ ).

#### 7.2.3.4 Calcul de la diffusivité équivalente.

Par le biais des équations (7.8) et (7.9), on construit six diffusivités équivalentes à partir des solutions des problèmes d'homogénéisation. On considère dans la littérature que la pâte cimentaire se comporte comme un matériau homogène isotrope [42, 43]. Les diffusivités équivalentes  $D^*$  calculées ici doivent donc l'être aussi.

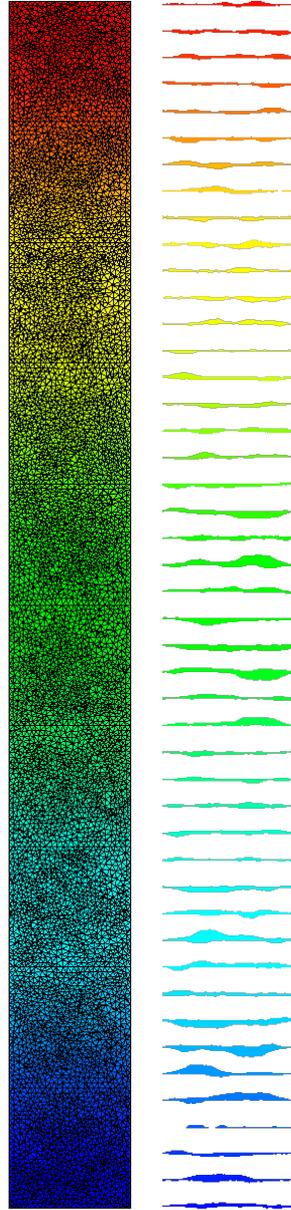


FIGURE 7.16 – Exemple 7.6.1 : visualisation de la solution fine  $C_{H,h}$  (méthode Éléments Finis,  $\rho = 0$ ) sur les macroéléments numérotés  $(i, 4, 4)_{0 \leq i < 10}$ , c'est-à-dire sur la portion  $\{100 \leq y, z \leq 125\}$  du domaine  $\Omega$ . À gauche, on présente la solution fine proprement dite, sur laquelle on a fait ressortir la discrétisation du milieu. À droite, on présente les isosurfaces de  $C_{H,h}$ . Les couleurs s'étalonnent du rouge (en haut  $x = 0$ ,  $C_{H,h} = 1$ ) au bleu (en bas  $x = 1$ ,  $C_{H,h} = 0$ ).

On présente au Tableau 7.4 ces valeurs de diffusivité pour les deux méthodes d'Éléments Finis et de Galerkin discontinue et pour les deux valeurs de  $\rho$  considérées :  $\rho = 0$  et  $\rho = 0.1$ .

Dans le cas où on n'utilise pas de sur-échantillonnage ( $\rho = 0$ ), les diffusivités calculées par la méthode d'Éléments Finis sont très proches les unes des autres, l'écart entre les six valeurs étant de 1.5%. Dans le cas où  $\rho$  est non nul, l'écart entre les valeurs diminue encore, pour ne pas dépasser 0.6%. Le milieu homogénéisé est donc homogène et isotrope et on peut considérer que le domaine  $\Omega$  est un *Volume Élémentaire Représentatif* (VER) de pâte de ciment.

La méthode de Galerkin discontinue donne des résultats moins homogènes. Pour chaque axe, l'écart selon les directions ( $D_{:,m}^*$  et  $D_{:,p}^*$ ) est très faible, de l'ordre de 0.9%, si  $\rho$  est nul, et 0.5% sinon. Il y a cependant une disparité d'environ 14% entre les axes, un pourcentage trop élevé pour qu'on considère le milieu homogénéisé isotrope. Selon la méthode de Galerkin discontinue,  $\Omega$  n'est donc pas un VER.

On peut attribuer cette différence d'homogénéité entre les deux méthodes à la suppression des inclusions coupant les frontières des macroéléments  $K$  (cf. Remarque 7.4). Cette opération modifie radicalement le domaine  $\Omega$  aux bords des macroéléments, mais laisse leurs centres intactes. Cette suppression influence chaque axe de l'espace selon des degrés divers, en fonction de la position des inclusions supprimées. Quel axe est le plus influencé ne dépend alors que de la part d'aléatoire dans la génération du domaine  $\Omega$  par le module COMBS.

Au contraire de la méthode d'Éléments Finis, la méthode de Galerkin discontinue s'appuie sur de nombreux termes calculées sur les faces des macroéléments (termes de saut, de pénalité). Il est donc logique que la solution du problème, et les coefficients équivalents correspondants, soient plus influencés par une modification artificielle du milieu autour de ces faces.

On note également que les valeurs calculées par le biais de la méthode de Galerkin discontinue sont systématiquement inférieures à leurs équivalentes par la méthode Éléments Finis, un phénomène déjà observé à l'Exemple 7.5. Par le même argument soulevé à l'Exemple 7.5, on suppose que les valeurs de diffusivités de la méthode de Galerkin discontinue sont plus justes, plus proches de la réalité, que leurs contreparties Éléments Finis.

En effet, la méthode de Galerkin discontinue permet généralement d'obtenir une solution plus lisse (cf. Exemple 7.2), où l'erreur de résolution est répartie au sein du domaine au lieu d'être concentrée le long des frontières des macroéléments. Cependant, il n'est pas possible d'infirmer ou de confirmer cette hypothèse, faute de simulations ou d'expérimentations de référence à l'heure actuelle.

Éléments Finis :  $\rho = 0$ 

	$D_{..m}^*$	$D_{..p}^*$
$D_{x..}^*$	2074.3	2086.3
$D_{y..}^*$	2075.0	2063.8
$D_{z..}^*$	2073.7	2044.9

Galerkin discontinue :  $\rho = 0$ 

	$D_{..m}^*$	$D_{..p}^*$
$D_{x..}^*$	1913.6	1924.7
$D_{y..}^*$	1787.0	1779.9
$D_{z..}^*$	1703.7	1689.2

Éléments Finis :  $\rho = 0.1$ 

	$D_{..m}^*$	$D_{..p}^*$
$D_{x..}^*$	2119.9	2117.2
$D_{y..}^*$	2127.6	2122.9
$D_{z..}^*$	2121.8	2111.9

Galerkin discontinue,  $\rho = 0.1$ 

	$D_{..m}^*$	$D_{..p}^*$
$D_{x..}^*$	2080.3	2070.5
$D_{y..}^*$	1814.0	1822.6
$D_{z..}^*$	1803.6	1805.7

TABLE 7.4 – Exemple 7.6 : diffusivités équivalentes  $D^*$  calculées selon les deux directions des trois axes de l'espace. Les valeurs sont exprimées en  $\mu\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ .