



HAL
open science

Modélisation numérique des matériaux hétérogènes : Applications aux matériaux à matrice cimentaire

Jean-Baptiste Colliat

► **To cite this version:**

Jean-Baptiste Colliat. Modélisation numérique des matériaux hétérogènes : Applications aux matériaux à matrice cimentaire. Sciences de l'ingénieur [physics]. École normale supérieure de Cachan - ENS Cachan, 2010. tel-00556998

HAL Id: tel-00556998

<https://theses.hal.science/tel-00556998v1>

Submitted on 18 Jan 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES DE L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE DE CACHAN

Domaine :

MÉCANIQUE, GÉNIE MÉCANIQUE, GÉNIE CIVIL

Présentée à l'École Normale Supérieure de Cachan

par **Jean-Baptiste COLLIAT**

Modélisation numérique des matériaux hétérogènes : Applications aux matériaux à matrice cimentaire

Soutenue le 25 octobre 2010,
devant le jury composé de MM. :

Patrice HAMELIN	Université Claude Bernard Lyon 1	Président
Frédéric FEYEL	ONERA Châtillon	Rapporteur
Karam SAB	ENPC ParisTech	Rapporteur
Alain SELLIER	INSA Toulouse	Rapporteur
Jean-Michel TORRENTI	LCPC Paris	Examineur
Luc DAVENNE	Université Paris Ouest	Examineur
Adnan IBRAHIMBEGOVIC	ENS de Cachan	Examineur

LMT-Cachan

ENS Cachan/CNRS/UPMC/PRES UniverSud Paris
61 avenue du Président Wilson 94235 CACHAN FRANCE

Table des matières

Avant-propos et remerciements	1
Introduction et enjeux	5
1 Modélisation des matériaux hétérogènes	9
1.1 Problématiques liées au maillage Eléments Finis	10
1.1.1 Représentation explicite des différentes phases par des maillages non-adaptés	11
1.1.2 Modélisation du comportement des interfaces	12
1.2 Enrichissements cinématiques : les méthodes EFEM	13
1.2.1 Principes et mise en œuvre : la méthode des Modes Incompatibles	14
1.2.2 Condensation statique	15
1.2.3 Comparaison entre les méthodes XFEM et EFEM	18
1.3 Mise en œuvre dans le cadre d’un treillis spatial	19
1.3.1 Treillis spatial et pavage de Voronoi	19
1.3.2 Hétérogénéités et discontinuités « faibles »	20
1.3.3 Confrontation avec les bornes du premier ordre en homogénéisation linéaire	22
1.3.4 Représentation de la fissuration et discontinuités « fortes »	24
1.3.5 Réponses à des trajets de chargements macroscopiques	29
1.4 Application aux systèmes ETICS	32
1.5 Conclusions et perspectives	34
2 Stratégies de modélisation multi-niveaux	37
2.1 Mise en œuvre d’une approche intégrée	40
2.1.1 Approche à trois champs : multiplicateurs de Lagrange localisés	40
2.1.2 L’architecture MuSCAd	43
2.1.3 Application aux matériaux hétérogènes	44
2.1.4 Perspectives pour les approches intégrées	48
2.2 Conclusions pour les approches multi-échelles numériques	49

3	Aspects probabilistes	51
3.1	Méthodes d'intégration stochastique	53
3.1.1	Méthodes d'intégration directes	53
3.1.2	Méthodes d'intégration indirectes	54
3.2	Mise en données probabilistes	57
3.2.1	Champs aléatoires	59
3.2.2	Décomposition de Karhunen–Loève	61
3.3	Aspects expérimentaux	63
3.3.1	Acquisition de données concernant la cinétique de lixiviation des bétons	64
3.3.2	Identification inverse d'un modèle simplifié de dégradation	66
3.3.3	Mises en œuvre pour la prévision de durées de vie	71
3.4	Perspectives : morphologie	75
3.5	Conclusions	83
4	Programmation Orientée Composant	85
4.1	Principes de la POC	86
4.1.1	La POC comme une extension de la Programmation Orientée Objet	86
4.1.2	Le middleware CTL	87
4.2	Exemple d'un composant EF : coFeap	88
4.3	Exemples de couplages « faibles »	92
4.4	Exemples de couplages « forts »	95
4.4.1	Problèmes d'interaction fluide–structure	96
4.4.2	Transferts dans les milieux fissurés	97
4.5	Conclusions et perspectives autour de la POC	103
	Conclusions	105
	Bibliographie	108

Avant-propos et remerciements

Ce document constitue la synthèse des travaux de recherches effectués pendant les six années suivant mon doctorat — de 2004 à 2009 — et de quelques thématiques ayant pris naissance pendant la première moitié de l'année 2010. Ces travaux ont été principalement effectués au sein du secteur Génie Civil et Environnement du LMT–Cachan et impliquent de nombreux doctorants, stagiaires et partenaires industriels, ainsi que d'autres enseignants–chercheurs du laboratoire.

Afin de mettre en avant la démarche générale qui sous-tend ce travail et la cohérence des différents développements menés au cours de ces années, j'ai choisi de les mettre en forme au travers d'un manuscrit original. Celui-ci permet également de présenter au lecteur des notations uniformisées et d'avoir ainsi une vision plus synthétique.

Mes remerciements vont en premier lieu au Professeur Patrice Hamelin, président de mon jury, ainsi qu'à MM. les Professeurs Frédéric Feyel, Karam Sab et Alain Sellier pour avoir tous les trois accepté la lourde tâche de rapporteur. Je tiens également à exprimer toute ma gratitude aux trois personnes m'ayant offert la possibilité de co-encadrer une partie des travaux de doctorat qu'ils ont dirigés durant ces six années : MM. les Professeurs Adnan Ibrahimbegovic, Hermann Matthies et Jean-Michel Torrenti. Travailler avec chacun d'eux a été pour moi une indéniable source d'enrichissement scientifique et personnel et je les en remercie.

Ma reconnaissance se porte bien entendu également vers ceux qui sont les principaux acteurs des travaux synthétisés ici, c'est-à-dire les doctorants : Thomas de Larrard, Mehdi Asali, Nathan Benkemoun, Martin Hautefeuille, Xavier Jourdain, Emmanuel Roubin, Christophe Kassiotis, Mohamad Al Shaama et Sergiy Melnyk. Partager leurs travaux de thèse et les difficultés associées au quotidien a été une tâche qui s'est parfois révélée plus ardue et plus prenante que je ne l'aurais imaginé. Ce fut néanmoins le plus souvent l'occasion de nombreuses séances de travail qui, je l'espère, resteront dans leur mémoire comme dans la mienne, passionnantes.

Je souhaite également remercier mes collègues enseignants–chercheurs du LMT, avec lesquels j'ai pu tisser de nombreux liens scientifiques et d'amitié : Caroline De Sa, Farid Benboudjema, Fabrice Gatingt, Luc Davenne.

Enfin, ces remerciements seraient très certainement incomplets si j'oubliais l'essentiel, à savoir le soutien constant apporté par Dorothée. Son aide durant les quelques mois qui ont amené à cette synthèse a été des plus précieuses.

« *Prédire n'est pas expliquer* »
René Thom

Introduction et enjeux

La modélisation numérique occupe aujourd’hui une place ambiguë dans le domaine du Génie Civil. Au vu des enjeux considérables et parallèlement aux évolutions techniques, la profession a cherché très tôt à mettre en place des cadres réglementaires définissant la conception et le calcul des ouvrages. Pour les structures en béton armé, c’est dès le début du XX^e siècle que les premières règles ont vu le jour (circulaire du 20 octobre 1906, basée sur le concept de contraintes admissibles [Delhumeau, 1999]). Celles-ci seront suivies par de nombreuses autres — Règles BA45, BA60, BA68 puis BAEL80 et BAEL91 — dont les objectifs sont invariablement de proposer un cadre commun de vérification d’une structure en béton armé. Leurs fondements scientifiques sont majoritairement issus de la « Résistance des Matériaux » (nous dirions aujourd’hui de la « Mécanique des Structures »). Bien qu’il n’existe *a priori* pas d’incompatibilité entre ces approches réglementaires et la simulation numérique, seule l’apparition et la mise en place progressive des Eurocodes dans la dernière décennie permettent aux calculs par Éléments Finis de trouver aujourd’hui une place. Ceci est particulièrement vrai pour les ouvrages « exceptionnels » et ceux soumis à des sollicitations transitoires. Pour les ouvrages classiques, les méthodes de calculs traditionnelles sont majoritaires et l’enjeu apparaît donc ici clairement au travers du développement et de la mise en place de modèles de comportement macroscopiques suffisamment prédictifs pour être acceptés par les concepteurs.

Cette problématique est d’une grande importance car le comportement, à l’échelle macroscopique, des matériaux à base cimentaire est évidemment complexe et les modèles phénoménologiques mis sur pied de plus en plus spécifiques et délicats à identifier. Cette complexité croissante des modèles macroscopiques conduit donc à se poser la question du choix des échelles. Pour les matériaux cimentaires, comme pour de nombreux autres, il apparaît clairement que les phénomènes de dégradation ou les évolutions mécaniques — comme par exemple la fissuration et le fluage — observés à l’échelle de la structure, trouvent leur origine à de petites (voire très petites) échelles. Ainsi la question de l’identification et de la modélisation des mécanismes locaux de dégradation les plus essentiels est cruciale pour comprendre et construire, à l’échelle du VER, des modèles prédictifs et robustes. La modélisation multi-échelles prend alors tout son sens, aussi bien dans cette étape de compréhension et de sélection des phénomènes pertinents que dans le transfert d’informations des petites échelles vers les plus grandes.

C'est principalement autour de cette thématique que les travaux synthétisés ici sont axés. Bien que, pour les matériaux cimentaires, de nombreux phénomènes prennent naissance à des échelles très fines — micro voire nanométriques — notre démarche a pris pour base une échelle intermédiaire, que nous nommerons mesoscopique. A cette échelle les matériaux cimentaires comme le béton sont déjà clairement hétérogènes. La prise en compte explicite de cette hétérogénéité constitue à la fois une difficulté pour le modélisateur et l'opportunité de pouvoir représenter des mécanismes de dégradation clairement établis, dans chacune des phases ou bien aux différentes interfaces. Ces dernières ayant un rôle important dans les phénomènes observés, les avantages d'une approche non homogénéisée sont donc clairs.

Le premier chapitre de ce document présente donc les développements effectués à ce titre au cours des thèses de Sergiy Melnyk [Melnyk, 2006] et de Nathan Benkemoun [Benkemoun, 2010]. Ceux-ci s'appuient principalement sur la notion de maillages non adaptés et nous montrons, à cette occasion, comment les enrichissements cinématiques peuvent permettre de répondre à de nombreuses problématiques liées aux matériaux hétérogènes et leur modélisation par Eléments Finis. Nous insistons en particulier sur la modélisation de la fissuration au travers de discontinuités fortes et mettons en avant leurs avantages sur les approches plus classiquement retenues dans le cadre de modèles phénoménologiques macroscopiques. Finalement, sur la base d'une méthode multi-échelles séquencée et d'un treillis spatial enrichi, nous montrons comment l'introduction de mécanismes très simples de dégradation locale peut conduire à des réponses macroscopiques complexes et notamment à la « construction » de surfaces de rupture multi-dimensionnelles pour les bétons. Nous présentons également un exemple, en collaboration avec Saint-Gobain Recherche, ayant trait à la modélisation de mortiers renforcés par des grilles en fibres de verre.

Les méthodes multi-échelles séquencées, bien que très utilisées au sein de notre démarche, ne permettent d'envisager, par construction, qu'un nombre limité de trajets de chargement macroscopiques. Le deuxième chapitre se concentre ainsi sur les méthodes numériques relatives aux calculs à plusieurs échelles et en particulier sur les méthodes intégrées [Feyel and Chaboche, 2001]. Celles-ci ont pour objectif de mettre en place un couplage fort entre deux échelles en leur transférant les informations pertinentes. Parmi l'ensemble des méthodes ainsi décrites dans la littérature, le travail de thèse de Martin Hautefeuille [Hautefeuille, 2009] s'est porté sur une formulation à trois champs basée sur les Multiplicateurs de Lagrange Localisés [Park et al., 2000]. Nous décrivons la formulation adoptée ainsi que les principaux intérêts associés, notamment au travers de l'emploi de solveurs directs à toutes les échelles.

En lien avec l'évolution réglementaire évoquée ci-dessus, la prise en compte des différentes variabilités inhérentes aux matériaux hétérogènes est un point majeur dans la démarche de conception d'une structure de Génie Civil, souvent vue comme

un prototype. Ainsi, les sources d'incertitudes sont telles que les modélisateurs ne peuvent aujourd'hui se contenter d'analyses déterministes, même pour des comportements linéaires. Ils se doivent d'adopter une approche performantielle et ainsi de fournir une estimation du risque associé au non respect, par une structure donnée, d'une exigence de fonctionnement. Ce type d'approches constitue la base des groupes de travail formés autour du projet ANR Applet. A l'échelle fine, la variabilité est inhérente au caractère hétérogène des matériaux cimentaires et conduit à une définition du Volume Élémentaire Représentatif. Cette notion est fondamentale pour les modèles macroscopiques dans la mesure où les maillages EF, adoptés en calcul de structures, définissent des éléments parfois plus petits que ce volume. La prise en compte de la variabilité des paramètres de ces modèles est donc souvent inévitable. A l'échelle d'une structure en béton, les process de mise en œuvre ainsi que les conditions environnementales conduisent également à de nombreuses incertitudes spatiales, mais dont la longueur de corrélation est d'un ordre de grandeur métrique. Les aspects probabilistes font ainsi partie intégrante de notre démarche, notamment au travers de la thèse de Thomas de Larrard [de Larrard, 2010] en collaboration avec l'IRSN, et sont présentés dans le chapitre 3. Au delà du cadre probabiliste, nous commençons par décrire la résolution des problèmes stochastiques au travers de méthodes d'intégration stochastique directe et indirecte. Puis nous insistons sur la mise en données probabiliste qui constitue, de notre point de vue, le point essentiel de la démarche de modélisation. Nous montrons comment les champs aléatoires permettent de répondre de manière très satisfaisante à la modélisation des variabilités décrites ci-dessus. Leur utilisation pratique est rendue possible par la décomposition de Karhunen-Loève et nous mettons en avant cet outil. Finalement nous établissons un lien possible entre les aspects expérimentaux et les modèles macroscopiques en insistant sur l'identification de ces derniers.

Le dernier chapitre de ce document est enfin l'occasion de présenter la Programmation Orientée Composant (POC) et les compétences acquises dans l'équipe au travers de notre collaboration avec l'équipe du Pr. Matthias à la TU Braunschweig en Allemagne. Parmi ses nombreux attraits et sur un plan purement logiciel, la POC a notamment permis la stabilisation et la pérennisation de la majeure partie des développements effectués ici. Elle constitue donc un point majeur de notre démarche, bien que plus abstrait et plus éloigné de la modélisation des matériaux hétérogènes. Nous montrons que cet éloignement n'est qu'apparent au travers d'exemples de mise en œuvre d'architectures adaptées à la résolution de problèmes multi-physiques couplés pour les matériaux cimentaires. Ces problèmes sont principalement basés sur des méthodes multi-échelles séquencées ainsi que sur le modèle mécanique à l'échelle mesoscopique décrit dans le premier chapitre. Nous avons retenu des cas de couplages « faibles » et « forts » pour lesquels une indépendance totale, en termes de logiciels et de discrétisations est supposée ainsi que des applications à diverses problématiques industrielles.

Chapitre 1

Modélisation des matériaux hétérogènes : Développement d'une stratégie de modélisation multi-phasiq

Contents

1.1	Problématiques liées au maillage Eléments Finis	8
1.1.1	Représentation explicite des différentes phases par des maillages non-adaptés	9
1.1.2	Modélisation du comportement des interfaces	10
1.2	Enrichissements cinématiques : les méthodes EFEM	11
1.2.1	Principes et mise en œuvre : la méthode des Modes Incompatibles	12
1.2.2	Condensation statique	13
1.2.3	Comparaison entre les méthodes XFEM et EFEM	16
1.3	Mise en œuvre dans le cadre d'un treillis spatial	17
1.3.1	Treillis spatial et pavage de Voronoi	17
1.3.2	Hétérogénéités et discontinuités faibles	18
1.3.3	Confrontation avec les bornes du premier ordre en homogénéisation linéaire	20
1.3.4	Représentation de la fissuration et discontinuités fortes	22
1.3.5	Réponses à des trajets de chargements macroscopiques	27
1.4	Application aux systèmes ETICS	31
1.5	Conclusions et perspectives	32

Une grande partie des travaux présentés dans ce document de synthèse a pour objet la modélisation numérique de matériaux en considérant une échelle à laquelle les hétérogénéités sont fortement présentes. Les enjeux sont donc ici relatifs, aussi bien à la représentation explicite de ces hétérogénéités — au sein d’un maillage Eléments Finis — qu’à la modélisation des mécanismes de dégradation à l’échelle fine. Au vu de l’échelle choisie, il s’agit en effet de décrire ces derniers de manière simple, pour chacune des phases et des interfaces en présence. L’objectif de ce premier chapitre est donc de présenter les développements effectués, principalement à l’occasion des thèses de Sergiy Melnyk [Melnyk, 2006] et de Nathan Benkemoun [Benkemoun, 2010], pour répondre à ces deux problématiques majeures. Nous commençons par mettre en avant les intérêts liés à la mise en œuvre de maillages EF non adaptés au travers d’enrichissements cinématiques « faibles ». Puis nous présentons la voie d’enrichissement retenue et insistons sur son caractère local. Nous montrons comment ces enrichissements permettent de répondre de manière très cohérente à un enjeu majeur de la simulation numérique en mécanique du solide, à savoir la représentation de la fissuration. Enfin, nous présentons le caractère prédictif de la démarche présentée et comment l’introduction de mécanismes simples à une échelle fine peut conduire à une réponse complexe à l’échelle supérieure.

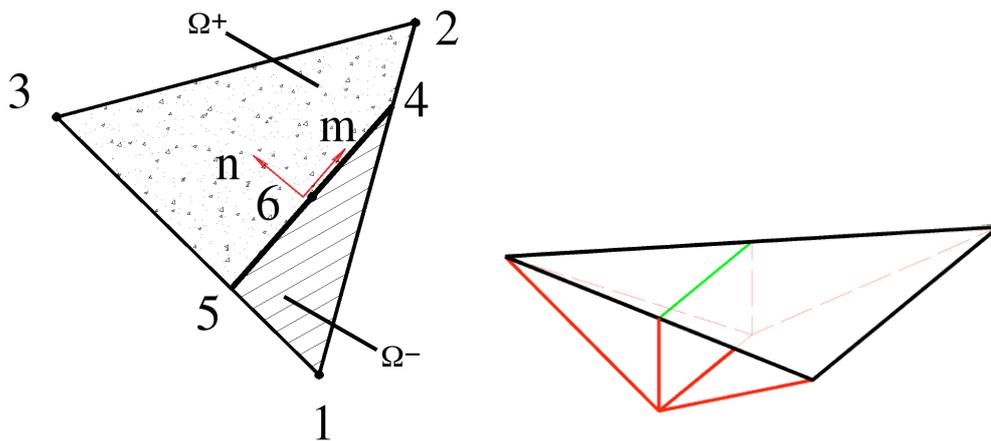
1.1 Problématiques liées au maillage Eléments Finis

A une échelle dite mesoscopique, la modélisation des matériaux hétérogènes par des méthodes numériques s’appuyant sur un maillage spatial — telles que la méthode des Eléments Finis — est confrontée à une problématique fondamentale qui est celle de la réalisation de ce maillage. Face à ce problème, l’approche la plus naturelle consiste à traiter en premier les interfaces entre les différentes hétérogénéités (c’est-à-dire mailler des surfaces pour un problème tri-dimensionnel) et, par la suite, les domaines « homogènes » correspondant aux différentes phases. Bien que de nombreux efforts aient été faits depuis deux décennies dans le but d’améliorer ces algorithmes, les temps de maillage sont de l’ordre de plusieurs heures pour 10^6 nœuds — package sous license LGPL Netgen [Schöberl, 2010] notamment présent dans le logiciel Gmsh [Geuzaine and Remacle, 2010]. Ils sont donc, par exemple, largement incompatibles avec une analyse probabiliste si celle-ci a pour but de considérer la variabilité géométrique. De plus, il est assez difficile de prendre en compte des comportements d’interface avec ces maillages, sans mettre en œuvre des techniques complexes telles que l’ajout d’éléments à épaisseur nulle suivant des surfaces données. Ces deux problématiques sont à la base de notre travail autour du développement des maillages non-adaptés.

1.1.1 Représentation explicite des différentes phases par des maillages non-adaptés

Les maillages dits « non-adaptés » ont pour caractéristique principale un positionnement des nœuds de façon totalement indépendante des interfaces entre les phases matérielles. Ainsi il n'est pas nécessaire de repositionner ces nœuds lorsque la géométrie — formes et positions des hétérogénéités — est modifiée. Cet aspect est un avantage majeur vers des études numériques probabilistes avec des matériaux dont la géométrie à l'échelle fine n'est pas maîtrisée — ce qui est le cas pour les matériaux cimentaires. En contrepartie, de nombreux éléments du maillage — potentiellement la totalité — sont, pour une géométrie donnée, coupés en deux parties par une interface physique. Chacun des sous-domaines ainsi définis est alors inclus dans une phase matérielle dont les propriétés sont supposées connues et différentes des phases avoisinantes. Afin de permettre à ces éléments de représenter ce contraste de propriétés, il est nécessaire d'enrichir leur cinématique par l'ajout de discontinuités dans leur champ de déformation — discontinuités dites « faibles ».

En premier lieu, ce travail d'enrichissement a été entrepris dans la thèse de Sergiy Melnyk à partir d'éléments bi-dimensionnels CST (« Constant Strain Triangle ») [Melnyk, 2006], [Hautefeuille et al., 2009]. La figure 1.1(a) montre un élément de ce type coupé par une interface matérielle et définissant ainsi deux domaines distincts Ω^- et Ω^+ . On peut également voir la fonction d'enrichissement cinématique choisie (Fig. 1.1(b)). En plus des fonctions de forme classiques d'un CST — qui conduisent à la représentation d'un champ de déformation constant au sein de l'élément — cette fonction d'enrichissement permet la représentation d'un champ de déformation constant par sous-domaine mais discontinu au niveau de l'interface.



(a) CST coupé par une interface physique (b) Enrichissement cinématique « faible »

FIGURE 1.1 – Élément CST bi-phasique et fonction d'enrichissement cinématique « faible » associée, d'après [Melnyk, 2006]

Cette même idée a été reprise dans les travaux de Nathan Benkemoun où une

implémentation performante de cet enrichissement a été effectuée pour un élément fini uni-dimensionnel. Ce dernier permet la représentation de matériaux hétérogènes tri-dimensionnels par l'intermédiaire d'un treillis spatial. Dans le cas d'un matériau bi-phasique de type matrice-inclusions, trois types d'éléments sont alors présents : ceux non coupés par une interface physique et donc entièrement compris dans une des deux phases, et ceux coupés. Seuls ces derniers possèdent une cinématique faible enrichie et le processus de maillage ou de re-maillage consiste donc simplement à déterminer ce dernier ensemble d'éléments. Cette opération peut se faire à faible coût et est linéaire avec le nombre d'inclusions — dans ces premiers exemples des sphères — placées dans la matrice. La figure 1.2 illustre schématiquement le principe d'un treillis avec un maillage non-adapté et les éléments coupés.

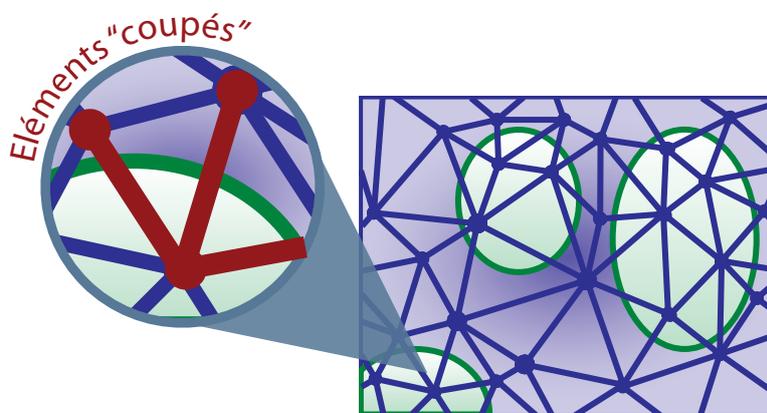


FIGURE 1.2 – Schématisation de l'ajout d'inclusions dans une matrice : éléments uni-dimensionnels d'un treillis coupés par une interface physique

Cette méthodologie conjuguant maillages non-adaptés et treillis spatiaux permet de modéliser des formes tridimensionnelles quelconques. Les figures 1.5 montrent quelques exemples de maillages couramment utilisés dans les travaux décrits ici. La taille minimale des inclusions représentables est bien entendu directement liée à la finesse du maillage. Pour les applications aux matériaux cimentaires de type « béton », il est actuellement possible de représenter des granulats d'une taille minimale de 2 mm à l'échelle d'une éprouvette 11×22 ou d'un cube de 10^{-3} m^3 . Cette limitation actuelle est bien évidemment amenée à évoluer, notamment dans le cadre des méthodes multi-niveaux intégrées décrites dans le chapitre 2 de ce document.

1.1.2 Modélisation du comportement des interfaces

Le comportement des interfaces influe fortement sur la réponse macroscopique ou structurelle d'un composite — le béton armé est, en Génie Civil, un exemple canonique de cet aspect — ou de tout matériau hétérogène en général. A une échelle « fine », la modélisation de ce comportement constitue donc un point clé et la principale difficulté est liée, pour un problème dans \mathbb{R}^n , à la dimension $n-1$ de ces surfaces.

Dans une optique de maillage adapté, voie la plus classique pour un modèle Eléments Finis, il est donc nécessaire de rechercher la position de ces interfaces et de positionner des éléments à épaisseur nulle, parfois appelées « zones cohésives » [Barenblatt, 1962].

La deuxième difficulté a trait, pour un problème mécanique, à la modélisation d'une interface « parfaite » entre deux phases, c'est-à-dire parfaitement rigide. Les éléments d'interface couramment utilisés ne permettent pas de modéliser naturellement ce type de comportement mécanique, qu'ils soient formulés en termes de raideurs — normale et tangentielles — ou de module équivalent. Même si des valeurs importantes peuvent être choisies pour ces quantités, l'introduction d'éléments rigides dans un modèle Eléments Finis n'est pas triviale [Zienkiewicz and Taylor, 2001a].

L'approche des maillages non-adaptés permet de répondre de façon simple et conjointe aux deux problématiques ci-dessus. Le processus de maillage constitue, en lui-même, une opération de recherche de la position des interfaces — afin de dénombrer les éléments coupés — et l'ajout de discontinuités de déformations assurent un comportement de type « interface parfaite ».

1.2 Enrichissements cinématiques : les méthodes EFEM

Les enrichissements cinématiques constituent la clé de voûte du modèle mesoscopique présenté dans ce premier chapitre. Originellement développés pour répondre aux problèmes posés par la modélisation de la fissuration dans les modèles Eléments Finis, nous avons vu que cette voie est également avantageuse dans le cadre de la prise en compte explicite d'hétérogénéités.

Les méthodes de mise en œuvre pratique des enrichissements de la cinématique dans un modèle Eléments Finis peuvent classées en deux grandes catégories. Les approches globales d'une part, sont essentiellement basées sur le concept de Partition de l'Unité. L'enrichissement se traduit par l'ajout de fonctions d'interpolation et donc par un ajout d'inconnues et d'équations globales. Les méthodes XFEM — eXtended Finite Element Method [Moës et al., 1999] — se positionnent dans cette première catégorie et ont par exemple permis de décrire des arrangements tri-dimensionnels de sphères non-recouvrantes [Moës et al., 2003]. Ces mêmes enrichissements peuvent être implémentés, d'autre part, d'un point de vue uniquement local, conduisant à la famille de méthodes dites EFEM — Enhanced Finite Element Method [Simo et al., 1993]. Également développées à l'origine pour répondre aux problèmes posés par la représentation de la fissuration — notamment la localisation numérique induite par l'utilisation de lois adoucissantes — ces approches se traduisent par un enrichissement des fonctions locales de chaque élément. Chacune de ces fonctions ajoutées conduit à une inconnue et une équation supplémentaire. Le caractère local de ces dernières permet de les condenser au niveau global, préservant

ainsi la taille du problème discret assemblé. Au sein de cette deuxième famille de méthodes d'enrichissement, la Méthode des Modes Incompatibles a été ici privilégiée [Ibrahimbegović and Wilson, 1991] et nous la présentons en détails dans ce qui suit.

1.2.1 Principes et mise en œuvre : la méthode des Modes Incompatibles

Le cadre théorique de la Méthode des Modes Incompatibles est celui de la formulation mixte à trois champs de Hu-Washizu [Washizu, 1982]. Pour cette dernière l'énergie potentielle peut se mettre sous la forme :

$$\Pi_{HW}(u, \varepsilon, \sigma) = \int_{\Omega} \Psi(\varepsilon) \, d\Omega - \int_{\Omega} \sigma \cdot (\varepsilon - \nabla^s u) \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_{vN}} u \cdot \bar{t} \, dS \quad (1.1)$$

Suivant le principe de base des méthodes EFEM [Simo and Rifai, 1990], le champ de déformation ε peut être enrichi sous la forme $\varepsilon = \nabla^s u + \tilde{\varepsilon}$. On obtient ainsi une expression dépendant du champ de déplacements u , de l'enrichissement $\tilde{\varepsilon}$ et du champ de contraintes σ :

$$\Pi_{HW}(u, \tilde{\varepsilon}, \sigma) = \int_{\Omega} \Psi(\nabla^s u + \tilde{\varepsilon}) \, d\Omega - \int_{\Omega} \sigma \cdot \tilde{\varepsilon} \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_{vN}} u \cdot \bar{t} \, dS \quad (1.2)$$

La stationnarité de Π_{HW} conduit à la formulation à trois champs du problème mécanique enrichi :

Etant donné : $\bar{t} : \partial\Omega_{vN} \rightarrow \mathbb{R}$
 Quels que soient : $\delta u \in \mathbb{U}_0$, $\delta \tilde{\varepsilon} \in L_2(\Omega)$ et $\delta \sigma \in L_2(\Omega)$
 Trouver : $u \in \mathbb{U}$, $\tilde{\varepsilon} \in L_2(\Omega)$ et $\sigma \in L_2(\Omega)$
 Tels que :

$$\begin{aligned}
 0 = & \int_{\Omega} \nabla^s \delta u \cdot \partial_{\varepsilon} \Psi \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_{vN}} \delta u \cdot \bar{t} \, dS \\
 & + \int_{\Omega} \delta \tilde{\varepsilon} \cdot (\partial_{\varepsilon} \Psi - \sigma) \, d\Omega - \int_{\Omega} \delta \sigma \cdot \tilde{\varepsilon} \, d\Omega
 \end{aligned} \quad (1.3)$$

Une discrétisation spatiale à support compact pour chacun de ces champs (1.4) peut être définie. La Méthode des Modes Incompatibles — elle en tire son nom — assure, pour le champ de déformations enrichies, une base de fonctions orthogonales dans $L_2(\Omega)$ à la base choisie pour l'interpolation du champ de contraintes.

$$\nabla^s u^h = B^T \cdot U \quad (1.4a)$$

$$\tilde{\varepsilon}^h = G^T \cdot v \quad (1.4b)$$

$$\sigma^h = P^T \cdot s \quad (1.4c)$$

Ce type d'interpolation conduit à deux groupes d'équations — potentiellement non-linéaires — à résoudre que nous regroupons ici sous la forme d'un vecteur d'équations aux résidus \mathbf{r} . D'une part, un ensemble d'équations globales couplées \mathbf{r}_{EF} issues de l'opération « d'assemblage EF » ; d'autre part un ensemble d'équations locales découplées r_e associées à chacun des nouveaux paramètres de modes incompatibles introduits dans (1.4)b sous la forme d'un vecteur \mathbf{v} . Ces paramètres constituent les nouvelles inconnues associées à l'enrichissement de la cinématique et portent ainsi une signification physique le plus souvent clairement établie — par exemple les ouvertures de fissures dans le cas des discontinuités fortes décrites au §1.3.4.

$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_{EF} \\ [r_e]_e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \int_{\Omega} B \cdot \partial_{\varepsilon} \Psi \, d\Omega - \int_{\partial\Omega_{v,N}} N \cdot \bar{\mathbf{t}} \, dS \\ \left[\int_{\Omega} G^e \cdot \partial_{\varepsilon^e} \Psi \, d\Omega \right]_e \end{bmatrix} \quad (1.5)$$

Il est à noter que, dans (1.5), le champ de contraintes σ n'apparaît pas de manière explicite. C'est dans une phase de post-traitement que la Méthode des Modes Incompatibles proposait originellement de le calculer. De façon plus intéressante, [Ibrahimbegović and Wilson, 1991] ont proposé d'interpoler σ par des fonctions de base constantes par élément. Ce choix permet de fait à l'élément ainsi enrichi de satisfaire aux conditions connues sous le nom de « patch test » et conduit à la modification de chaque mode incompatible de la façon suivante :

$$\int_{\Omega} G^e \, d\Omega = 0 \quad (1.6)$$

Le point clé de la Méthode des Modes Incompatibles réside dans le caractère local et donc découplé des équations r_e . Même dans un cas non-linéaire, leur résolution peut se faire à très faible coût et les paramètres de mode incompatible ainsi déterminés sont facilement condensables au niveau global. Afin de mettre en avant ce point nous reformulons dans ce qui suit les aspects essentiels de cette opération de condensation statique.

1.2.2 Condensation statique

La condensation statique [Wilson, 1974] est une opération essentielle au sein des méthodes de calcul par Éléments Finis. Le couplage entre les deux échelles — globale assemblée et locale — élémentaire — se fait ainsi à inconnues globales fixes, dans l'esprit des « operator split methods » c'est-à-dire des schémas de résolution partitionnés. Ce type de démarche est d'une grande généralité et nous la retrouvons à la fois dans les méthodes EFEM qui font l'objet de cette partie mais également pour la résolution de problèmes multi-physiques (voir le chapitre 4). Afin de conserver cette généralité nous décrivons ici une formulation abstraite d'un problème couplé.

Le vecteur d'équations aux résidus considéré est $\mathbf{r} = [r_1, r_2, \dots, r_n]$ et les inconnues $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ telles que :

$$\begin{bmatrix} r_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ r_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ r_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (1.7)$$

Dans le système (1.7), chaque équation est potentiellement non-linéaire pour chaque variable x_i .

L'algorithme de Newton-Raphson constitue une des voies les plus classiques pour résoudre le système (1.7). Il consiste à le traiter de façon monolithique en le linéarisant au premier ordre,

$$\text{LIN} \begin{bmatrix} r_1(x_1, x_2) \\ r_2(x_1, x_2) \end{bmatrix}^{(k+1)} \approx \begin{bmatrix} r_1(x_1, x_2) \\ r_2(x_1, x_2) \end{bmatrix}^{(k)} + \begin{bmatrix} \partial_{x_1} r_1 & \partial_{x_2} r_1 \\ \partial_{x_1} r_2 & \partial_{x_2} r_2 \end{bmatrix}^{(k)} \cdot \begin{bmatrix} \delta x_1 \\ \delta x_2 \end{bmatrix}^{(k+1)} \quad (1.8)$$

ce qui permet d'aboutir à un système d'équations linéaires (1.9). La résolution de ce système — qui est généralement l'étape la plus coûteuse — permet d'obtenir un incrément $\delta \mathbf{x} = [\delta x_1, \delta x_2]$, mettant à jour la solution à l'itération k .

$$\begin{bmatrix} \partial_{x_1} r_1 & \partial_{x_2} r_1 \\ \partial_{x_1} r_2 & \partial_{x_2} r_2 \end{bmatrix}^{(k)} \cdot \begin{bmatrix} \delta x_1 \\ \delta x_2 \end{bmatrix}^{(k+1)} = - \begin{bmatrix} r_1(x_1, x_2) \\ r_2(x_1, x_2) \end{bmatrix}^{(k)} \quad (1.9)$$

La procédure s'achève lorsque un critère de convergence est satisfait à une tolérance près. Une norme en énergie est le plus souvent employée, sous la forme :

$$t_E^{(k+1)} = \frac{\langle \mathbf{r}^{(k)}, \delta \mathbf{x}^{(k+1)} \rangle_2}{\langle \mathbf{r}^{(0)}, \delta \mathbf{x}^{(1)} \rangle_2} \quad (1.10)$$

Une itération se décompose en quatre étapes : le calcul de la matrice jacobienne — ou matrice tangente —, l'évaluation du vecteur résidu, la résolution du système linéaire d'équations et la mise à jour des inconnues. Ces quatre étapes sont respectivement dénommées par TANG, FORM, SOLV et UPDT dans l'algorithme Alg.1. Ces mots-clé ont été choisis car ils correspondent aux macro-commandes du code de calcul Feap et, par la suite, à l'ensemble minimal de méthodes publiques qu'un composant « Élément Finis » doit proposer dans son interface. Cet aspect est développé en lien avec les aspects logiciels et la Programmation Orientée Composant dans le chapitre 4 de ce travail.

Même pour les cas où il est possible de l'utiliser, l'algorithme de Newton-Raphson — et la majeure partie des approches monolithiques — n'est que peu souvent le plus intéressant. Les schémas partitionnés sont, de manière générale, plus souhaitables — nous revenons sur ce point dans le chapitre 4 — pour le système (1.9), introduisant ainsi l'opération de condensation statique. La procédure peut se formaliser en trois étapes :

Algorithme 1 Algorithme de Newton-Raphson, d'après [Hautefeuille, 2009]

```

1: tantque  $t_E^{(k+1)} > \text{tol}$  et  $k < k_{max}$  faire
2:   TANG :  $\mathbf{K}^{(k)} = \begin{bmatrix} \partial_{x_1} r_1 & \partial_{x_2} r_1 \\ \partial_{x_1} r_2 & \partial_{x_2} r_2 \end{bmatrix}^{(k)}$ 
3:   FORM :  $\begin{bmatrix} r_1(x_1, x_2) \\ r_2(x_1, x_2) \end{bmatrix}^{(k)}$ 
4:   SOLV :  $\mathbf{K}^{(k)} \delta \mathbf{x}^{(k)} = -\mathbf{r}^{(k)}$ 
5:   UPDT :  $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \delta \mathbf{x}^{(k+1)}$ 
6:    $k++$ 
7: fin tantque
  
```

- Annulation du résidu $r_1^{(k)}$ par un schéma de Newton pour la première partition en supposant $\delta x_2^{(k+1)} = 0$:

$$\partial_{x_1} r_1^{(k)} \cdot \delta x_1^{(k+1)} = -r_1^{(k)} \quad (1.11)$$

- Condensation des inconnues δx_1 du système obtenu (1.12) :

$$\begin{bmatrix} \partial_{x_1} r_1 & \partial_{x_2} r_1^{(k)} \\ \partial_{x_1} r_2 & \partial_{x_2} r_2^{(k)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \delta x_1 \\ \delta x_2^{(k+1)} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 0 \\ r_2^{(k)} \end{bmatrix} \quad (1.12)$$

- Résolution du système condensé (1.13) :

$$\left[\partial_{x_2} r_2^{(k)} - \partial_{x_1} r_2 \cdot \left[\partial_{x_1} r_1^{(k)} \right]^{-1} \cdot \partial_{x_2} r_1^{(k)} \right] \cdot \delta x_2^{(k+1)} = -r_2^{(k)} \quad (1.13)$$

Ce schéma de résolution est détaillé dans l'algorithme Alg.2. Comme dans les algorithmes de type « block Gauss-Seidel » le premier sous-problème (1.11) est résolu jusqu'à convergence avant que les données soient échangées (1.13) [Matthies et al., 2006a]. Comme il a été mentionné précédemment, ce type de méthode est à la base de la méthode des Eléments Finis — elle est dans ce cas plus connue sous le nom « operator split procedure » [Simo and Hughes, 1997] — où le premier sous-problème est relatif à l'intégration numérique de la loi de comportement sur chaque point d'intégration numérique. Le second sous-problème correspond alors à l'échelle globale du problème EF assemblé. Les méthodes EFEM que nous décrivons dans ce premier chapitre permettent également de profiter d'une opération de condensation statique. Enfin, nous retrouverons également ce concept dans le cadre de la méthode multi-échelles intégrées développée dans la thèse de Martin Hautefeuille ainsi qu'en application de la Programmation Orientée Composant à des problèmes multi-physiques.

Avant de décrire en détails la mise en œuvre du modèle mesoscopique pour les matériaux hétérogènes grâce aux outils fournis par les enrichissements cinématiques, nous résumons quelques éléments de comparaison entre les deux familles de méthodes numériques qui leur sont reliées, EFEM et XFEM.

Algorithme 2 Algorithme de résolution partitionnée avec condensation statique, d'après [Benkemoun, 2010]

```

1: pour  $n = 0$  à  $N$  faire
2:   tantque  $\frac{\langle r_2^{(k)}, \delta x_2^{(k+1)} \rangle_2}{\langle r_2^{(0)}, \delta x_2^{(1)} \rangle_2} > \text{tol}_k$  et  $k < k_{max}$  faire
3:     BACK :  $x_1 = x_1^{(0)}$ 
4:     tantque  $\frac{\langle r_1^{(k,i)}, \delta x_1^{(k,i+1)} \rangle_2}{\langle r_1^{(k,0)}, \delta x_1^{(k,1)} \rangle_2} > \text{tol}$  et  $i < i_{max}$  faire
5:       TANG :  $K_1^{(k,i)} = \partial_{x_1} r_1^{(k,i)}$ 
6:       FORM :  $r_1^{(k,i)}$ 
7:       SOLV :  $K_1^{(k,i)} \cdot \delta x_1^{(k,i+1)} = -r_1^{(k,i)}$ 
8:       UPDT :  $x_1^{(k,i+1)} += \delta x_1^{(k,i+1)}$ 
9:        $i ++$ 
10:    fin tantque
11:    TANG :  $K_2^{(k)} = \partial_{x_2} r_2^{(k)} - \partial_{x_1} r_2 \cdot [\partial_{x_1} r_1^{(k)}]^{-1} \cdot \partial_{x_2} r_1^{(k)}$ 
12:    FORM :  $r_2^{(k)}$ 
13:    SOLV :  $K_2^{(k)} \cdot \delta x_2^{(k+1)} = -r_2^{(k)}$ 
14:    UPDT :  $x_2^{(k)} += \delta x_2^{(k)}$ 
15:     $k ++$ 
16:  fin tantque
17: fin pour

```

1.2.3 Comparaison entre les méthodes XFEM et EFEM

L'utilisation d'enrichissements cinématiques dans les modèles EF a connu dans les dix dernières années un développement important. Cette méthodologie, à l'origine développée dans le but de représenter la fissuration par des discontinuités dites « fortes » c'est-à-dire dans le champ de déplacements, a trouvé de nombreuses autres applications ; la représentation d'hétérogénéités et donc de contrastes de propriétés est largement développée dans ce travail. La question de la mise en œuvre pratique et donc du choix entre les deux familles de méthodes XFEM et EFEM est encore une question d'actualité. Nous ne prétendons pas ici trancher ce débat mais mettre en avant quelques éléments de comparaison objectifs, dans la mesure du possible détachés de la popularité importante que XFEM connaît.

Peu d'auteurs peuvent en fait mettre en avant des expériences significatives, menées conjointement au sein des familles XFEM et EFEM et le nombre d'études comparatives est ainsi très réduit. Assez récemment, [Oliver et al., 2006] ont mené une étude comparative poussée sur des cas tests définis à cet effet. Les conclusions montrent des résultats très comparables entre les deux approches et un coût de calcul

comparatif toujours en faveur des méthodes EFEM.

Ce phénomène s'explique clairement par le caractère local de ces dernières ; la condensation des nouvelles inconnues respecte en effet le schéma fondateur de la Méthode des Eléments Finis, à savoir : résolution à faible coût d'équations locales — le plus souvent la loi de comportement — dans chaque élément de manière indépendante et pour des valeurs d'inconnues globales fixées ; condensation des informations locales — au travers de l'assemblage des matrices de « raideur » élémentaires — et résolution d'un système d'équations globales. En ajoutant directement de nouvelles inconnues globales, les méthodes XFEM ne respectent pas la dualité globale-locale qui a fait l'intérêt et la popularité des Eléments Finis et conduisent à deux effets néfastes : l'augmentation de la taille du système d'équations globales à résoudre — en gardant à l'esprit que cette opération est la plus coûteuse — et la dégradation des propriétés de la matrice tangente : conditionnement d'une part — les nouvelles équations décrivant la fissuration sont potentiellement de nature différente de celles décrivant l'équilibre mécanique de la structure — et structure « creuse » d'autre part. Ces inconvénients peuvent être considérés comme négligeables pour un nombre d'enrichissements faible, mais conduisent à des difficultés importantes lorsque, par exemple, il est nécessaire de représenter un nombre important de fissures. Ce dernier cas est d'une grande importance dans les structures en béton ou en béton armé, et plus généralement pour représenter le processus de fissuration des matériaux cimentaires.

Nous pensons donc que, au delà de la popularité importante des méthodes XFEM, les approches EFEM présentent un nombre important d'avantages dans la mise en œuvre pratique d'enrichissements cinématiques d'un modèle Eléments Finis.

1.3 Mise en œuvre dans le cadre d'un treillis spatial

Après avoir décrit les problématiques liées à la création de maillages EF pour les matériaux hétérogènes — notamment l'intérêt des maillages non-adaptés — ainsi que les méthodes EFEM comme outils de mise en œuvre pratique des enrichissements cinématiques, nous détaillons à présent la construction du modèle mesoscopique développé dans ce travail. Quelques éléments de validation sont également présentés.

1.3.1 Treillis spatial et pavage de Voronoi

L'évolution des capacités de calcul au cours des dix dernières années a rendu possible la réalisation de simulations tri-dimensionnelles. Nous pensons que celles-ci sont, pour la majorité des structures, très souhaitables. Elles permettent en effet d'éviter des questions fondamentales soulevées par la mise en place de modèles bi-dimensionnels : élasticité en contraintes ou déformations planes, représentations

planes de conditions limites 3D, prise en compte de renforts (fibres ou ferrailage pour les structures en béton armé), etc ... En cherchant à représenter un nombre significatif de modes de rupture possibles, les lois de comportement phénoménologiques développées pour ces modèles tri-dimensionnels sont, la plupart du temps, complexes, avec un nombre de paramètres à identifier important. L'utilisation de modèles particuliers ou discrets ([Kun and Herrman, 1996], [Delaplace and Ibrahimbegovic, 2006]) est alors une alternative intéressante aux méthodes Eléments Finis, dans le sens où les mécanismes de rupture introduits sont simples, peu nombreux et donc avec un ensemble de paramètres de taille réduite. Ces méthodes s'appuient sur une représentation géométrique qui est un pavage de l'espace, le plus souvent les polyèdres de Voronoi. En représentant des modes de rupture complexes, les réponses macroscopiques sont, en général, pertinentes et ces approches peuvent donc, à une certaine échelle, se substituer aux modèles macroscopiques.

Dans l'idée de développer, pour les matériaux hétérogènes, une stratégie de modélisation tri-dimensionnelle et avec la volonté de rester dans le domaine des méthodes par Eléments Finis, nous avons choisi d'opter pour un treillis spatial. Ce choix permet de tirer parti de certains avantages inhérents aux méthodes par Eléments Discrets, notamment la simplicité des modes de rupture locaux et le jeu de paramètres réduit qui en découle.

La représentation géométrique par un treillis spatial s'appuie sur un processus aléatoire de points — le plus souvent un processus de Poisson — et la triangulation de Delaunay associée [Frey and George, 1999]. Cette triangulation, réalisée par la plupart des logiciels de maillage disponibles, permet de définir des éléments unidimensionnels qui sont dans à la base du maillage non-adapté. La section de chacun de ces éléments est définie par la surface de contact entre les deux polyèdres de Voronoi dont les centres correspondent aux nœuds de l'élément. Le pavage de Voronoi est très classiquement utilisé pour les modèles particuliers [Kun and Herrman, 1996] et conduit à des propriétés intéressantes, notamment l'isotropie, pour des problèmes linéaires.

1.3.2 Hétérogénéités et discontinuités « faibles »

Nous avons déjà montré comment l'ajout de discontinuités faibles dans la cinématique des éléments permet de représenter explicitement des hétérogénéités dans un maillage EF. Celui-ci est alors non-adapté, au sens où la position des nœuds ne dépend pas des formes et des positions de ces hétérogénéités. Dans le cas d'un treillis spatial formé d'éléments unidimensionnels, l'enrichissement cinématique prend la forme d'une fonction constante par sous-domaine. Chacun de ces sous-domaines est défini par la position de l'interface, ici paramétrée par le scalaire sans dimension θ . De plus cette fonction doit satisfaire à la condition (1.6) conduisant ainsi au choix schématisé par la figure 1.4.

Cette approche permet de représenter un nombre de phases et des morphologies quelconques. Nous illustrons ici ce point par deux formes d'hétérogénéité simples,

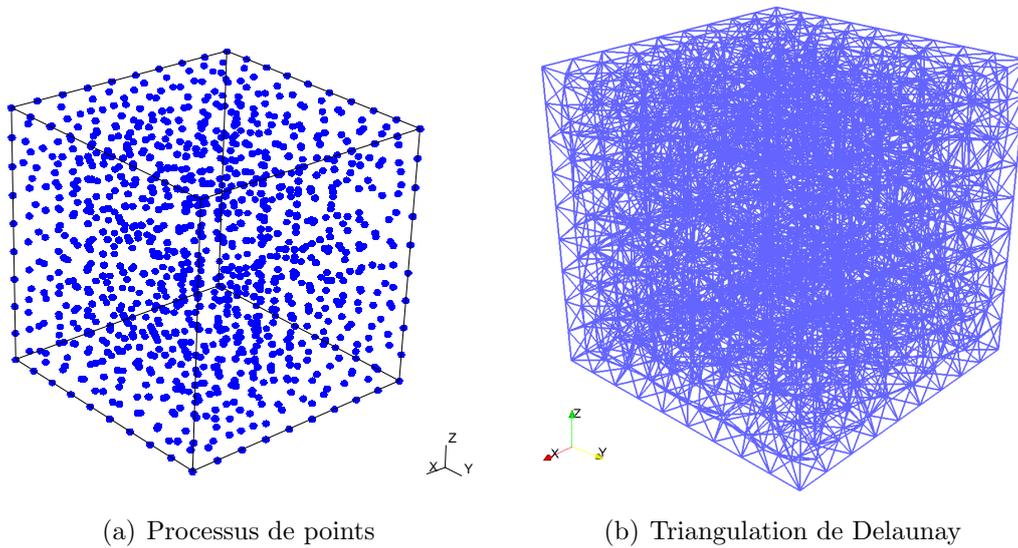


FIGURE 1.3 – Réalisation d'un treillis spatial pour un domaine cubique, d'après [Hautefeuille, 2009]

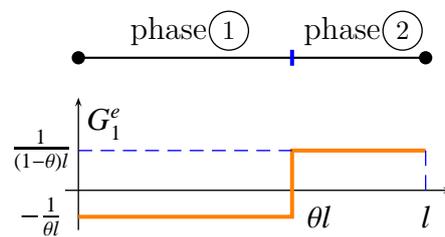
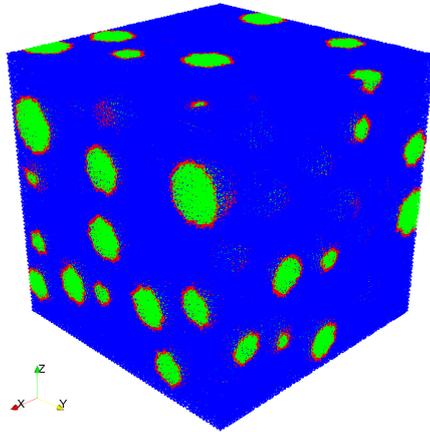
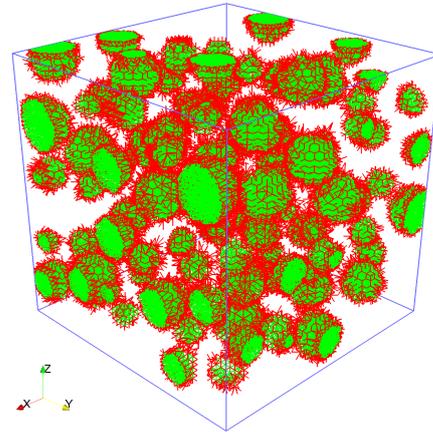


FIGURE 1.4 – Discontinuité faible pour un élément uni-dimensionnel à deux phases, d'après [Benkemoun, 2010]

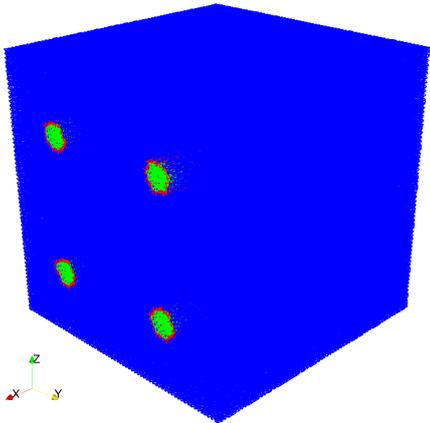
d'une part des sphères non recouvrantes (Fig.1.5(a) et Fig.1.5(b)) et d'autre part des cylindres (Fig.1.5(c) et Fig.1.5(d)). Des morphologies plus complexes sont développées et décrites dans le chapitre 3 de ce document.



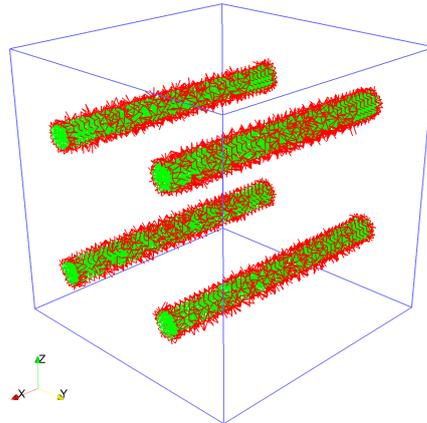
(a) Sphères non recouvrantes — fraction volumique 0,2



(b) Éléments dans les inclusions et aux interfaces



(c) Cylindres



(d) Éléments dans les inclusions et aux interfaces

FIGURE 1.5 – Exemples de représentations explicites d'hétérogénéités à formes simples, d'après [Benkemoun, 2010]

1.3.3 Confrontation avec les bornes du premier ordre en homogénéisation linéaire

Face à des problèmes mettant en jeu des milieux hétérogènes, la question du transfert d'informations pertinentes d'une échelle fine vers l'échelle supérieure — « upscaling » — a conduit à une littérature abondante, que l'on peut classer en deux

domaines. D'une part l'homogénéisation asymptotique [Sanchez-Palencia, 1980] dont les développements théoriques sont principalement dus à la communauté des mathématiques appliquées ([Jhikov et al., 1994], [Bensoussan et al., 1978]). D'autre part la théorie du champ moyen [Bornert et al., 2001]. Celle-ci introduit la notion de Volume Élémentaire Représentatif et cherche à produire des quantités macroscopiques effectives définies sur ce volume. La définition de ce VER est propre à chaque matériau ainsi qu'à chaque propriété envisagée et est toujours un domaine de recherches actif. Dans le cas où des quantités effectives ne peuvent pas être directement développées, certaines estimations [Berveiller and Zaoui, 1979] ou bornes [Hashin and Shtrikman, 1963] analytiques sont disponibles pour des cas particuliers. Sous une hypothèse de répartition isotrope des phases, les bornes d'Hashin-Shtrikman sont particulièrement étroites et fournissent donc un cadre très intéressant de validation pour notre approche numérique basée sur des maillages non-adaptés.

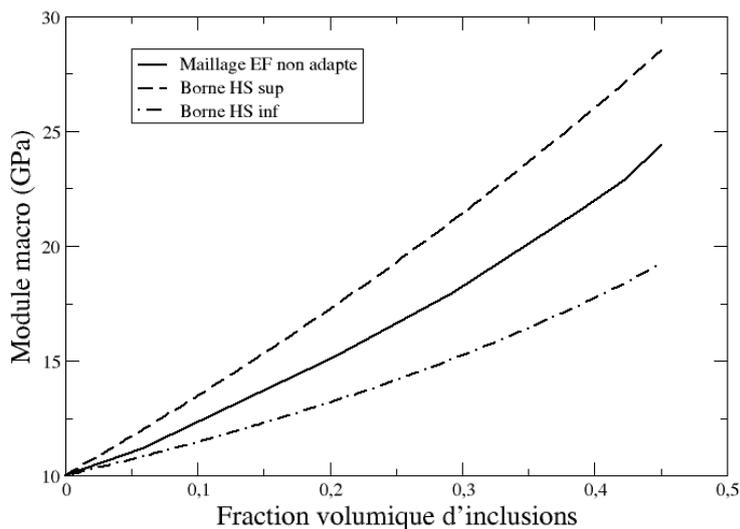


FIGURE 1.6 – Module macroscopique obtenu par un maillage EF non adapté et comparaison avec les bornes du premier ordre, d'après [Benkemoun, 2010]

Cette validation est effectuée ici pour un milieu biphasique de type matrice-inclusions. Celles-ci sont sphériques avec un diamètre compris entre 3 et 20 mm. Les modules de chacune des phases sont respectivement 10 GPa pour la matrice et 70 GPa pour les inclusions. Le module macroscopique est évalué numériquement à partir de la moyenne spatiale des champs de contraintes et de déformation mesoscopiques sur un maillage comportant environ 10000 nœuds — des études de convergence de maillage en élasticité ont montré que le seuil de convergence se situe en dessous de cette valeur. La figure 1.6 montre une comparaison entre ce module macro pour

différentes fractions volumiques (jusqu'à 45%) et les bornes d'Hashin-Shtrikman. La bonne adéquation entre ce résultat théorique et les calculs numériques est un élément majeur dans la validation de l'approche basée EF basée sur des maillages non adaptés et des enrichissements cinématiques faibles.

1.3.4 Représentation de la fissuration et discontinuités « fortes »

Une des questions fondamentales liées à la modélisation de matériaux hétérogènes fragiles ou quasi-fragiles est la représentation de la fissuration. D'un point de vue physique, une fissure peut être vue comme une discontinuité au sein d'un milieu continu. L'ouverture de cette fissure conduit à une diminution progressive de la norme du vecteur contrainte normal à la fissure. Cette diminution se traduit par l'introduction de lois adoucissantes et à une perte d'unicité de la solution des modèles Éléments Finis développés avec ces lois. En localisant la déformation totale dans une zone du maillage de dimension $n-1$ — une bande d'éléments pour un problème tri-dimensionnel — l'énergie dissipée par la structure lors du processus de fissuration dépend de la finesse du maillage.

Ce problème de localisation numérique pour les méthodes Éléments Finis a conduit à de très nombreux travaux au cours des vingt dernières années et à de nombreuses techniques de « régularisation », parfois connues sous le nom de « limiteurs de localisation ». Parmi celles-ci on peut citer le concept de fissuration répartie — smeared crack model [Hillerborg, 1991] –, les approches à gradients [Mindlin and Eshel, 1968], les modèles non-locaux [Pijaudier-Cabot and Bazant, 1987] et, plus récemment, les approches à discontinuités fortes [Wells and Sluys, 2000], [Branche-rie and Ibrahimbegovic, 2009], [Moës et al., 1999]. Basées sur un enrichissement de la cinématique des éléments, ces dernières permettent de régulariser le modèle numérique grâce à une dissipation directement exprimée — au travers de l'énergie de fissuration du matériau, seul paramètre nécessaire à la modélisation du processus d'ouverture d'une fissure — sur une surface de dimension $n-1$. Ainsi l'énergie totale est indépendante de la taille choisie pour le maillage. Cet aspect « discret » de la fissuration est un atout majeur que l'on peut rapprocher des méthodes par Éléments Discrets pour lesquelles le phénomène de localisation numérique n'est pas présent.

Le point clé consiste à remarquer ici que les approches à discontinuités fortes proposent une solution unique aux deux problèmes fondamentaux issus de la modélisation de la fissuration en EF : d'une part la localisation numérique et d'autre part la représentation physique d'une discontinuité et de son amplitude (c'est-à-dire de l'ouverture). Ce point explique sans doute l'intérêt croissant pour ce type d'approches.

De la même façon que pour les discontinuités faibles à l'origine des maillages non-adaptés, la mise en œuvre pratique des discontinuités fortes peut se faire au travers de méthodes globales — du type XFEM — ou locales — EFEM. Une brève comparaison a été proposée ci-dessus (voir §1.2.3) et l'ensemble des travaux décrits dans ce document s'appuie sur un cadre d'enrichissements locaux au travers de la

Méthode des Modes Incompatibles (voir §1.2.1).

Dans le cadre du modèle mesoscopique décrit ici et du treillis spatial non-adapté retenu, la cinématique de chaque élément potentiellement déjà enrichie par une discontinuité faible (Fig.1.4), est complétée par une discontinuité forte, c'est-à-dire dans le champ de déplacements, positionnée au niveau de l'interface physique entre les deux phases matérielles (Fig.1.7). Le champ de contraintes est constant par sous-domaines et ce second enrichissement doit satisfaire à la condition (1.6). Cet enrichissement local G_2^e est donc la somme d'une fonction constante \bar{G}_2^e et d'une distribution de Dirac placée au niveau de l'interface $\bar{\bar{G}}_2^e$ comme représentée sur la figure 1.7. A noter que le paramètre de mode incompatible v_2^e paramétrant ce second enrichissement représente l'ouverture de fissure locale, c'est-à-dire au niveau mesoscopique.

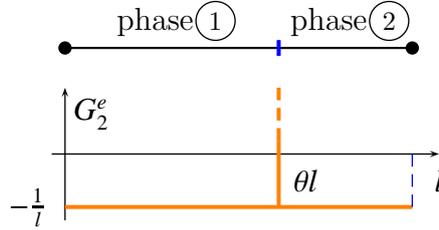


FIGURE 1.7 – Discontinuité forte pour un élément uni-dimensionnel à deux phases, d'après [Benkemoun, 2010]

$$\tilde{\varepsilon}_2^{eh} = G_2^e \cdot v_2^e = \left(\underbrace{-\frac{1}{l}}_{\bar{G}_2^e} + \underbrace{\delta_\Gamma}_{\bar{\bar{G}}_2^e} \right) \cdot v_2^e \quad (1.14)$$

Le champ de déformation est ainsi enrichi par deux termes, $\tilde{\varepsilon}_1$ pour la discontinuité faible et $\tilde{\varepsilon}_2$ pour la discontinuité forte. Le potentiel de Hu-Washizu Π_{HW} s'écrit donc :

$$\Pi_{HW}(u, \tilde{\varepsilon}_1, \tilde{\varepsilon}_2, \sigma) = \int_{\Omega} \Psi(\nabla^s u + \tilde{\varepsilon}_1 + \tilde{\varepsilon}_2) d\Omega - \int_{\Omega} \sigma \cdot (\tilde{\varepsilon}_1 + \tilde{\varepsilon}_2) d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} u \cdot \bar{t} dS \quad (1.15)$$

Bien que le premier enrichissement soit potentiellement toujours présent — ensemble de discontinuités faibles permettant la représentation explicite d'hétérogénéités — le second nécessite la définition d'un critère de fissuration ainsi que d'une loi décrivant l'ouverture de cette fissure locale. Cherchant à représenter un mode de fissuration locale simple, l'expression (1.16a) définit un critère de fissuration reliant le vecteur contrainte normal à la fissure t_Γ^e à un seuil σ_f . Ce critère est formulé de façon à ne capturer, au niveau local, que la fissuration en traction ou en extension (déformation positive). Ce mode de rupture est en effet, en première approche, à privilégier pour les matériaux cimentaires. Dans (1.16a) apparaît également la variable q contrôlant l'adoucissement. Celle-ci est liée — (1.16b) — à l'ouverture de fissure par l'introduction de l'énergie de fissuration G_f . La combinaison de ces

deux expressions conduit à un comportement local avec deux régimes (Fig.1.8). Une première étape élastique pour laquelle l'équation d'équilibre locale impose un champ de contraintes homogène et un champ de déformations constant par sous-domaines ; dans ce cas seul le premier enrichissement est présent. Après activation du critère de fissuration, une deuxième étape pour laquelle le vecteur contrainte à l'interface t_Γ diminue avec l'ouverture progressive de la fissure.

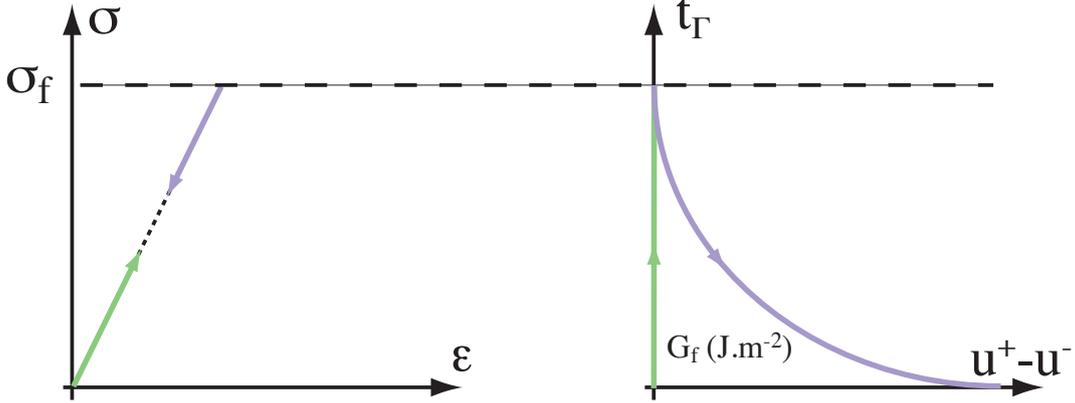


FIGURE 1.8 – Schématisation de la réponse locale d'un élément avec discontinuité forte au cours d'un chargement monotone

L'énergie de fissuration G_f apparaît donc étant l'aire sous la courbe $t_\Gamma - v_2$ ce qui est en cohérence avec la pratique des essais de fissuration et la mesure de cette propriété. Cette deuxième étape est également caractérisée par la décharge élastique des deux sous-domaines de l'élément. La dissipation est donc bien surfacique et indépendante de la longueur choisie pour l'élément. Le comportement local peut donc se décrire comme étant élastique pour chaque sous-domaine et rigide-adoucissant pour l'interface. A noter que, pour les éléments ne possédant pas d'enrichissement faible — c'est-à-dire les éléments entièrement compris dans une phase du composite — une discontinuité forte peut également s'établir si le critère (1.16a) est atteint.

$$\phi(t_\Gamma^e, v_2^e) = t_\Gamma^e - (\sigma_f - q(v_2^e)) \quad (1.16a)$$

$$q(v_2) = \sigma_f \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{\sigma_f}{G_f} \cdot v_2\right)\right) \quad (1.16b)$$

La stationnarité de Π_{HW} (1.15) combinée avec les interpolations EF du champ de déplacements u , des deux enrichissements cinématiques $\tilde{\varepsilon}_1$ et $\tilde{\varepsilon}_2$, et du champ de contraintes conduit à un vecteur d'équations aux résidus. L'ajout d'un nouvel enrichissement ne modifie pas le résidu complet (1.5) mais chaque élément amène à l'écriture d'un vecteur à trois composantes r^e : une composante pour chaque enrichissement et une troisième correspondant au critère de fissuration. Dans (1.17), σ_\circ

et $\sigma_{\textcircled{2}}$ sont respectivement les champs de contraintes dans les phases $\textcircled{1}$ et $\textcircled{2}$ (voir Fig.1.7).

$$r^e = \begin{bmatrix} \int_{\Omega} G_1^e \cdot \partial_{\varepsilon_1^e} \Psi \, d\Omega \\ \int_{\Omega} G_2^e \cdot \partial_{\varepsilon_2^e} \Psi \, d\Omega \\ \phi(t_{\Gamma}^e, v_2^e) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sigma_{\textcircled{1}}^e + \sigma_{\textcircled{2}}^e \\ \theta \cdot \sigma_{\textcircled{1}}^e + (1 - \theta) \cdot \sigma_{\textcircled{2}}^e - t_{\Gamma}^e \\ \phi(t_{\Gamma}^e, v_2^e) \end{bmatrix} \quad (1.17)$$

Dans (1.17), la première composante est clairement linéaire et traduit, sous forme faible, l'équilibre du champ de contraintes. La deuxième composante est non-linéaire — au travers du choix fait pour décrire l'évolution de l'adoucissement (Fig.1.8) — et traduit, toujours sous forme faible, la continuité du vecteur contrainte au niveau de l'interface.

$$t_{\Gamma} = \theta \cdot \sigma_{\textcircled{1}} + (1 - \theta) \cdot \sigma_{\textcircled{2}} \quad (1.18)$$

Le vecteur des résidus locaux peut être simplifié en remarquant que la seconde composante fournit une expression (1.18) du vecteur contrainte t_{Γ} . Ainsi le vecteur r^e peut se mettre sous la forme :

$$r^e = \begin{bmatrix} h_1^e(v_1^e, v_2^e) \\ \phi(t_{\Gamma}^e, v_2^e) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sigma_{\textcircled{1}}^e + \sigma_{\textcircled{2}}^e \\ \phi(t_{\Gamma}^e, v_2^e) \end{bmatrix} \quad (1.19)$$

Conformément à la méthodologie décrite ci-dessus, l'annulation du vecteur complet d'équations aux résidus \mathbf{r} peut tirer parti de la condensation statique. Il est à noter que l'emploi d'un algorithme itératif n'est rendu nécessaire que par l'introduction d'une loi adoucissante (matériau quasi-fragile). Dans le cas d'un matériau fragile seule une prédiction élastique est nécessaire [Delaplace and Ibrahimbegovic, 2006].

Afin de présenter les éléments originaux ayant conduit au développement du modèle mesoscopique faisant l'objet de ce premier chapitre, nous détaillons à présent la procédure de résolution locale en nous concentrant sur le problème de l'annulation de r_e pour chaque élément. La linéarisation de ce vecteur à l'itération k conduit au système d'équations linéaires :

$$\begin{bmatrix} \partial_{v_1^e} h_1^e & \partial_{v_2^e} h_1^e \\ \partial_{v_1^e} t_{\Gamma} & \partial_{v_2^e} t_{\Gamma} + \partial_{v_2^e} q \end{bmatrix}^{(k)} \cdot \begin{bmatrix} \delta v_1^e \\ \delta v_2^e \end{bmatrix}^{(k+1)} = - \begin{bmatrix} h_1^e \\ \phi \end{bmatrix}^{(k)} \quad (1.20)$$

Le calcul des différentes composantes de la matrice jacobienne de ce système nécessite les expressions des contraintes pour chaque sous-domaine :

$$\sigma_{\textcircled{1}}^e = E_{\textcircled{1}} \cdot \left(B^e \cdot u^e + G_1 \cdot v_1^e + \bar{G}_2 \cdot v_2^e \right) \Big|_{\textcircled{1}} \quad (1.21a)$$

$$\sigma_{\textcircled{2}}^e = E_{\textcircled{2}} \cdot \left(B^e \cdot u^e + G_1 \cdot v_1^e + \bar{G}_2 \cdot v_2^e \right) \Big|_{\textcircled{2}} \quad (1.21b)$$

L'algorithme de résolution locale est décrit précisément dans Alg.3. La deuxième équation n'est pas toujours présente ce qui conduit à une légère adaptation par rapport à la démarche générale présentée précédemment.

Algorithme 3 Résolution locale d'un élément uni-dimensionnel avec deux enrichissements cinématiques, d'après [Benkemoun, 2010]

- 1: **tantque** $\frac{\langle \phi^{(k)}, \delta v_1^{e(k+1)} \rangle_2}{\langle \phi^{(0)}, \delta v_1^{e(1)} \rangle_2} > \text{tol}_k$ et $k < k_{max}$ **faire**
- 2: DISCONTINUITÉ FAIBLE
- 3: TANG, FORM, SOLV :

$$\partial_{v_1^e} h_1^e |^{(k)} \cdot \delta v_1^{e(k+1)} = -h_1^{e(k+1)} \quad (1.22)$$

- 4: UPDT : $v_1^e + = \delta v_1^{e(k+1)}$
- 5: UPDT : $\begin{cases} \sigma_{\textcircled{1}}^e + = E_{\textcircled{1}} \cdot G_1 |_{\textcircled{1}} \cdot \delta v_1^{e(k+1)} \\ \sigma_{\textcircled{2}}^e + = E_{\textcircled{2}} \cdot G_1 |_{\textcircled{2}} \cdot \delta v_1^{e(k+1)} \\ \phi^{(k)} + = (\theta \cdot E_{\textcircled{1}} \cdot G_1 |_{\textcircled{1}} + (1 - \theta) \cdot E_{\textcircled{2}} \cdot G_1 |_{\textcircled{2}}) \cdot \delta v_1^{e(k+1)} \end{cases}$
- 6: TEST SI FISSURATION
- 7: iloc = $(k == 0 \ \&\& \ \phi_{n+1}^{(k)} > 0) ? 0 : 1$
- 8: **si** iloc == 0 **alors**
- 9: **break**
- 10: **sinon**
- 11: DISCONTINUITÉ FORTE
- 12: TANG, FORM, SOLVE :

$$\partial_{v_2^e} (\phi + q) |^{(k)} \cdot \delta v_2^{e(k+1)} = -\phi^{(k+1)} \quad (1.23)$$

- 13: UPDT : $v_2^e + = \delta v_2^{e(k+1)}$
- 14: UPDT : $\begin{cases} \sigma_{\textcircled{1}}^e + = E_{\textcircled{1}} \cdot \bar{G}_2 |_{\textcircled{1}} \cdot \delta v_2^{e(k+1)} \\ \sigma_{\textcircled{2}}^e + = E_{\textcircled{2}} \cdot \bar{G}_2 |_{\textcircled{2}} \cdot \delta v_2^{e(k+1)} \\ \phi^{(k)} = \phi^{(k)}(v_2^{e(k+1)}) \end{cases}$
- 15: **fin**
- 16: **fin tantque**
-

Ces développements ont été effectués dans le cadre du travail de thèse de Nathan Benkemoun [Benkemoun et al., 2009]. Ils sont à la base d'une grande partie des simulations multi-échelles, séquencées ou intégrées, présentées dans ce document. Nous présentons et analysons à présent les réponses mécaniques obtenues à

différents trajets de chargement macroscopiques et montrons comment elles peuvent être rapprochées du comportement des matériaux cimentaires. Les approches multiphysiques, toujours en lien avec cette classe de matériaux, sont quant à elles décrites dans le chapitre 4.

1.3.5 Réponses à des trajets de chargements macroscopiques

L'application de divers trajets de chargement macroscopiques permet de mettre en avant les possibilités offertes par une modélisation, à l'échelle fine, des matériaux cimentaires. La représentation et la prise en compte explicite des granulats conduisent en effet à des réponses macroscopiques largement plus riches que les mécanismes introduits au niveau fin.

La figure 1.9 présente la réponse macroscopique d'un cube de 10^{-3} m^3 soumis à des sollicitations de traction et de compression simples. Le milieu est supposé biphasique — mortier et granulats de taille supérieure à 2 mm — et l'ensemble des propriétés à l'échelle mesoscopique est résumé dans le tableau 1.1. On peut voir, d'une part que les granulats sont considérés comme élastiques et, d'autre part, que les propriétés liées à la non-linéarité des interfaces sont choisies de manière identique à celles du mortier.

mortier	inclusions	interfaces
$E = 10 \text{ GPa}$	70 GPa	-
$\sigma_f = 2 \text{ MPa}$	-	2 MPa
$G_f = 30 \text{ J/m}^2$	-	30 J/m ²
volume	fraction vol. d'inclusions (%)	ddl
10^{-3} m^3	45	~ 700000

TABLE 1.1 – Réponse mécanique : propriétés à l'échelle mesoscopique, d'après [Benkemoun, 2010]

Comme on peut s'y attendre, la réponse macroscopique en traction (Fig.1.9) est très proche de celle choisie pour modéliser les mécanismes de rupture à l'échelle mesoscopique. On peut néanmoins noter une perte de raideur dans la phase qui précède immédiatement le pic. Celle-ci correspond à une phase de micro-fissuration, répartie de manière homogène dans l'ensemble du volume. Selon un mécanisme souvent répertorié [Freudenthal, 1968], ces fissures coalescent brutalement en une fissure dominante. Cette macro fissure est clairement visible sur la figure 1.10(a) où sont représentés les éléments pour lesquels une discontinuité forte est activée.

Bien que les mécanismes de rupture locaux ne comprennent *a priori* qu'une fissuration initiée en traction, la réponse macroscopique en compression présente également un phénomène de rupture (Fig.1.9). En raison de la présence de plusieurs macro-fissures, celle-ci est largement moins fragile et l'énergie dissipée est plus importante qu'en traction. L'effort au pic est également plus important. Ce comportement

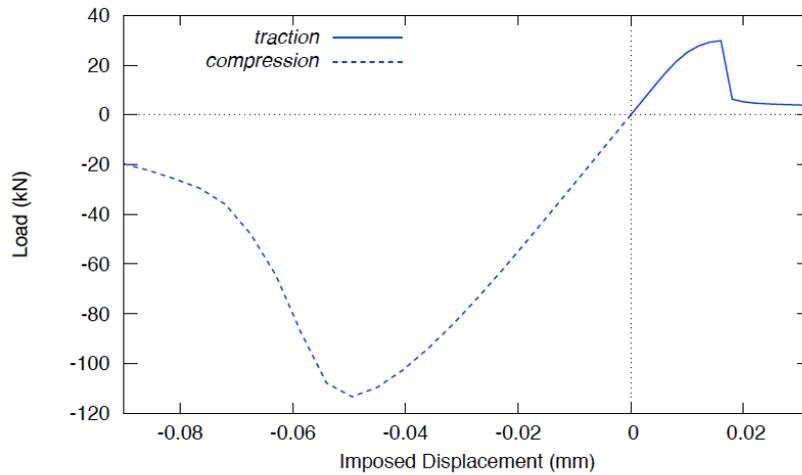


FIGURE 1.9 – Réponse macroscopique du modèle en traction–compression, d’après [Benkemoun, 2010]

dissymétrique est caractéristique des matériaux cimentaires et il est notable de pouvoir simuler cette complexité au travers d’un seul mécanisme à l’échelle fine et donc d’un nombre de paramètres très réduits (trois pour chaque phase ou interface).

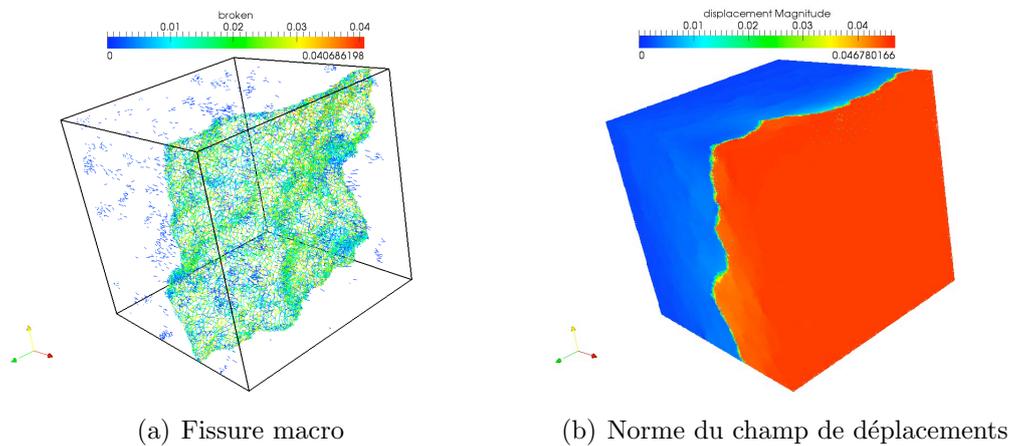


FIGURE 1.10 – Formation d’une macro-fissure en traction simple, d’après [Benkemoun, 2010]

L’ensemble de ces simulations non-linéaires ont été réalisées suivant un algorithme de résolution de type « quasi-Newton » et connu sous le nom de BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno). Celui-ci consiste à corriger de manière simple,

à chaque itération, la matrice tangente $\mathbf{K}^{(k)}$ selon :

$$\mathbf{K}^{(k+1)} = \mathbf{K}^{(k)} + \frac{\gamma\gamma^T}{\gamma^T\delta} - \frac{(\mathbf{K}^{(k)}\delta)(\mathbf{K}^{(k)}\delta)^T}{\delta^T\mathbf{K}^{(k)}\delta} \quad (1.24)$$

Cette mise à jour de rang deux permet de conserver le caractère symétrique et défini positif de $\mathbf{K}^{(k)}$. Les quantités δ et γ dépendent respectivement de l'incrément de déplacement à l'itération k et de la différence des résidus entre les itérations $k+1$ et k .

De plus, afin de garantir une meilleure stabilité, on peut adjoindre à l'algorithme quasi-Newton BFGS une méthode de « line-search ». La nouvelle valeur itérative du vecteur déplacement $\mathbf{u}_{n+1}^{(k+1)} = \mathbf{u}_{n+1}^{(k)} + \Delta\mathbf{d}_{n+1}^{(k+1)}$, avec l'incrément de déplacement $\Delta\mathbf{d}_{n+1}^{(k+1)}$ fourni par la méthode quasi-Newton, n'est alors plus considérée comme étant la meilleure et seule la direction de recherche est conservée. On écrit alors,

$$\mathbf{u}_{n+1}^{(k+1)} = \mathbf{u}_{n+1}^{(k)} + s^{(k+1)}\Delta\mathbf{d}_{n+1}^{(k+1)} ; s \in [0, 1] \quad (1.25)$$

où le paramètre $s^{(k+1)}$ est calculé par la méthode de Regula-Falsi [Dahlquist and Björck, 1974]. L'implantation numérique conjointe de ces deux parties est détaillée dans [Matthies and Strang, 1979].

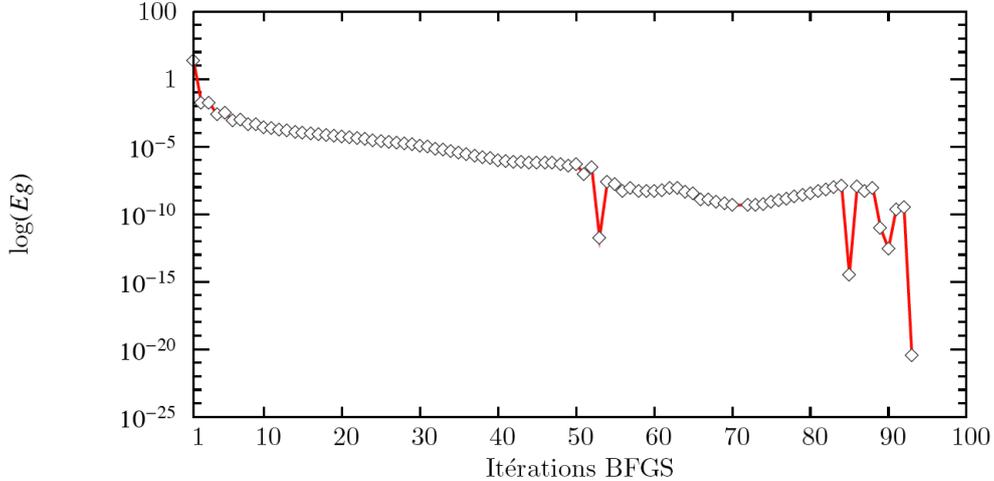


FIGURE 1.11 – Convergence du processus itératif en compression simple, d'après [Benkemoun, 2010]

Les figures 1.11 et 1.12 présentent le comportement de cet algorithme quasi-Newton pour un pas de temps non linéaire issu du calcul en compression simple. On peut observer, d'une part la convergence quasi-linéaire de la méthode BFGS — par rapport à la méthode de Newton en théorie quadratique — ainsi que l'activation du line-search et son rôle dans le processus de convergence global.

Les réponses à différents autres trajets de chargement macroscopiques proportionnels — cisaillements simple et pure, bi- et tri-traction — sont présentées dans la

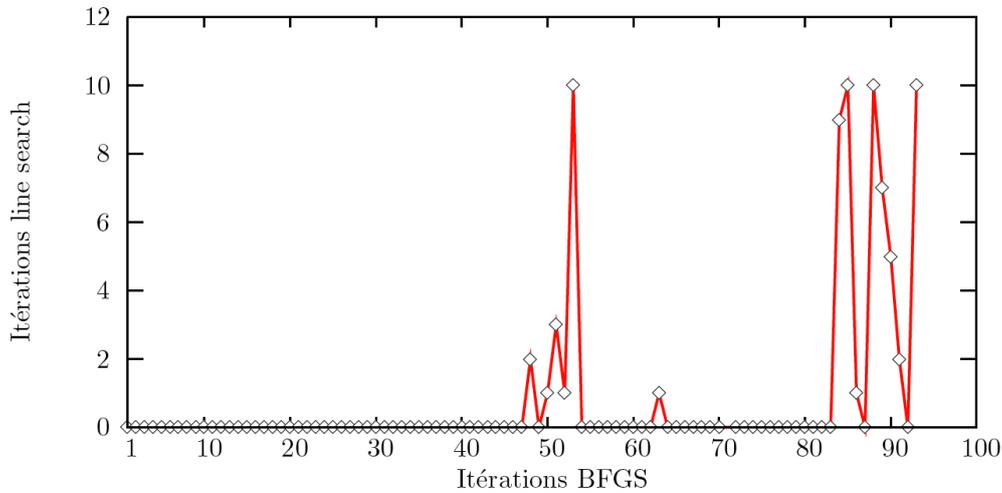


FIGURE 1.12 – Activation du line-search en compression simple, d’après [Benkemoun, 2010]

thèse de Nathan Benkemoun [Benkemoun, 2010]. Celles-ci confirment l’intérêt d’une approche se basant sur l’échelle mesoscopique et l’apport de la représentation explicite des phases. La mise en place de modèles morphologiques plus représentatifs de la géométrie d’un béton est donc une voie prometteuse et quelques pistes sont données dans le chapitre 3 de ce document (§3.4).

Une autre voie intéressante est celle de l’application du modèle décrit dans ce premier chapitre aux méthodes de simulation multi-échelles séquencées. Les principes généraux ayant trait aux méthodes multi-échelles — et la distinction entre « séquencées » et « intégrées » — apparaissent dans le chapitre suivant mais nous donnons, d’ores-et-déjà, un exemple de résultats obtenus dans ce cadre. Il s’agit de la détermination numérique d’une surface de rupture bi-dimensionnelle suivant les mêmes hypothèses morphologiques et matérielles que pour les sollicitations macroscopiques simples envisagées ci-dessus. Cette surface est calculée en sollicitant, dans leur plan, des plaques d’éclatement 1/10 (Fig. 1.13a). Les conditions aux limites sont homogènes au contour dans le plan et les deux surfaces supérieure et inférieure sont libres de sorte que, au point de vue macroscopique, des conditions proches des contraintes planes peuvent être considérées.

La 1.13b présente les résultats obtenus pour les différents trajets de chargement. La dissymétrie déjà constatée sur la figure 1.9 est patente. Il apparaît de plus que la fraction volumique de granulats a un rôle important. Bien que l’effort maximal en bi-traction semble insensible à ce paramètre, les comportements en compressions simple et bi-axiale montrent une augmentation de la résistance avec la quantité de granulats. Enfin, il est notable que l’ensemble des calculs nécessaires à la réalisation de ces surfaces de rupture profitent directement du contexte logiciel mis en œuvre et de la Programmation Orientée Composant présentée à l’occasion du chapitre 4

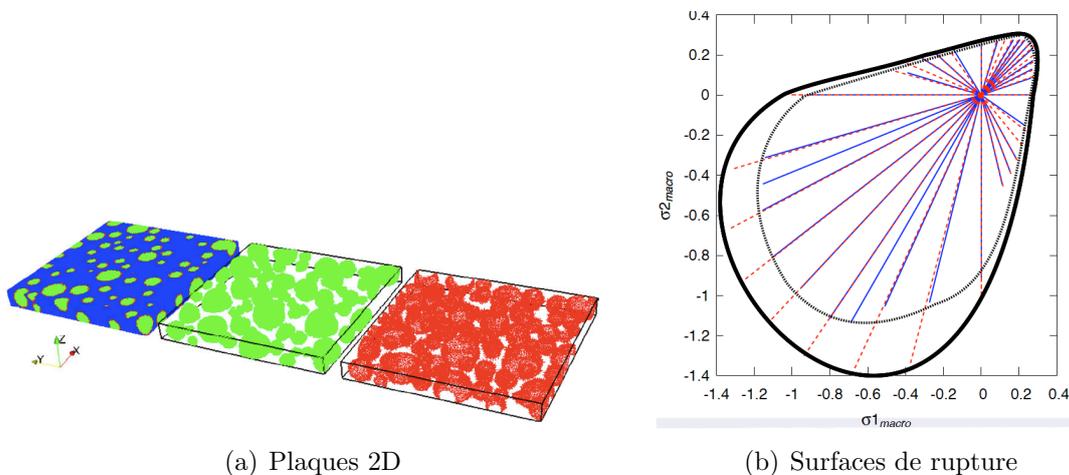


FIGURE 1.13 – Méthode multi-échelles séquencée de détermination d’une surface de rupture bi-dimensionnelle, d’après [Benkemoun, 2010] : fractions volumiques 20% (bleu) et 35% (rouge)

de ce document.

1.4 Application aux systèmes ETICS

Nous présentons ici un exemple d’application du modèle présenté dans ce premier chapitre à un matériau cimentaire autre qu’un béton. Dans le cadre d’une collaboration avec Saint-Gobain Recherche, il s’agit d’évaluer l’influence de la dégradation partielle de grilles en fibre de verres mises en place dans des systèmes d’isolation par l’extérieur de façade (système ETICS — External Thermal Insulation Composite System). Ces systèmes sont composés, entre autres, d’un matériau isolant et d’un mortier de finition dans lequel est incluse une grille en fibres de verre. Le rôle de cette grille est d’apporter un renfort mécanique et d’empêcher la fissuration du mortier.

Le paramètre clé de la grille en fibre de verre est sa résistance aux alcalins. En effet, le mortier frais est un milieu fortement alcalin ce qui peut engendrer une dégradation partielle des propriétés mécaniques de la grille. De plus, plusieurs types de verre peuvent être utilisés pour réaliser ces grilles de renfort de mortier. Ces différents verres ayant des caractéristiques mécaniques et de résistance aux alcalins différentes, les conséquences mécaniques pour le composite « mortier-grille » sont donc diverses.

L’objectif de cette étude est de modéliser le comportement mécanique d’un mortier renforcé par une grille en fibres de verre afin de quantifier, au niveau macroscopique, les conséquences d’une dégradation des caractéristiques du renfort. La figure 1.14 montre la géométrie adoptée. La grille fait ici office d’hétérogénéité et nous montrons ainsi comment un maillage non adapté permet une représentation simple

de ce renfort.

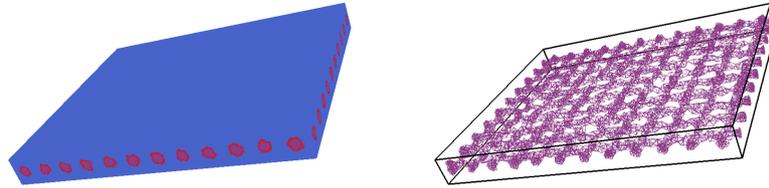


FIGURE 1.14 – Mortier renforcé par une grille en fibres de verre : définition de la géométrie et maillage non adapté

Le nombre de paramètres à définir à l'échelle fine est similaire au cas d'un milieu de type matrice–inclusions (§1.3.5). Parmi eux on trouve ceux qui font l'objet de cette étude. D'une part, la résistance des fils qui constituent la grille et qui évolue dans un milieu alcalin selon le type de verre ; d'autre part, la résistance de l'interface influencée par la nature des revêtements sur les fils. Pour des raisons de confidentialité, il ne nous est pas possible de présenter ici les résultats associés à cette étude mais il est notable que l'approche présentée ici permet de simuler l'influence de différents facteurs physiques, associés au type de verre choisi ou à son process de fabrication, et qui sont au centre de l'intérêt de l'industriel.

1.5 Conclusions et perspectives pour la modélisation des matériaux hétérogènes

La stratégie de modélisation des matériaux hétérogènes mise en avant dans ce premier chapitre est à la base d'une grande partie des travaux synthétisés ici. Celle-ci apporte en premier lieu une réponse à la problématique du maillage. La mise en place de maillages non adaptés aux hétérogénéités physiques permet en effet de construire des maillages de bonne qualité et de s'adapter très facilement à différentes morphologies. Concrètement, il s'agit d'enrichir, de manière faible, la cinématique des éléments de façon à pouvoir représenter, au sein d'un même élément, un contraste de propriétés élastiques. Il est notable que ce type d'approche ne se limite pas à la mécanique du solide mais s'étend à l'ensemble des problèmes physiques dont la résolution est possible par la méthode des Eléments Finis. Des exemples d'applications s'appuyant sur des maillages non adaptés sont ainsi mis en avant pour des problèmes de transferts (contrastes de conductivité thermique ou de perméabilité hydraulique, voir §4.3). La mise en œuvre numérique de cette approche est possible au travers des diverses méthodes d'enrichissements locaux. De part leur formulation qui respecte un des atouts majeurs de la méthode des Eléments Finis, à savoir le

partitionnement global–local, celles-ci nous semblent en effet à privilégier dans la mise en place d’enrichissements cinématiques.

Le deuxième point fort de ce premier chapitre est relatif à la modélisation de la fissuration. En accord avec la représentation explicite des hétérogénéités, celle-ci peut prendre place dans n’importe laquelle des phases du composite ainsi qu’aux interfaces. Elle repose sur l’introduction de discontinuités dans le champ de déplacements dont les amplitudes correspondent aux ouvertures. En faisant pleinement partie des inconnues du problème discret, celles-ci sont donc accessibles sans post-traitement ultérieur. De plus, on montre que cette approche permet de retrouver l’objectivité vis-à-vis du maillage choisi. Elle répond ainsi à deux enjeux majeurs liés à la simulation numérique des phénomènes de fissuration, tout en évitant l’introduction de paramètres difficiles à identifier. Enfin, elle apparaît comme pleinement cohérente avec le premier enrichissement cinématique associé aux maillages non adaptés.

Sur la base de ces outils, essentiellement développés pendant les thèses de Sergiy Melnyk et de Nathan Benkemoun, nous montrons comment l’introduction de mécanismes de rupture locaux simples — rupture en traction à l’échelle mesoscopique — conduit à des réponses macroscopiques complexes. La dissymétrie traction–compression ainsi que la forme des surfaces de rupture bi-dimensionnelles obtenues, confirment l’intérêt pour les matériaux cimentaires. Dans le cadre d’analyses numériques multi-échelles séquencées, de nombreuses voies sont ainsi ouvertes tant sur le plan du comportement mécanique que concernant les comportements multiphysiques.

Les perspectives concernant les stratégies de modélisation des matériaux hétérogènes sont nombreuses. En lien direct avec les travaux présentés dans ce premier chapitre et la modélisation au travers d’un treillis spatial, la prise en compte des effets de cisaillement locaux est un point important dans la description prédictive du comportement mécanique, notamment en compression. Une voie possible est ainsi de mettre en place un assemblage de poutres de Timoshenko. Afin de ne pas multiplier par deux le nombre de degrés de liberté par nœuds, les premiers développements entrepris en ce sens dans le cadre de la fin du travail de Nathan Benkemoun, considèrent des assemblages rigides en rotation, permettant ainsi la condensation des inconnues « rotations ». La taille du problème discret assemblé reste donc inchangée et l’introduction du cisaillement — au travers du module de cisaillement de chacune des phases — permet d’enrichir le comportement macroscopique linéaire (voir [Benkemoun, 2010]). Sur le plan non linéaire, l’introduction de discontinuités fortes dans les directions transversales est en cours de mise en œuvre. Il est intéressant de mettre, à nouveau, ici en avant l’intérêt des méthodes d’enrichissement locales : bien que le nombre de modes incompatibles par élément soit en nette augmentation par rapport au treillis spatial, la taille du problème final reste inchangée et l’effort numérique à fournir n’est donc que très peu modifié.

La prise en compte de morphologies plus proches de celles des matériaux cimentaires constitue une autre perspective intéressante. Les modèles de sphères non recouvrantes employés ne conduisent en effet qu’à des formes, par définition, régu-

lières. Le cadre mis en place au travers des maillages non adaptés permet de projeter des morphologies quelconques à très faible coût. L'apport des champs aléatoires à ce sujet, ainsi que quelques pistes dans cette direction, sont décrits dans le chapitre 3.

Chapitre 2

Stratégies de modélisation multi-niveaux : Approches séquencée et intégrée

Contents

2.1	Approches séquencées	38
2.1.1	Principes généraux	38
2.1.2	Approches séquencées appliquées aux champs aléatoires corrélés : effets d'échelles	39
2.2	Mise en œuvre d'une approche intégrée	40
2.2.1	Approche à trois champs : multiplicateurs de Lagrange localisés	40
2.2.2	L'architecture MuSCAd	43
2.2.3	Application aux matériaux hétérogènes	46
2.2.4	Perspectives pour les approches intégrées	48
2.3	Conclusions pour les approches multi-échelles numériques	49

Grâce d'une part aux développements de modèles adaptés à des échelles fines et, d'autre part, à l'accroissement des capacités de calcul, les méthodes d'homogénéisation numériques ont acquis une attractivité importante pendant les dix dernières années. [Feyel and Chaboche, 2001] ont proposé de les regrouper en deux catégories : les approches séquentielles, très répandues pour les matériaux cimentaires, et les approches intégrées.

Au sein du premier groupe, les simulations numériques sont conduites au niveau « fin » dans le but de construire, *a posteriori*, des quantités effectives permettant, par exemple, d'alimenter un modèle macroscopique. De nombreux travaux relatifs aux matériaux cimentaires s'inscrivent dans cet esprit. Au delà, la détermination de la taille des VER associés à un couple matériau-grandeur fait partie des résultats les plus notables recensés dans la littérature [Kanit et al., 2003]. Grâce aux apports de la morphologie mathématique [Matheron, 1975] et de calculs par Eléments Finitis à l'échelle micro-structurale, il est possible de produire des quantités effectives pour des matériaux très hétérogènes, au moins dans un cadre linéaire. Pour des problèmes non linéaires, les méthodes séquencées ne permettent pas de prendre en compte l'ensemble des trajets de chargement envisageables. Induits par des effets structuraux, ceux-ci peuvent être complexes et un couplage plus approfondi doit alors être mis en place entre les deux échelles. Ce dernier point est sans doute l'objectif majeur attaché aux méthodes intégrées et à leur développement. Celles-ci ont pour but de mener directement des calculs à l'échelle structurelle ou macroscopique en s'appuyant sur des simulations *in vivo* aux échelles fines. Elles se basent, le plus souvent, sur des idées propres aux méthodes de décomposition de domaines. Ces dernières cherchent à résoudre un problème aux frontières en s'appuyant sur une partition du domaine étudié Ω et peuvent se classer en deux groupes selon que les sous-domaines qui constituent cette partition sont disjoints ou non. Historiquement, les méthodes de décomposition de domaines avec recouvrement sont les premières à avoir vu le jour, notamment dans [Schwarz, 1869], et ont conduit à des applications dans le domaine de la mécanique des fluides. Plus récemment, la méthode Arlequin ([Ben Dhia, 1998], [Rateau, 2003]) en a constitué une nouvelle formulation, particulièrement intéressante pour la mécanique du solide. Elle permet notamment l'emploi de cinématiques EF très différentes pour chaque sous-domaine (éléments volumiques, éléments poutre ou coque, etc ...). Les méthodes de décomposition de domaines sans recouvrement sont, quant à elles, très largement utilisées en mécanique du solide afin de modéliser des structures de grande taille tout en conservant une description spatiale fine. Les deux variantes historiques sont les approches primale ([Le Tallec, 1994], [Mandel, 1993]) et duale (méthode FETI, [Farhat and Roux, 1991]). A celles-ci s'ajoutent également les méthodes hybrides (FETI — Duale/Primale, [Farhat et al., 2001]), les approches mixtes ([Champaney et al., 1997]) et les approches à trois champs ([Park et al., 1997] et [Brezzi and Marini, 1994]). Ces dernières introduisent une interface fictive entre les sous-domaines (voir Fig.2.1). Dans ce contexte, les forces cohésives ne relient pas directement les sous-domaines entre eux mais au travers de l'interface. Ces efforts assurent, au sens faible, l'égalité des

déplacements de $\Omega^{(e)}$ au niveau de l'interface $u_{e\Gamma}$ et des déplacements de l'interface fictive u_s , parfois ainsi nommés déplacements « fantômes ». Ces efforts de cohésion peuvent donc être vus comme étant des multiplicateurs de Lagrange localisés de chaque côté de l'interface.

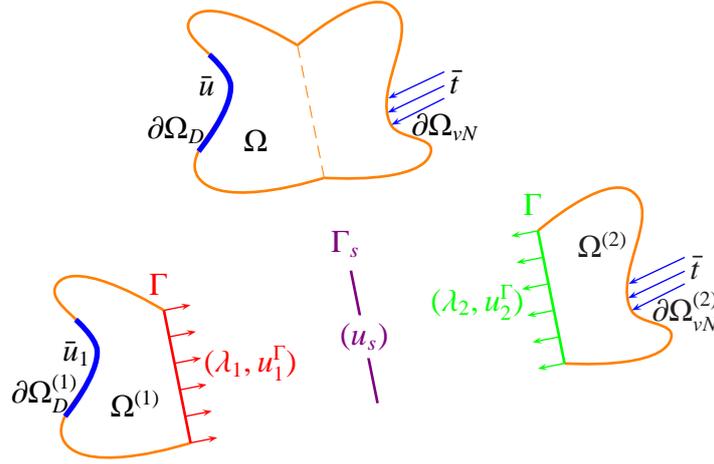


FIGURE 2.1 – Décomposition en sous-domaines et introduction d’une interface fictive, d’après [Hautefeuille, 2009]

L’aspect localisé des multiplicateurs de Lagrange — et leur nécessaire discrétisation — rend possible l’emploi de maillages non correspondants de chaque côté de l’interface. Il s’agit donc ici d’une alternative très intéressante aux méthodes de « mortier » [Bernardi et al., 1994]. C’est ce type d’approche qui a été privilégié dans les développements associés à la thèse de Martin Hautefeuille [Hautefeuille, 2009].

Enfin, on peut également mentionner les méthodes intégrées ne s’appuyant pas sur des techniques de décomposition de domaines, en particulier la méthode FE², introduite dans [Feyel and Chaboche, 2000] et [Kouznetsova et al., 2001]. En se basant sur la théorie du champ moyen en homogénéisation [Bornert et al., 2001], l’intégration numérique de la loi de comportement — étape locale dans la procédure de partitionnement globale–locale pour les méthodes Eléments Finis [Hughes and Taylor, 1978] — sur chaque point de Gauss est remplacée par une analyse EF micro (voir Fig.2.2). A cet effet une première étape de localisation de la déformation macroscopique vers le maillage micro est effectuée sur la base, d’une part de l’hypothèse de séparation des échelles et, d’autre part, en supposant une distribution périodique des hétérogénéités.

Après une présentation des principes généraux à la base des méthodes séquentielles ainsi qu’un exemple associé à cette méthodologie — dans le cadre de la thèse de Nathan Benkemoun —, nous décrivons le développement théorique et la mise en œuvre d’une méthode intégrée. Celle-ci a été l’objet principal de la thèse de Martin Hautefeuille.

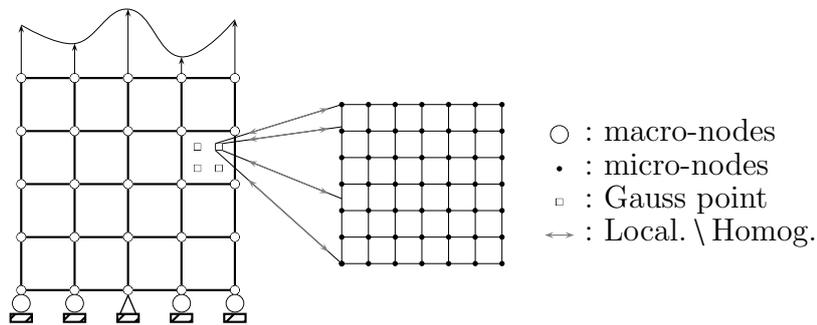


FIGURE 2.2 – Schématisation du principe de base de la méthode FE^2 , d'après [Hautefeuille, 2009]

2.1 Mise en œuvre d'une approche intégrée

2.1.1 Approche à trois champs : multiplicateurs de Lagrange localisés

L'objectif des approches multi-échelles intégrées basées sur la méthode des Éléments Finis est de développer une méthode de communication entre un maillage grossier et un maillage fin, au travers par exemple des points d'intégration de Gauss [Feyel and Chaboche, 2000] ou par des zones de recollement [Ben Dhia, 1998]. Notre développement s'est basé ici sur une méthode de décomposition de domaines à trois champs, introduisant une interface fictive. Chaque sous-domaine est discrétisé finement et entouré par cette interface. Celle-ci peut alors être vue comme le niveau grossier de la discrétisation et chaque élément « macro » comme un conteneur pour un sous-domaine « micro » (Fig.2.3). Le choix fait pour l'interpolation des multiplicateurs de Lagrange locaux conduit à différents types de méthodes, primale ou duale.

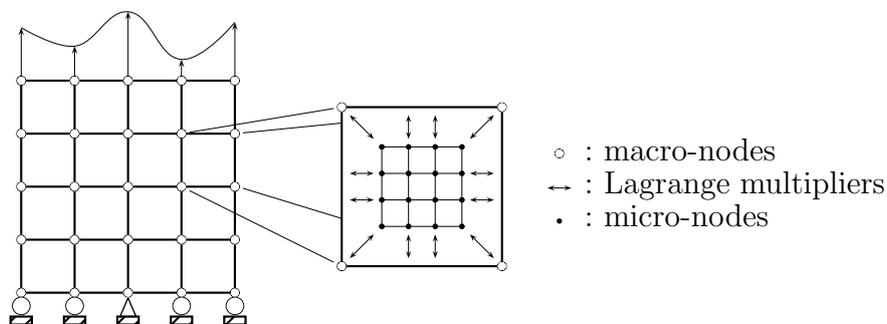


FIGURE 2.3 – Approche intégrée à trois champs, d'après [Hautefeuille, 2009]

Suivant les travaux de [Felippa, 1989] et [Park and Felippa, 2000], la formulation hybride du problème se pose en termes de trois types d'inconnues : les déplacements micro u_e^m définis sur chaque élément macro e , les multiplicateurs de Lagrange localisés λ_e dans chaque élément macro et les déplacements macro u^M . L'énergie potentielle du système complet Π^{tot} s'écrit,

$$\begin{aligned} \Pi^{tot} = & \overbrace{\sum_{e=1}^{n_{el}} \left(\underbrace{\int_{\Omega_e^m} \Psi_e(\mathcal{E}_e^m) d\Omega}_{\Pi_e^{int}(u_e^m)} - \underbrace{\int_{\Omega_e^m} \bar{b}_e^m \cdot u_e^m d\Omega}_{\Pi_{eb}^{ext}(u_e^m)} + \underbrace{\int_{\partial\Omega_e^m} \lambda_e \cdot (u_e^m - u^M) dS}_{\Pi_e^\lambda(u_e^m, \lambda_e, u^M)} \right)}^{\Pi^{int}(u_e^m, \lambda_e, u^M)} \\ & - \underbrace{\int_{\partial\Omega_{vN}^M} u^M \cdot \bar{t} dS}_{\Pi^{ext}(u^M)} \end{aligned} \quad (2.1)$$

en considérant que les forces de volume \bar{b}_e^m sont présentes au niveau micro et les vecteurs contraintes imposés \bar{t} au niveau macro. La stationnarité de (2.1) conduit au problème :

Etant donnés : $\bar{b}_e^m : \Omega_e^m \rightarrow \mathbb{R}$, pour chaque sous-domaine e
 $\bar{t} : \partial\Omega_{vN}^M \rightarrow \mathbb{R}$,
 Quels que soient : $\delta u_e^m \in \mathbb{U}_e^m$ et $\delta \lambda_e \in \Lambda_e$, pour chaque sous-domaine e
 $\delta u^M \in \mathbb{U}^{M0}$
 Trouver : $u_e^m \in \mathbb{U}_e^m$ et $\lambda_e \in \Lambda_e$, pour chaque sous-domaine e
 $u^M \in \mathbb{U}^M$
 Tels que :

$$\begin{aligned} -2-2 \quad 0 = & \sum_{e=1}^{n_{el}} \left(\int_{\Omega_e^m} \sigma_e^m \cdot \partial_x \delta u_e^m d\Omega - \left(\int_{\Omega_e^m} \bar{b}_e^m \cdot \delta u_e^m d\Omega + \int_{\partial\Omega_e^m} \lambda_e \cdot \delta u_e^m dS \right) \right) \\ & - \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\partial\Omega_e^m} \delta \lambda_e \cdot (u_e^m - u^M) dS \\ & + \sum_{e=1}^{n_{el}} \left(\int_{\partial\Omega_e^m} \lambda_e \cdot \delta u^M dS \right) - \int_{\partial\Omega_{vN}^M} \delta u^M \cdot \bar{t} dS \end{aligned} \quad (2.2)$$

L'introduction de trois discrétisations EF sous la forme,

$$u_{eh}^m = U_e^{mT} \cdot N_e^m \quad (2.3a)$$

$$\lambda_{eh} = \Lambda_e^T \cdot N_e^\lambda \quad (2.3b)$$

$$u_h^M = U^{MT} \cdot N^M \quad (2.3c)$$

conduit au système d'équations aux résidus :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{r}^m(U_e^m, \Lambda_e) \\ \mathbf{r}^\lambda(U_e^m, U_e^M) \\ r^M(\Lambda_e) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

Dans (2.4), la première composante traduit les équilibres des différents sous-domaines. Ces sous-problèmes n'ont pas de conditions aux limites de Dirichlet car seuls des efforts, au travers des multiplicateurs de Lagrange, leur sont appliqués ; ils sont donc, pris indépendamment, mal posés. Néanmoins l'espace affine complet engendré par toutes les solutions de chaque sous-domaine pris séparément n'est pas toujours solution du problème multi-échelles pour lequel tous les sous-problèmes sont couplés. Une façon classique de résoudre cette difficulté est de décomposer le déplacement d'un sous-domaine e en une partie déformante \tilde{u}_e^m — un point quelconque de l'espace affine solution — et une partie rigidifiante $u_e^{m,r}$ [Fraeijs de Veubeke, 1980] :

$$u_e^m = \tilde{u}_e^m + u_e^{m,r} \quad (2.5)$$

En substituant cette décomposition (2.5) des déplacements micro dans la formulation variationnelle (2.2) et avec la donnée d'une base des mouvements de corps rigide R_e — six vecteurs en trois dimensions — le système (2.4) devient :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{r}^m(\tilde{U}_e^m, \Lambda_e) \\ \mathbf{r}^\lambda(\tilde{U}_e^m, \alpha_e, U_e^M) \\ \mathbf{r}^\alpha(\Lambda_e) \\ r^M(\Lambda_e) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

où les α_e représentent les projections du mouvement rigidifiant sur chaque vecteur de base R_e .

La linéarisation de (2.6) conduit à un système d'équations linéaires de très grande taille. L'outil clé est ici l'utilisation de deux condensations statiques successives, définissant ainsi trois niveaux de résolution pour chaque itération du problème global : un niveau micro où chaque composante de \mathbf{r}^m est annulée, de façon indépendante ; il s'agit donc ici d'une famille de calculs EF non-linéaires. Un second niveau cherchant à annuler chaque composante de \mathbf{r}^λ et de \mathbf{r}^α . Enfin, une dernière étape de résolution du problème macro $r^M = 0$

Grâce à une approche à trois champs [Park et al., 1997] et aux condensations statiques, le niveau de calcul macro hérite des propriétés dues à l'opération classique d'assemblage Eléments Finis, notamment une matrice à structure creuse. Cette échelle macro constitue bien le niveau d'intérêt, dont le comportement est enrichi par une description fine à l'échelle inférieure.

Dans la mesure où les calculs à l'échelle micro sont indépendants et où la taille de ces problèmes est potentiellement beaucoup plus importante que celle du problème macro, la méthode intégrée présentée ici a fait l'objet de développements numériques

dédiés. L'architecture MuSCAd — Multi-Scale Strongly Coupled Algorithm Component Architecture — a été développée par Martin Hautefeuille pendant sa thèse en cotutelle avec la TU Braunschweig.

2.1.2 L'architecture MuSCAd

Cette architecture a été mise en œuvre numérique dans le cadre de la Programmation Orientée Composant (POC, [Szyperki, 1998]), paradigme qui trouve une place très importante dans notre travail et qui fait l'objet du chapitre 4 de ce document.

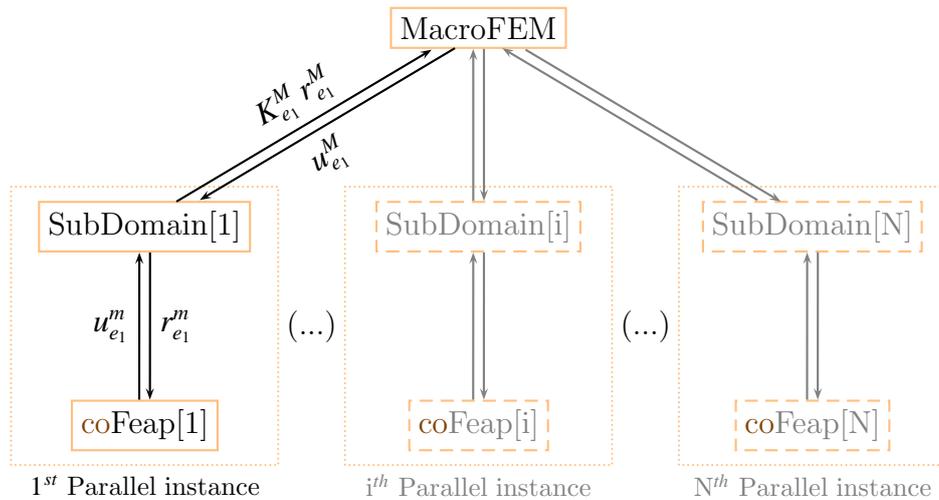


FIGURE 2.4 – Architecture MuSCAd constituée de N éléments macro en interaction, d'après [Hautefeuille, 2009]

La figure 2.4 schématise le fonctionnement de MuSCAd. A l'échelle macro un logiciel « client » se charge des requêtes concernant les quantités macro élémentaires — matrices de raideurs et résidus élémentaires. Il gère également l'opération d'assemblage et, dans sa version initiale, la résolution du système d'équations linéaires associé. A l'échelle micro, MuSCAd utilise, comme un « service », le composant coFeap, développés dans les thèses de Christophe Kassiotis et Martin Hautefeuille sur la base du code de calcul par Éléments Finis Feap [Zienkiewicz and Taylor, 2001b]. Grâce à une définition générique de son interface, ce composant peut être aisément remplacé et ainsi conduire à l'emploi d'un autre code EF à l'échelle micro. Ce point particulièrement notable est une conséquence immédiate de la POC. Enfin, entre le client macro et le service micro se trouve un composant « Sous-domaine ». Celui-ci est à la fois un client pour coFeap et un service pour l'échelle macro. Son rôle est de répondre à la deuxième étape de la méthode intégrée décrite précédemment en annulant les composantes du vecteur résidu liées aux multiplicateurs de Lagrange et aux mouvements de corps rigide.

Ainsi l'architecture MuSCAd est réalisée à partir d'un code macro — dont les fonctionnalités sont très semblables à celles offertes par tout logiciel EF — et de deux

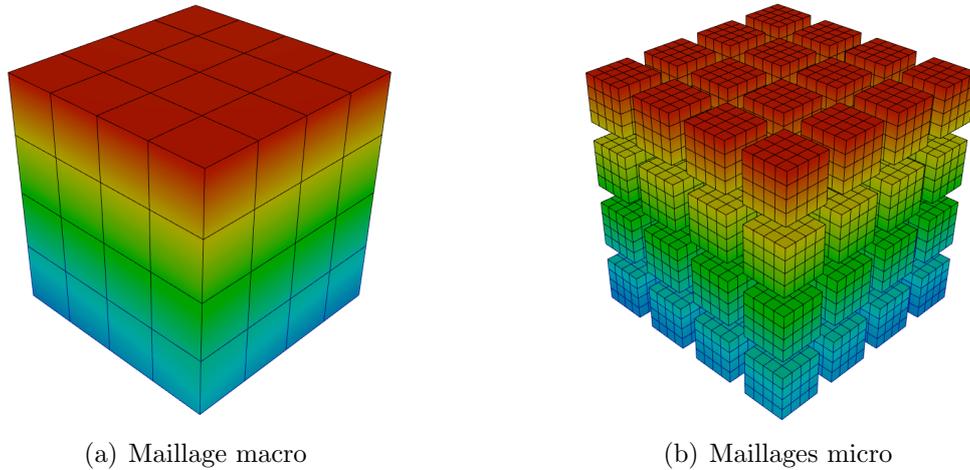


FIGURE 2.5 – Décomposition d’un cube en $4 \times 4 \times 4$ sous-domaines, d’après [Hautefeuille, 2009]

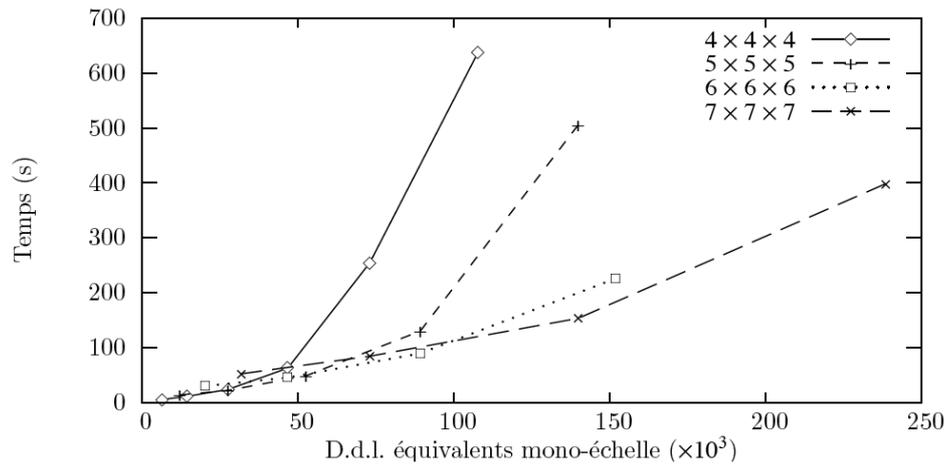
composants fonctionnant conjointement. Chaque paire de ces composants peut être instantiée plusieurs fois et appelée de manière asynchrone, au travers d’un réseau, sur un cluster ou une machine multi-processeurs. Cette aptitude conduit naturellement à une diminution importante du temps de calcul total. Un test réalisé sur une machine quadri-cœurs et à partir d’une géométrie cubique en traction simple élastique met en avant l’influence de la discrétisation macro (Fig.2.5). Cette influence est établie sur la base du temps de calcul CPU total ainsi que de la quantité de RAM utilisée par le déploiement de l’architecture complète. La discrétisation macro cartésienne évolue et la figure 2.6 montre son influence en termes de degrés de liberté équivalents à une approche mono-échelle.

Il est intéressant de constater que, grâce à la répartition de l’effort numérique entre les sous-domaines, ce cas test peut être résolu en utilisant des solveurs directs à tous les niveaux. De part la demande importante en mémoire que ces solveurs requièrent, la résolution de ce problème en mono-échelle ne pourrait se faire que par l’intermédiaire de solveurs itératifs. Ces derniers étant sensibles au type de problème à traiter et généralement restreints à des matrices définies positives, la possibilité offerte par l’approche intégrée d’employer des solveurs directs pour un nombre de degrés de liberté important est un résultat majeur.

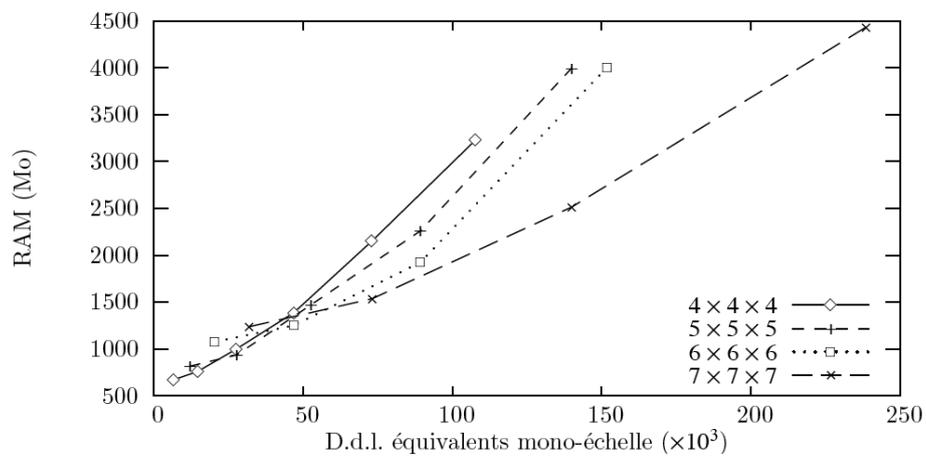
2.1.3 Application aux matériaux hétérogènes

Conjointement avec le modèle mesoscopique présenté dans le premier Chapitre de ce document, la méthode multi-échelles intégrée développée ici trouve un champ d’applications naturel dans la modélisation des matériaux hétérogènes.

La figure 2.8 montre les résultats obtenus, aux deux échelles, pour un cube de 10^{-3} m^3 contenant 46 inclusions sphériques de 2 cm de diamètre (Fig.2.7(a)), fraction



(a) Temps CPU total



(b) RAM utilisée

FIGURE 2.6 – Influence de la discrétisation macro en termes de degrés de liberté équivalents mono-échelle, d'après [Hautefeuille, 2009]

volumique d'environ 20%). L'ensemble est considéré comme étant élastique linéaire et un rapport de dix est choisi entre les modules des deux phases (les inclusions sont supposées plus rigides). Ce cube est discrétisé en 343 sous-domaines, chacun correspondant à un élément macro (Fig.2.7(b)). Les conditions aux limites sont appliquées à l'échelle macro et les forces de volume sont négligées. Bien que l'ensemble du comportement soit linéaire et les conditions aux limites simples, l'hétérogénéité introduite à l'échelle fine conduit à un champ de déplacements micro « bruité » (Fig. 2.8a). On peut vérifier que cette information se transmet bien à l'échelle macroscopique (Fig.2.8b) et ainsi mettre en évidence le couplage entre ces deux échelles.

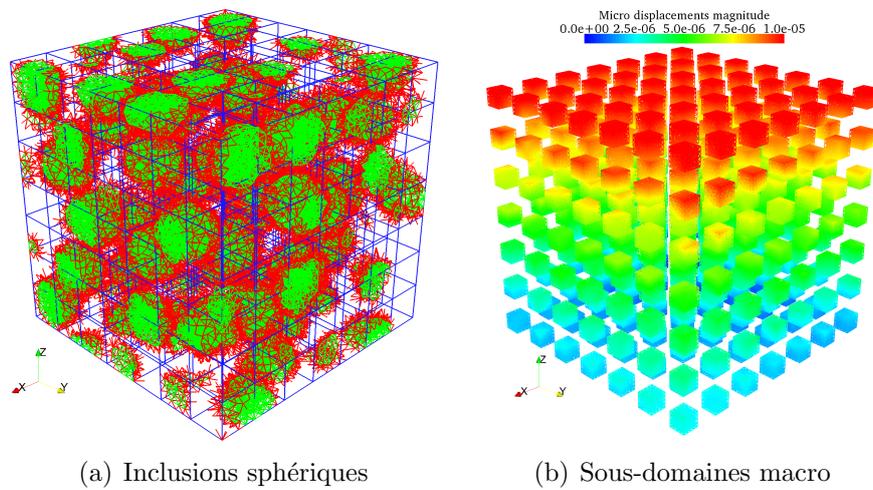


FIGURE 2.7 – Application de la méthode multi-échelles intégrée à un milieu hétérogène, d'après [Hautefeuille, 2009]

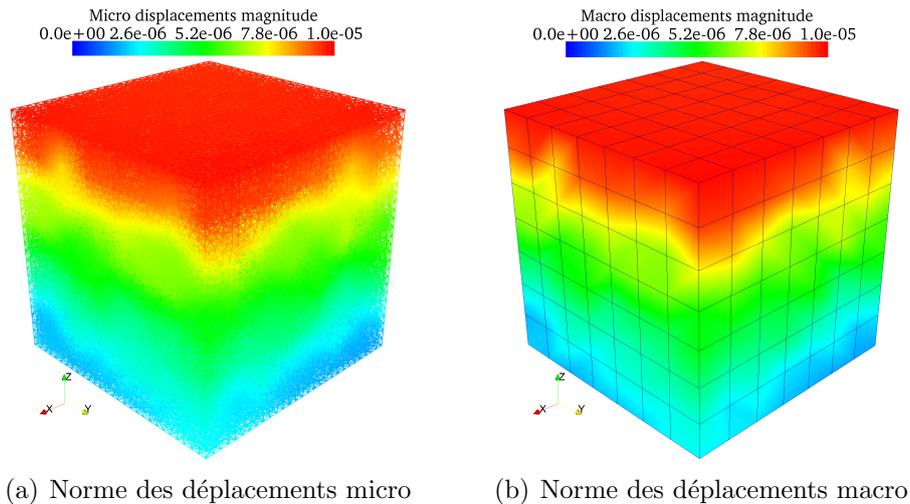


FIGURE 2.8 – Comparaison des déplacements micro et macro obtenus pour un matériau hétérogène sous sollicitation simple, d'après [Hautefeuille, 2009]

La méthode intégrée permet, dans le cas non-linéaire, de retrouver l'ensemble des réponses macroscopiques obtenues par une approche séquentielle. La figure 2.9(a) montre par exemple le faciès de fissuration, à l'échelle fine, obtenu en considérant des interfaces matrice-inclusions quasi-fragiles. On observe ainsi la rupture de ces interfaces et la décohésion entraînée. Celle-ci n'apparaît pas dans chaque sous-domaine de manière indépendante mais est bien « traversante » et continue entre les macro éléments adjacents. La figure 2.9(a)b présente l'évolution des efforts macroscopiques — les réactions, au sens Eléments Finis, associées à la discrétisation macro — en fonction du déplacement imposé, macroscopique également. On observe une diminution de la raideur en association avec la décohésion.

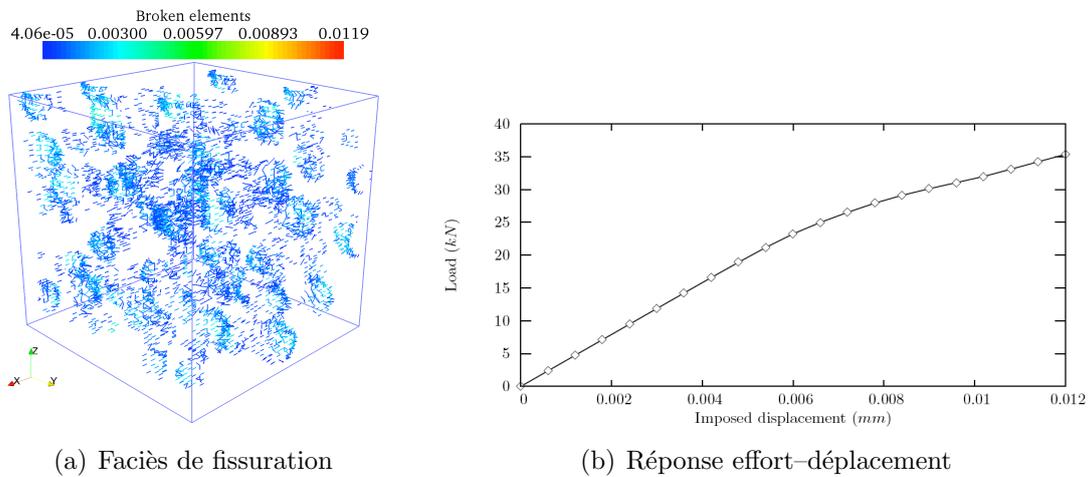


FIGURE 2.9 – Réponse de la méthode intégrée en décohésion, d'après [Hautefeuille, 2009]

Finalement, en considérant la matrice comme étant également avec un comportement quasi-fragile, la fissuration induite par une sollicitation macroscopique de traction simple devient traversante. La figure 2.10(a) présente ainsi la fissure macroscopique obtenue. Celle-ci est clairement continue au passage d'un élément macro à un autre ce qui montre la pertinence du couplage entre les deux échelles. La fissuration, bien que prenant naissance à l'échelle fine où les discontinuités fortes sont introduites, a une influence sur la réponse macroscopique de la structure. Ceci est clairement établi par la figure 2.10(a)b où l'on observe trois phases successives de comportement. Une première linéaire, suivie par une perte de raideur à rapprocher de la rupture progressive des interfaces et donc de la décohésion des inclusions, et finalement une phase adoucissante due à la coalescence des fissures en une seule macro-fissure traversante. Cette continuité n'est possible qu'au travers du couplage fort et de l'influence de l'échelle macroscopique sur les réponses des sous-domaines. Au final la réponse complète de la structure est très similaire à celle observée en utilisant une approche séquentielle mais avec un temps d'analyse plus réduit. La complexité liée à la mise en œuvre de la méthode conduit nécessairement à un coût de

calcul total en augmentation mais le schéma intégré permet la distribution de celui-ci sur un ensemble de processeurs ou de machines plus ou moins hétérogènes. Dans ce sens les approches intégrées constituent une voie prometteuse dans la perspective de résoudre des problèmes de tailles croissantes.

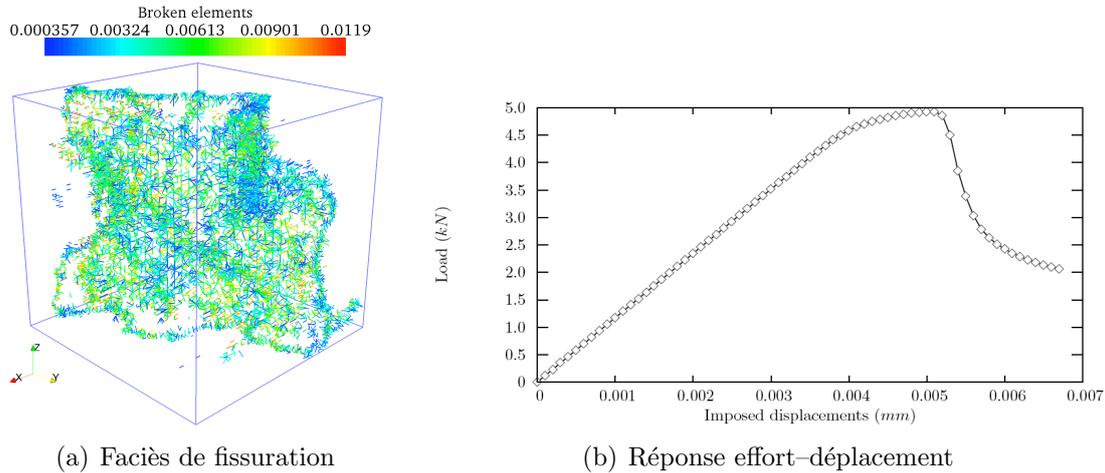


FIGURE 2.10 – Réponse de la méthode intégrée en non-linéaire, d’après [Hautefeuille, 2009]

2.1.4 Perspectives pour les approches intégrées

La formulation adoptée dans le travail de thèse de Martin Hautefeuille ainsi que les développements logiciels liés à MuSCAd ont conduit à mettre en place une architecture lourde mais très générale. Les intérêts liés à cette approche sont donc nombreux, notamment en offrant la possibilité de résoudre des problèmes de grande taille avec des solveurs directs. D’autre part l’expérience pratique a montré une grande influence de la finesse de la discrétisation macroscopique. A nombre de degrés de liberté constant, l’augmentation du nombre d’éléments macro conduit à une amélioration significative des performances et une diminution des coûts de calcul. Dans cet esprit, des développements basés sur les méthodes multi-grilles ([Hackbush, 1985]) ont commencé dans le cadre de la thèse de Mehdi Asali. L’idée sous-jacente est de considérer la discrétisation macro associée à la méthode multi-échelles comme la grille la plus fine d’une méthode multi-grilles géométriques. On définit ainsi un ensemble de n niveaux :

- le niveau « micro », défini dans MuSCAd et correspondant à la discrétisation physique du milieu hétérogène en conformité avec les principes posés dans le Chapitre 1 de ce document ;
- le niveau « macro » de MuSCAd, immédiatement supérieur au niveau précédent et pour lequel nous supposons une discrétisation régulière ;

- les $n-2$ niveaux restants correspondants à des maillages ou des grilles régulières de plus en plus grossières.

Ce schéma est en accord avec la volonté de mettre en place un niveau fin — sans doute plusieurs centaines de milliers de degrés de liberté — de discrétisation macro dans l’architecture MuSCAd. De plus, il permet de profiter naturellement d’une discrétisation régulière nécessaire à la mise en place d’une méthode multi-grilles géométrique, le couplage fort entre les deux échelles les plus fines étant assuré sur la base des principes de la méthode multi-échelles intégrées. Enfin, cette dernière s’appuyant sur une décomposition de domaines sans recouvrement, la combinaison proposée devrait permettre de faire bénéficier simplement la méthode multi-grilles de cette possibilité de distribution des tâches.

2.2 Conclusions pour les approches multi-échelles numériques

Les approches multi-échelles intégrées conduisent à mettre en place un couplage fort entre deux échelles de simulation. Bien que plus complexes à mettre en œuvre numériquement, ce dialogue permanent entre les échelles permet d’imposer des trajets de chargement pertinents à l’échelle fine ce qui constitue un avantage majeur par comparaison aux méthodes séquentielles. Le cadre adopté dans les travaux synthétisés dans ce document est liée aux méthodes à trois champs et s’appuient sur les Multiplicateurs de Lagrange Localisés. Ce schéma conduit à une formulation lourde mais générale. L’architecture logicielle basée sur la Programmation Orientée Composant permet de tirer pleinement parti de la décomposition de domaines sous-jacente en distribuant l’effort numérique total.

De notre point de vue, les approches intégrées, déjà très développées dans certains domaines d’applications comme l’aéronautique, constituent une voie importante pour la modélisation numérique en Génie Civil. Dans le futur, elles permettent ainsi d’envisager un lien numérique entre des modèles à des échelles très différentes : modèles phénoménologiques au niveau structurel, modèle mesoscopique tel que celui présenté dans le premier chapitre, modèles thermo-hydro-mécanique à une échelle très fine. Pour les matériaux cimentaires, seule l’échelle d’une structure de grandes dimensions peut être supposée séparée des autres. Ce type d’architecture n’est ainsi envisageable qu’en introduisant des niveaux intermédiaires, portant moins de sens physique. C’est dans cet esprit que les méthodes multi-grilles nous semblent constituées une bonne combinaison avec les méthodes multi-échelles intégrées, davantage constitutives d’un sens mécanique.

Chapitre 3

Aspects probabilistes pour les matériaux hétérogènes

Contents

3.1	Méthodes d'intégration stochastique	53
3.1.1	Méthodes d'intégration directes	53
3.1.2	Méthodes d'intégration indirectes	54
3.2	Mise en données probabilistes	57
3.2.1	Champs aléatoires	59
3.2.2	Décomposition de Karhunen–Loève	61
3.2.2.1	Aspects théoriques	61
3.2.2.2	Mise en œuvre pratique	63
3.3	Aspects expérimentaux	64
3.3.1	Acquisition de données concernant la cinétique de lixiviation des bétons	64
3.3.2	Identification inverse d'un modèle simplifié de dégradation	65
3.3.3	Mises en œuvre pour la prévision de durées de vie	71
3.4	Perspectives : morphologie	76
3.5	Conclusions	83

La prise en compte des aspects probabilistes est un point majeur de la démarche présentée ici autour de la modélisation des matériaux hétérogènes. Elle apparaît à plusieurs niveaux et en premier lieu dans la mise en données, c'est-à-dire dans le choix et la description d'un espace probabilisé Ω , adapté au problème physique à résoudre. Afin d'éclairer ce choix, cette mise en données nécessite, d'une part des informations expérimentales et, d'autre part, des outils de modélisation issus de la théorie des probabilités : Variables Aléatoires, processus aléatoires et, le plus souvent, champs aléatoires [Adler, 1981]. Ces derniers peuvent être vus — c'est sans doute le point de vue le plus intéressant pour les travaux synthétisés ici — comme une famille de variables aléatoires réelles, vectorielles ou tensorielles, attachées à chaque point d'un domaine spatial. Ces champs trouvent une place importante dans nos travaux et leur étude est encore un sujet très actif, notamment dans la communauté des mathématiques appliquées. Une représentation spectrale peut en être donnée au travers de la décomposition de Karhunen–Loève [Loève, 1977]. Cette décomposition est extrêmement utile pour les champs Gaussiens et, de manière générale, elle est nécessaire pour la mise en œuvre pratique des méthodes de Monte Carlo. Nous la présentons, ainsi que quelques éléments concernant son implémentation numérique, dans la partie 3.2.2.

A la suite du choix d'un espace probabilisé adapté, se pose la question de la résolution numérique des problèmes stochastiques. Même si cette résolution peut avoir plusieurs finalités — calculs des moments statistiques de la solution, estimation de la probabilité d'occurrence d'un événement rare, analyse de sensibilité — elle consiste indifféremment à intégrer une fonctionnelle de la solution dans Ω . On parle donc, en ce qui concerne les méthodes de résolution de problèmes stochastiques, de méthodes d'intégration. Celles-ci peuvent être directes — famille des méthodes dites de Monte Carlo — ou indirectes.

Sur un plan abstrait (voir [Mathies, 2008]), la situation peut se décrire ainsi : un opérateur A , décrivant le comportement d'un système physique, relie la réponse U de ce système aux sollicitations F qui lui sont imposées par le milieu extérieur :

$$A : U \mapsto F \tag{3.1}$$

Habituellement la sollicitation $f \in F$ est connue et on recherche la réponse $u \in U$ du système. La relation (3.1) doit être inversée et l'équation $A(u) = f$ résolue. Dans ce contexte, les incertitudes peuvent prendre place dans f — on parle alors de problème additif — et/ou dans A — problème multiplicatif. Ce dernier cas est le plus intéressant car u est alors une fonction non linéaire de A , même si A est linéaire. En d'autres termes, pour un problème multiplicatif, l'espérance de la solution n'est pas la solution obtenue en considérant les espérances des paramètres du modèle, même pour un problème linéaire. Ce point est, à notre avis, un des éléments essentiels qui doit amener à considérer l'emploi d'approches probabilistes dans une démarche de modélisation.

3.1 Méthodes d'intégration stochastique

Sur le plan de la modélisation, les travaux que nous menons en collaboration avec l'équipe du Pr. Matthies se concentrent tout d'abord sur la problématique de l'intégration des problèmes stochastiques. Les méthodes d'intégration directes sont maintenant très couramment utilisées dans l'équipe et la Programmation Orientée Composant tient ici encore une place clé. Les méthodes d'intégration indirectes (EF stochastiques basés sur une décomposition spectrale) font également l'objet de certains développements mais, malgré de nombreux efforts, ne permettent pas encore d'envisager des problèmes de taille importante.

3.1.1 Méthodes d'intégration directes

Les méthodes d'intégration stochastique directes font référence à la famille des méthodes dites de Monte Carlo [Caffisch, 1998]. Nous les présentons sous l'angle qui nous semble le plus intéressant pour la mécanique numérique, c'est-à-dire comme des méthodes d'intégration numérique dans un espace de dimension élevée. En effet, le calcul des moments statistiques ou de la probabilité d'occurrence d'un événement donné peut se mettre sous la forme du calcul d'une fonctionnelle,

$$\mathbb{E} [\Psi(\mathbf{x}, \omega, u(\mathbf{x}, \omega))] = \int_{\Omega} \Psi(\mathbf{x}, \omega, u(\mathbf{x}, \omega)) d\mathbb{P}(\omega) \quad (3.2)$$

où $u(\mathbf{x}, \omega)$ est la solution — probabiliste — du problème considéré. Cette dernière étant la plupart du temps inaccessible, l'idée commune à cette famille de méthodes est d'évaluer l'intégrand de (3.2) en un certain nombre Z de points d'intégration $\{\omega_z\}_{z=1}^Z$ dans Ω . On obtient ainsi une approximation de la fonctionnelle sous la forme :

$$\int_{\Omega} \Psi(\mathbf{x}, \omega, u(\mathbf{x}, \omega)) d\mathbb{P}(\omega) = \sum_{z=1}^Z p_z \Psi(\mathbf{x}, \omega, u(\mathbf{x}, \omega_z)) + \mathcal{O}\left(\frac{\|\Psi\|}{Z^{1/2}}\right) \quad (3.3)$$

Chacun des points ω_z est une réalisation — au sens de l'espace probabilisé choisi — du problème et son évaluation $\Psi(\mathbf{x}, \omega, u(\mathbf{x}, \omega_z))$ dans (3.3) consiste en la résolution d'un problème déterministe, par exemple par Eléments Finis.

Les méthodes diffèrent par le choix des poids p_z . Le cas le plus fréquent consiste à choisir une séquence aléatoire de points dans Ω , suivant la mesure de probabilité $\mathbb{P}(\omega)$, et conduit, dans le langage courant, à la méthode de Monte Carlo. L'effort numérique pour atteindre une erreur en loi donnée est généralement important et différentes améliorations peuvent être apportées. Parmi elles les méthodes dites Quasi Monte Carlo consistent à choisir les points d'intégration de manière déterministe, en s'appuyant par exemple sur des suites de nombres à discrétion faible comme celle de Van der Corput [Kuipers and Niederreiter, 2005]. La convergence en loi s'en trouve améliorée pour atteindre $\mathcal{O}(\|\Psi\| Z^{-1}(\log Z)^{-m})$, où m est le nombre de dimensions stochastiques. Des méthodes de quadrature « creuse » [Smolyak, 1963] peuvent

également être envisagées bien que leur efficacité ait été démontrée pour un nombre limité de dimensions.

La mise en pratique de ces deux alternatives a, dans la plupart des cas, montré la supériorité pratique de la méthode de Monte Carlo. Celle-ci est en effet extrêmement robuste vis-à-vis de la classe de problèmes envisagée, en particulier dans le cas de fortes non linéarités : fissuration (thèse de Nathan Benkemoun [Benkemoun, 2010]), diffusion non linéaire (thèse de Thomas de Larrard [de Larrard, 2010]). Cette robustesse s'accompagne d'une indépendance de la vitesse de convergence vis-à-vis de la dimension de Ω , ce qui est un atout majeur dans la construction d'un cadre général de résolution des problèmes stochastiques. Enfin, comme la plupart des méthodes d'intégration directes, la méthode de Monte Carlo est très peu intrusive et cette caractéristique constitue un point clé dans le cadre de la Programmation Orientée Composant (voir le chapitre 4). L'évaluation de l'intégrant ne nécessite que la connaissance du point d'intégration ω_z . De façon abstraite, celui-ci peut être donc soumis à un « évaluateur », de nature très variable et construit sur la base de différentes méthodes numériques (Eléments Finis, Volumes Finis, etc ...).

Le cadre formé par les méthodes d'intégration stochastique directes nous apparaît donc, dans la pratique, comme bien adapté à une approche unifiée de résolution des problèmes stochastiques formés sur la base de problèmes déterministes dont la résolution est supposée maîtrisée. Les difficultés se concentrent essentiellement sur, d'une part le nombre de points d'intégration élevé à mettre en œuvre et, d'autre part, sur le choix et la génération de ces points d'intégration. Face à l'effort numérique potentiellement important nous verrons, sur le plan théorique, mais également au travers d'exemples, que la Programmation Orientée Composant permet de profiter pleinement de l'indépendance des $\{\omega_z\}_{z=1}^Z$. Quant à leur génération, le niveau de complexité est ici fortement lié à la modélisation probabiliste choisie. Dans le cas fréquent d'une modélisation par des champs aléatoires corrélés, la synthèse de réalisations indépendantes est un problème majeur dans le processus complet d'intégration stochastique. A cet effet, la maîtrise théorique et pratique de la décomposition de Karhunen-Loève — décomposition spectrale d'un champ aléatoire d'ordre deux — est un point essentiel de nos travaux sur les aspects probabilistes en mécanique numérique.

3.1.2 Méthodes d'intégration indirectes

Les méthodes d'intégration stochastique directes décrites précédemment ont un caractère très général et permettent de s'adapter à de très nombreuses classes de problèmes et de non-linéarités. Cet aspect, souvent vu comme un avantage majeur de ce type de méthodes, conduit également à penser que les méthodes directes ne sont pas en mesure de profiter de la régularité inhérente à certains problèmes, notamment dans le cas linéaire.

Afin de tirer partie de cet aspect, et contrairement aux méthodes directes, les méthodes d'intégration indirectes s'appuient, en premier lieu sur une formulation

affaiblié du problème dans Ω , puis sur une discrétisation de cet espace. La structure de Ω conduit au choix et à la mise en œuvre d'une discrétisation spectrale — « p-method » pure — initialement décrite et appliquée à la mécanique numérique par [Ghanem and Spanos, 1991]. Bien que cette approche soit aujourd'hui fréquemment référencée sous le nom de « Stochastic Finite Element Method » — SFEM — il nous apparaît important de garder en mémoire la signification de la dénomination originale sous la forme « Spectral Finite Element Method ».

La discrétisation stochastique mise en œuvre par [Ghanem and Spanos, 1991] s'appuie sur des fonctions polynomiales d'ordres potentiellement élevés et connues sous le nom de « chaos polynomial ». A l'origine introduites par [Wiener, 1938], ces fonctions forment une base de $\mathbb{L}_2(\Omega)$ et donc ici des Variables Aléatoires à variance finie, par exemple $k(\omega)$. On obtient alors la décomposition,

$$k(\omega) = \sum_{\alpha \in \mathcal{I}} k^{(\alpha)} H_{\alpha}(\Theta(\omega)) \quad (3.4)$$

avec,

$$H_{\alpha}(\Theta(\omega)) = \prod_{i=1}^{+\infty} h_{\alpha_j}(\Theta_j(\omega)) \quad (3.5)$$

Les polynômes H_{α} sont des fonctions multi-dimensionnelles formées par le produit des polynômes d'Hermite uni-dimensionnels h_{α_j} . Afin de préciser le degré de ce polynôme pour chaque dimension, il s'avère utile d'introduire une notation au travers de l'ensemble des multi-indices sous la forme :

$$\mathcal{I} = \left\{ \alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots), \alpha_j \in \mathbb{N}_0, |\alpha| = \sum_{j=1}^{+\infty} \alpha_j < \infty \right\} \quad (3.6)$$

Dans (3.6) chaque $\alpha \in \mathcal{I}$ ne possède qu'un nombre fini d'éléments non nuls et chacun d'entre eux représente le degré d'interpolation polynomiale dans la dimension correspondante. A noter que le mot « chaos » ne fait pas référence au caractère imprévisible d'un système dynamique — signification moderne en mathématiques — mais plutôt à l'aspect polynomial et multi-dimensionnel de la relation (3.4).

Les polynômes H_{α} forment une base orthogonale de $\mathbb{L}_2(\Omega)$, au sens du produit scalaire défini par l'espérance du produit de deux Variables Aléatoires,

$$\langle H_{\alpha}, H_{\beta} \rangle = \mathbf{E} [H_{\alpha} H_{\beta}] = \alpha! \delta_{\alpha\beta} \quad (3.7)$$

et cette propriété permet de calculer les coefficients apparaissant dans (3.4) sous la forme :

$$k^{(\alpha)} = \frac{1}{\|H_{\alpha}\|_2} \mathbf{E} [H_{\alpha} k(\omega)] = \frac{1}{\alpha!} \mathbf{E} [H_{\alpha} k(\omega)] \quad (3.8)$$

Ce calcul peut être mené numériquement — par exemple suivant une méthode d'intégration directe ... — ou analytiquement pour certaines classes de Variables Aléatoires (voir [Malliavin, 1997]).

A partir d'une forme faible d'un problème multiplicatif, la définition de la base formée par les H_α permet également d'envisager la recherche d'une solution dans un espace d'approximation de Ω . Il ne s'agit pas ici de détailler l'ensemble de cette démarche mais de présenter la forme générale du problème discret obtenu et d'en tirer des conclusions concrètes quant à la mise en œuvre pratique des méthodes d'intégration stochastique indirectes. La comparaison avec les méthodes directes présentées ci-dessus est de plus riche d'informations.

Considérant un problème multiplicatif linéaire, discrétisé en espace sous la forme,

$$\mathbf{K}(\omega) \cdot \mathbf{u}(\omega) = \mathbf{f} \quad (3.9)$$

où \mathbf{K} est, par exemple, une matrice de raideur en mécanique. $\mathbf{K}(\omega)$ est un ensemble de Variables Aléatoires et peut être discrétisée, dans l'espace probabiliste et compte tenu de la relation (3.4), sous la forme,

$$\mathbf{K}(\omega) = \sum_{\alpha \in \mathcal{I}} \mathbf{K}^{(\alpha)} H_\alpha(\omega) \quad (3.10)$$

et, de la même façon, pour $\mathbf{u}(\omega)$:

$$\mathbf{u}(\omega) = \sum_{\alpha \in \mathcal{I}} \mathbf{u}^{(\alpha)} H_\alpha(\omega) \quad (3.11)$$

A partir d'une formulation faible du problème initial et des approximations (3.10) et (3.11) on aboutit au système d'équations linéaires de la forme,

$$\left[\sum_{\alpha} \Delta^{(\alpha)} \otimes \mathbf{K}^{(\alpha)} \right] \cdot \mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (3.12)$$

où $\mathbf{u} = [\dots, \mathbf{u}^{(\alpha)}, \dots]$ est un vecteur d'inconnues rassemblant l'ensemble des coefficients, par blocs, issus de la discrétisation (3.11). De même, \mathbf{f} rassemble les composantes de \mathbf{f} — ici supposé déterministe — dans la base des polynômes H_α . De manière explicite on peut donc écrire $\mathbf{f} = [\dots, \mathbf{f}^{(\alpha)}, \dots]$ avec :

$$\mathbf{f}^{(\alpha)} = \langle \mathbf{f}, H_\alpha \rangle = \mathbf{E}[\mathbf{f}, H_\alpha] \quad (3.13)$$

Enfin, la matrice définie par la relation (3.12) est définie par blocs. Les matrices $\Delta^{(\alpha)}$ sont définies par le triple produit :

$$\left(\Delta^{(\alpha)} \right)_{\beta\gamma} = \mathbf{E} \left[H_\alpha H_\beta H_\gamma \right] \quad (3.14)$$

Ce produit est connu de manière analytique dans le cas des polynômes d'Hermite au travers des constantes de l'Algèbre d'Hermite (voir par exemple [Grgin and Sandri, 1996] pour une expression explicite de ces constantes). Quant aux matrices $\mathbf{K}^{(\alpha)}$ elles correspondent aux composantes de $\mathbf{K}(\omega)$ dans la base définie par les H_α .

Le système (3.12) est, dans la majorité des cas, de très grande taille. Sa structure révèle en effet des blocs dont la dimension est égale à celle du problème discrétisé en espace (3.9). Le nombre de blocs est quant à lui déterminé par le nombre de polynômes retenus dans la discrétisation stochastique. Ce nombre découle directement de la dimension stochastique — dépendant lui même de la mise en données choisies, §3.2 — et du degré d'interpolation choisi. Il croît ainsi très rapidement et, dans tous les cas pratiques, n'est jamais inférieur à quelques centaines. En conséquence on peut voir ces méthodes d'intégration indirectes comme la résolution *couplée* de plusieurs problèmes déterministes. Chacun de ces problèmes définit un bloc au travers de la matrice $\mathbf{K}^{(a)}$. Ces matrices peuvent être évaluées numériquement et de façon indépendante, en lançant, par exemple, des requêtes asynchrones à plusieurs composants EF (ces aspects sont développés en lien avec la Programmation Orientée Composant, chapitre 4 de ce document). En comparaison, les méthodes d'intégration directes conduisent à la résolution d'un plus grand nombre de problèmes déterministes. Ces derniers sont dans ce cas découplés et peuvent donc être traités de façon indépendante. Enfin, la structure de produit tensoriel de (3.12) permet d'envisager un stockage efficace du système mais sa résolution appelle au développement de techniques de résolution dédiées, le plus souvent itératives [Keese, 2004].

L'ensemble de ces raisons nous a conduits à mettre en œuvre une méthode d'intégration indirecte seulement pour des problèmes déterministes de taille très modeste, c'est-à-dire quelques milliers de degrés de liberté. Au-delà et bien que de nombreuses améliorations — notamment avec l'emploi de la décomposition de Karhunen–Loève — puissent être apportées au schéma le plus simple décrit précédemment, les avantages des méthodes directes et en particulier l'indépendance des évaluations EF et leur caractère non intrusif, nous sont systématiquement apparus comme étant déterminants. Ainsi, seul le développement de solveurs itératifs spécifiques peut conduire à la généralisation de l'utilisation des méthodes d'intégration stochastique indirectes.

3.2 Mise en données probabilistes

La mise en données probabilistes constitue, selon nous, l'étape la plus importante dans la mise en œuvre d'une démarche de prise en compte des incertitudes pour un problème déterministe supposé maîtrisé. Bien que de nombreuses autres voies puissent être envisagées — méthodes de propagation d'intervalles [Natke and Ben-Haim, 1997], logique floue [Elishakoff, 1999] — l'approche probabiliste, en s'appuyant sur des structures mathématiques bien établies, apparaît comme le contexte privilégié pour cette modélisation. Il existe d'autre part un certain nombre d'arguments [Jaynes, 2003] conduisant à l'idée que le cadre probabiliste est le plus adapté pour décrire des incertitudes dues à un manque d'informations, c'est-à-dire épistémiques. Cette description est alors rendue possible par l'introduction de quantités incertaines, dans les modèles, sous la forme de variables aléatoires, de processus aléatoires et de champs aléatoires.

Une variable aléatoire k à valeurs dans \mathbb{K} est une fonction mesurable associant, à chaque élément $\omega \in \Omega$, un élément $k(\omega) \in \mathbb{K}$. Ici Ω est un ensemble d'événements élémentaires. Associé à une tribu \mathcal{U} — techniquement une classe de sous-ensembles de Ω — et une mesure de probabilité P , le triplet (Ω, \mathcal{U}, P) forme un espace probabilisé. Concrètement \mathbb{K} est un espace vectoriel, \mathbb{R} ou \mathbb{R}^n , suivant la nature scalaire ou tensorielle de la quantité à modéliser. L'ensemble des variables aléatoires forme alors un espace de Hilbert, en pratique $\mathbb{L}_2(\Omega)$, c'est-à-dire l'ensemble des variables aléatoires à variance finie. Le produit scalaire associé à cet espace est la covariance entre deux variables aléatoires k_1 et k_2 définie par :

$$\langle k_1, k_2 \rangle = C_{k_1, k_2} = \mathbb{E} \left[(k_1(\omega) - \bar{k}_1)(k_2(\omega) - \bar{k}_2) \right] = \int_{\Omega} (k_1(\omega) - \bar{k}_1)(k_2(\omega) - \bar{k}_2) dP(\omega) \quad (3.15)$$

où $\bar{k}_{1/2} = \mathbb{E} [k_{1/2}(\omega)]$.

Si \mathbb{K} est un espace de fonctions — en pratique continues — k est un processus aléatoire ou un champ aléatoire suivant la nature et la signification donnée à \mathbb{K} . Chacun des éléments $k_{\omega}(\mathbf{x}) \in \mathbb{K}$ est une *réalisation* de ce processus ou de ce champ. Suivant un autre point de vue, un processus ou un champ aléatoire k peut être décrit comme étant une famille de variables aléatoires $\{k_{\mathbf{x}}(\omega)\}_{\omega \in \Omega}$ attachées à chaque instant ou point \mathbf{x} . C'est ce deuxième point de vue que nous privilégions par la suite.

Un processus ou un champ stochastique est entièrement défini par la donnée de l'ensemble de ses fonctions de répartition croisées [Krée and Soize, 1986]. Cette masse d'information est, la plupart du temps, inaccessible et seules les quantités statistiques du second ordre sont potentiellement connues : espérances et variances marginales — c'est-à-dire en un point \mathbf{x} — et fonction de covariance $C_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$, sous la forme,

$$C_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \mathbb{E} \left[(k(\mathbf{x}_1, \omega) - \bar{k}(\mathbf{x}_1))(k(\mathbf{x}_2, \omega) - \bar{k}(\mathbf{x}_2)) \right] \quad (3.16)$$

où $\bar{k}(\mathbf{x}_{1/2}) = \mathbb{E} [k(\mathbf{x}_{1/2}, \omega)]$. Néanmoins, seuls les champs aléatoires dit « Gaussiens » sont entièrement définis par ces informations.

Les processus aléatoires trouvent de nombreuses applications pratiques pour les problèmes additifs. Dans le cas de processus « stationnaires au sens faible », pour lesquels l'espérance et la variance sont constantes et la fonction de covariance $C_k(t_1, t_2)$ ne dépend que de l'intervalle de temps $t_1 - t_2$ [Papoulis, 1984] — nous substituons la variable t à \mathbf{x} lorsque seuls les processus aléatoires sont concernés —, ces processus sont caractérisés par leur spectre, transformée de Fourier de la fonction de covariance. Ils peuvent être alors facilement synthétisés à partir de ce spectre [Shinozuka and Deodatis, 1997], sur la base d'un ensemble — fini — de réalisations de variables aléatoires décorréelées.

Les champs aléatoires trouvent quant à eux de nombreuses applications pour les problèmes multiplicatifs. Ils permettent en effet de modéliser les incertitudes associées aux paramètres « matériaux » d'un problème et donc de décrire les fluctuations spatiales engendrées à une échelle macroscopique. L'analogie avec les processus

aléatoires est importante : la propriété de « stationnarité » devient celle « d'homogénéité » — au sens faible — et la synthèse de ces champs peut se faire au travers d'une analyse spectrale généralisant la transformée de Fourier.

3.2.1 Champs aléatoires

Le point de vue adopté ici pour décrire les champs aléatoires est celui d'une « fonction » à deux variables, une variable d'espace $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$ et une variable $\omega \in \Omega$ dans l'espace des événements élémentaires montrant l'incertitude liée au champ :

$$k(\mathbf{x}, \omega) : \mathcal{D} \times \Omega \mapsto \mathbb{R}^n \quad (3.17)$$

Une définition plus générale peut être donnée [Gel'fand and Vilenkin, 1964], notamment adaptée à la description de champs erratiques proches de bruits blancs.

Parmi les différentes possibilités liées à une modélisation probabiliste sous la forme de champs aléatoires, les champs dits « Gaussiens » offrent une voie privilégiée. La littérature concernant ces champs aléatoires est très abondante et on pourra notamment se reporter à [Adler, 1981] en tant qu'ouvrage de référence. Pour ces derniers, toutes les fonctions de distributions croisées sont Gaussiennes et les informations statistiques d'ordre deux sont suffisantes pour les définir complètement. Ils possèdent de nombreuses propriétés, très intéressantes dans la pratique, dues au fait que des variables aléatoires Gaussiennes décorrélatées sont indépendantes et qu'une combinaison linéaire de variables aléatoires Gaussiennes est également Gaussienne. Enfin les champs Gaussiens apparaissent « naturellement » selon le théorème de la limite centrale.

Néanmoins, ce type de champ conduit à des réalisations à valeurs négatives avec une probabilité non nulle. Ce fait rend leur utilisation inappropriée pour modéliser de nombreux paramètres physiques. Ainsi un champ de modules d'élasticité ou de conductivités thermiques, ne peut être modélisé de manière valide par un champ Gaussien : il conduirait, de façon certaine, à des problèmes mal-posés. C'est la raison pour laquelle la mise en œuvre de champs non Gaussiens est, dans la pratique, nécessaire. Celle-ci peut être réalisée de manière simple par l'emploi d'une transformation non-linéaire Φ d'un champ Gaussien $\gamma(\mathbf{x}, \omega)$:

$$k(\mathbf{x}, \omega) = \Phi(\gamma(\mathbf{x}, \omega)) = F_k^{-1} \circ \text{erf}(\gamma) \quad (3.18)$$

Dans (3.18) F_k est la distribution marginale visée pour le champ $k(\mathbf{x}, \omega)$. Dans la pratique, le champ γ — en particulier sa fonction de covariance — doit être judicieusement choisi afin de donner à k les statistiques d'ordre deux souhaitées. La mise en œuvre de cette approche permet, par exemple, de définir un champ log-normal k sous la forme :

$$k(\mathbf{x}, \omega) = \exp(\gamma(\mathbf{x}, \omega)) \quad (3.19)$$

L'espérance de $k(\mathbf{x}, \omega)$ est alors [de Larrard, 2010],

$$\mathbb{E}[k(\mathbf{x}, \omega)] = \exp\left(\mathbb{E}[\gamma(\mathbf{x}, \omega)] + \frac{V_\gamma}{2}\right) \quad (3.20)$$

et sa fonction de covariance s'écrit :

$$C_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \exp\left(2\mathbb{E}[\gamma(\mathbf{x}, \omega)] + V_\gamma\right)\left(\exp(C_\gamma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)) - 1\right) \quad (3.21)$$

Les deux relations précédentes peuvent facilement s'inverser afin d'obtenir les propriétés de γ sous-jacentes. En combinaison avec la décomposition de Karhunen-Loève, cette approche est très performante dans la pratique.

Enfin, la modélisation probabiliste au travers de champs aléatoires requiert la définition d'une fonction de covariance. Dans l'idéal cette dernière peut être évaluée de manière expérimentale (des tentatives en ce sens ont été faites dans la thèse de Thomas de Larrard [de Larrard, 2010]) mais, dans la plupart des cas, cette voie est difficile à mettre en œuvre. Ainsi un certain nombre de modèles statistiques peuvent être mis en avant, notamment pour les champs isotropes et homogènes au sens faible pour lesquels :

$$C_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = c_k(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|) \quad (3.22)$$

Parmi les modèles les plus usités on trouve celui de la covariance d'un processus autorégressif du premier ordre. La forme exponentielle,

$$c_k(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|) = V \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|}{L_c}\right) \quad (3.23)$$

correspond à la covariance d'un processus aléatoire, avec une longueur de corrélation L_c et une variance V , et satisfait à l'équation de Langevin décrivant le mouvement Brownien. Ce modèle est très employé dans la pratique, notamment en raison de l'existence d'une solution analytique au problème de Fredholm associé en 1D. Néanmoins il est difficile d'imaginer un processus physique engendrant une covariance de cette forme en deux ou trois dimensions. La covariance d'un processus autorégressif du premier ordre en 2D est en effet,

$$c_k(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|) = \frac{V}{L_c}(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|)K_1(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|/L_c) \quad (3.24)$$

où K_1 est la première fonction de Bessel du deuxième type. D'autre part l'expression (3.23) n'est pas différentiable en $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\| = 0$. Dans la pratique on lui préfère un modèle de type « Gaussien », de la forme,

$$c_k(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|) = V \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|^2}{L_c^2}\right) \quad (3.25)$$

pour lequel L_c correspond également à une longueur de corrélation. On peut montrer que ce modèle conduit toujours à une fonction de covariance valide [Reed and Simon, 1975]. De plus la différentiabilité en $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\| = 0$ assure l'existence de ses moments spectraux et conduit à des réalisations plus « lisses » dans la pratique (voir les aspects morphologiques §3.4).

3.2.2 Décomposition de Karhunen–Loève

L'utilisation de champs aléatoires corrélés, Gaussiens ou non Gaussiens, est d'un grand intérêt dans une démarche de modélisation probabiliste. Ils permettent de décrire la variabilité spatiale associée à une grandeur physique et conduisent donc à la définition de problèmes stochastiques multiplicatifs. Comme nous l'avons vu précédemment ces problèmes peuvent être résolus par intégration stochastique, directe ou indirecte, dans un espace d'événements élémentaires Ω et suivant une mesure de probabilité $P(\omega)$.

Dans les deux cas il est nécessaire, dans la pratique, de générer des réalisations indépendantes de ces champs — la plupart du temps d'une manière discrète, c'est-à-dire sur une grille spatiale de points donnée. Ce point constitue une problématique importante pour les champs corrélés. Parmi les voies possibles pour répondre à ce problème, l'utilisation du spectre — obtenu par transformée de Fourier — a longtemps été privilégiée. En combinaison avec un filtre judicieusement choisi et l'opération de transformée de Fourier inverse, ce spectre permet une synthèse simple de réalisations mutuellement indépendantes mais spatialement corrélées. Ces approches sont néanmoins confrontées à deux difficultés majeures : d'une part le choix du filtre en fonction de la covariance voulue et, d'autre part, la nécessité de définir le domaine d'étude \mathcal{D} comme un produit d'intervalles. Pour des géométries plus complexes ou des champs non homogènes, il est donc nécessaire de se tourner vers une décomposition spectrale généralisant la transformée de Fourier. Cette possibilité est offerte par la décomposition de Karhunen–Loève, connue sous les différents noms : « analyse en composantes principales » ou « décomposition en valeurs singulières ». Un travail important a été développé à ce sujet, tant sur le plan théorique que concernant la mise en œuvre numérique. Cette compétence s'est principalement développée à l'occasion des thèses de Martin Hautefeuille, Nathan Benkemoun et Thomas de Larrard.

3.2.2.1 Aspects théoriques

La décomposition de Karhunen–Loève d'un champ $k(\mathbf{x}, \omega)$ se base sur sa fonction de covariance $C_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$. On considère le problème de Fredholm défini par :

$$\int_{\mathcal{D}} C_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \varphi_i(\mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_2 = \lambda_i \varphi_i(\mathbf{x}_1), \quad \forall \mathbf{x}_1 \in \mathcal{D} \quad (3.26)$$

Les solutions de ce problème aux valeurs propres ne sont pas, en général, connues de manière analytique mais des techniques numériques classiques, comme la méthode des Eléments Finis, peuvent être mises en œuvre.

La fonction de covariance $C_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ étant, par construction, symétrique et définie positive, le spectre $\{\lambda_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ est réel, positif et décroissant, avec zéro comme seul point d'accumulation. D'autre part l'ensemble des modes propres $\{\varphi_i(\mathbf{x})\}_{i \in \mathbb{N}}$ forme une base orthonormale de $L_2(\mathcal{D})$. Ceci conduit à la représentation spectrale de la fonction de

covariance,

$$C_k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{i=1}^{+\infty} \lambda_i \varphi_i(\mathbf{x}_1) \otimes \varphi_i(\mathbf{x}_2) \quad (3.27)$$

et une représentation spectrale du champ sous la forme,

$$k(\mathbf{x}, \omega) = \bar{k}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{+\infty} \sqrt{\lambda_i} \varphi_i(\mathbf{x}) \xi_i(\omega) \quad (3.28)$$

où les variables aléatoires $\xi(\omega)$ sont centrées, réduites et mutuellement décorréelées. Si le champ k est Gaussien alors les $\xi(\omega)$ sont des variables Gaussiennes et sont donc indépendantes. Ce point est d'un intérêt majeur dans la mesure où l'indépendance se traduit, dans la pratique, par la possibilité d'utiliser un générateur de nombres aléatoires.

L'expression (3.28) permet également de mettre en avant la séparation de variables — spatiale \mathbf{x} et stochastique ω — due à la décomposition de Karhunen–Loève. Cette séparation est très intéressante dans la mesure où elle permet de dégager des modes de variation spatiale — concrètement les fonctions déterministes $\{\varphi_i(\mathbf{x})\}_{i \in \mathbb{N}}$ — dont le niveau d'importance est directement lié à la valeur propre associée. Ainsi, en pratique, la série (3.28) est tronquée et seuls les M premiers modes — associés aux M valeurs propres λ les plus grandes et avec les nombres d'onde les plus faibles — sont retenus. La convergence de la suite de fonctions définies par (3.28) est uniforme en variance :

$$\lim_{M \rightarrow +\infty} \sup_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \mathbb{E}[(k(\mathbf{x}) - k_M(\mathbf{x}))^2] = \lim_{M \rightarrow +\infty} \sup_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \sum_{i=M+1}^{+\infty} \lambda_i \varphi_i^2(\mathbf{x}) = 0 \quad (3.29)$$

où $k_M(\mathbf{x})$ correspond à la représentation spectrale tronquée (3.28) de k . La décomposition de Karhunen–Loève est l'approximation linéaire optimale d'un champ aléatoire [Adler, 1981] et seules des versions non linéaires peuvent conduire à de meilleures approximations [Cohen and d'Ales, 1997]. En ce sens, pour une erreur de troncature donnée, l'expression (3.28) est celle qui conduit au plus petit nombre de modes à retenir. Il est important de souligner ici la difficulté d'établir un critère *a priori* du nombre de modes à retenir. Il apparaît donc nécessaire de vérifier, en pratique, que les réalisations obtenues par troncature sont en adéquation avec les caractéristiques du champ. Cette validation peut se faire sur la base d'une méthode de Monte-Carlo en générant un nombre Z important de réalisations. Cet échantillon permet le calcul d'estimateurs statistiques et la validation du nombre de modes retenus pour l'application visée [de Larrard, 2010], [Roubin, 2010].

Dans la pratique il est important de garder à l'esprit que les variables aléatoires $\xi(\omega)$ ne sont indépendantes que dans le cas Gaussien. Pour des champs non Gaussiens ces variables sont seulement décorréelées. De plus leurs fonctions de distribution sont inconnues dans le cas non Gaussien — bien qu'elles puissent être obtenues numériquement — ce qui rend l'approche spectrale plus difficile à mettre en œuvre.

3.2.2.2 Mise en œuvre pratique

Le problème aux valeurs propres — problème de Fredholm (3.26) — ne trouve que très peu de solutions analytiques connues. La plupart du temps il est nécessaire de se tourner vers une méthode numérique de résolution. Celle-ci peut être menée à partir d’une forme faible de (3.26) et d’une discrétisation à support compact de type Eléments Finis sous la forme,

$$\varphi_i^h(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_a^T(\mathbf{x})\varphi_i^a \quad (3.30)$$

et :

$$\mathbf{C}^h(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \mathbf{N}_a^T(\mathbf{x}_1)\mathbf{C}_{ab}\mathbf{N}_b(\mathbf{x}_2) \quad (3.31)$$

On obtient ainsi le système d’équations linéaires :

$$\mathbf{MCM}\varphi_i^h = \lambda_i^h\mathbf{M}\varphi_i^h \quad (3.32)$$

Dans (3.32) \mathbf{C} est la matrice de covariance discrétisée et $\mathbf{M} = \int_{\mathcal{D}} \mathbf{N}\mathbf{N}^T d\mathbf{x}$ la matrice de masse associée au maillage avec une masse volumique unitaire (matrice de Gram). L’assemblage de cette matrice est une opération classique pour la plupart des codes Eléments Finis. Seule la mise en place du double produit \mathbf{MCM} possède ici un caractère intrusif dans ce type de code. De plus, la matrice de covariance étant *a priori* pleine, le produit \mathbf{MCM} l’est également. Cet aspect conduit à un problème très coûteux sur le plan numérique. Même pour des maillages comprenant un nombre de nœuds raisonnable — autour de $n = 10^5$ — le stockage physique est rapidement très important, de l’ordre de plusieurs dizaines de Giga-octets, et le coût de calcul de l’ordre de $\mathcal{O}(n^3)$ flop/s. Dans la mesure où l’intérêt se porte sur les $M \ll n$ plus grandes valeurs propres λ et sur les vecteurs propres $\varphi(\mathbf{x})$ associés, il apparaît intéressant de se tourner vers des solveurs itératifs basés sur un algorithme de Lanczos [Lanczos, 1995]. Ce type de solveurs, qui ne requiert que des produits matrices–vecteurs, a été notamment mis en œuvre dans le cadre de la thèse de Nathan Benkemoun. De la même façon, le stockage complet de la matrice de covariance requiert $\mathcal{O}(n^2)$ unités de stockage — quatre octets pour une représentation en simple précision — et $\mathcal{O}(n^2)$ flop/s pour un produit matrice–vecteur. Une solution originale peut être ici envisagée au travers d’une approximation de \mathbf{C} dans le format des « \mathcal{H} -matrix » [Hackbusch and Khoromskij, 2000]. L’application de ce formalisme à la décomposition Karhunen–Loève a déjà montré des résultats prometteurs dans l’équipe du Pr. Matthies [Khoromskij et al., 2009] avec des coûts de calcul de l’ordre de $\mathcal{O}(n \log n)$. Ce point devra sans doute prendre une importance particulière dans la maîtrise de la mise en données probabilistes au travers de champs aléatoires et dans les méthodes indirectes d’intégration stochastique.

3.3 Aspects expérimentaux et liens avec les modèles phénoménologiques

Sur le plan expérimental, les matériaux hétérogènes tels que les matériaux cimentaires montrent, à l'échelle macroscopique, une variabilité de leurs propriétés qui peut être importante. De nombreux efforts sont faits, en particulier au sein des groupes de travail formés autour du projet ANR APPLETT, pour acquérir les informations nécessaires à la quantification de ces variabilités. Au sein de cette démarche la thèse de Thomas de Larrard, en collaboration avec l'IRSN, se concentre sur la dégradation des bétons par lixiviation. Ce type de dégradation apparaît sous la forme d'une dissolution de la phase solide du calcium présent dans les hydrates formés par le ciment. Cette dissolution peut avoir lieu lorsque le béton est soumis à une solution agressive, généralement de l'eau pure ou à faible teneur en calcium. Soumis à un environnement de ce type, un gradient de concentration apparaît entre l'extérieur et la solution interstitielle, induisant une diffusion des espèces ioniques de l'intérieur de la pièce vers l'extérieur. L'équilibre chimique entre cette solution interstitielle et les phases solides est modifié et un nouvel équilibre est atteint au travers de la dissolution de ces dernières. Les conséquences de ce type de dégradation sont importantes et peuvent affecter, de manière significative, la durée de vie d'une structure ou d'un élément de structure en béton. Son étude a porté, d'une part sur la mise en place d'une campagne expérimentale d'envergure au travers d'essais de dégradation accélérée au nitrate d'ammonium et, d'autre part, sur l'identification inverse d'un modèle simplifié. Enfin nous montrons comment ces résultats peuvent permettre de prédire la probabilité associée à une durée de vie d'un élément de structure.

3.3.1 Acquisition de données concernant la cinétique de lixiviation des bétons

La campagne expérimentale présentée ici fait partie du projet ANR APPLETT dont le but est de quantifier la variabilité des propriétés physiques et mécaniques des bétons [Torrenti, 2010]. Cette campagne s'appuie sur l'entreprise VINCI et consiste à suivre deux chantiers, construisant ainsi une base de données sur deux bétons, le premier étant un béton à hautes performances et le deuxième un béton ordinaire. Pour chacune de ces formulations, quarante gâchées sont caractérisées au travers de différents essais de laboratoire (résistances en traction et compression, modules d'élasticité statique et dynamique, résistivité électrique, etc...). L'ensemble des éprouvettes utilisées pour ces essais a été fabriqué *in situ*.

Au centre de cette campagne d'essais se trouve, en ce qui nous concerne, la lixiviation accélérée de chaque éprouvette. Cette cinétique accélérée est rendue possible par l'utilisation de bains de nitrate d'ammonium à 6 mol.L^{-1} qui permet une dégradation cent fois plus rapide [Perlot, 2005]. A des échéances fixées (28, 56, 98 et 210 jours), la profondeur de dégradation est révélée à l'aide de phénolphtaléine,

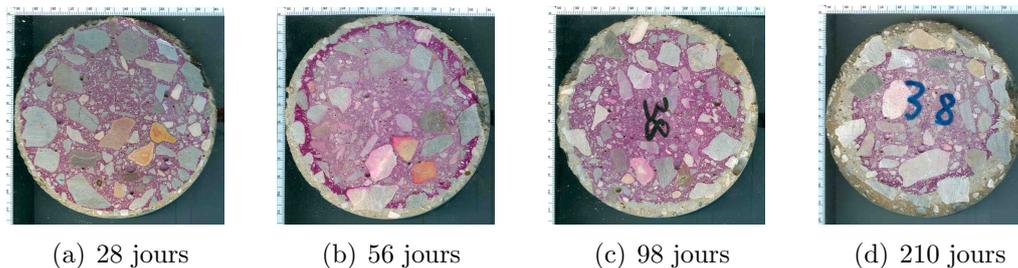


FIGURE 3.1 – Exemples de révélations, par la phénolphthaléine, de la zone lixiviée, d’après [de Larrard, 2010]

indicateur coloré dont la zone de virage s’observe pour un pH compris entre 8,2 et 10 (passage de l’incolore au rose). Sur la figure (3.1) on observe les zones saines, au centre de l’éprouvette, pour les quatre échéances. Le tableau (3.1) et la figure (3.2) synthétisent les résultats obtenus pour les deux bétons. Une dégradation linéaire en fonction de la racine carrée du temps est observée. Elle est plus importante pour le béton ordinaire.

TABLE 3.1 – Estimateurs de l’espérance et du coefficient de variation des profondeurs dégradées pour les deux bétons, A1 et A2, d’après [de Larrard, 2010]

		d [mm]		
	Echéance [j]	Taille du lot	Espérance	CdV [%]
A1	28	40	4.2	20.8
A1	56	40	6.3	19.4
A1	98	40	8.8	16.8
A1	210	40	14.6	10.1
A2	28	40	5.3	17.8
A2	56	40	8.6	21.9
A2	98	40	11.3	16.4
A2	210	40	16.5	9.5

3.3.2 Identification inverse d’un modèle simplifié de dégradation

Physiquement les différentes phases solides contenant du calcium se dissolvent successivement. La profondeur dégradée peut être vue comme la zone où la portlandite se dissout. Dans cette zone la porosité augmente de manière importante.

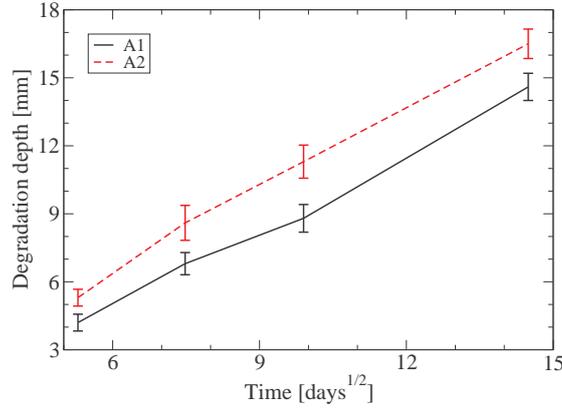


FIGURE 3.2 – Intervalles de confiance à 99% pour l’espérance de la profondeur dégradée, d’après [de Larrard, 2010]

En supposant que la dissolution est instantanée et que seules les espèces contenant du calcium sont à prendre en compte, le processus de lixiviation peut être décrit par la conservation de la masse appliquée au calcium [Buil et al., 1992],

$$\frac{\partial(\phi C_{Ca})}{\partial t} = -\text{Div}(-D(\phi)\text{Grad}(C_{Ca})) - \frac{\partial S_{Ca}}{\partial t} \quad (3.33)$$

où S_{Ca} est la concentration des phases solides du calcium, C_{Ca} la concentration dans la phase liquide, D le coefficient de diffusion effectif au sein du matériau poreux et ϕ la porosité. Cette équation de bilan est complétée par des conditions aux limites ainsi qu’une équation de fermeture reliant D à la porosité ϕ , elle-même dépendant de S_{Ca} . Cette expression conduit à un problème fortement non linéaire et nous avons choisi d’entreprendre sa résolution au travers de la méthode des Volumes Finis. Ce type de schémas, initialement mis au point pour des problèmes de conservation, est très stable vis-à-vis des problèmes de diffusion non linéaires et a déjà été employé pour la lixiviation [Mainguy et al., 2000].

Ce modèle, adapté au transport dans un milieu poreux qui est ici la pâte de ciment, est complété, sur un plan phénoménologique, par un changement d’échelles pour aboutir à une formulation exploitable avec un béton. Ce changement conduit à une expression du coefficient de diffusion comprenant un coefficient de tortuosité τ , proposé initialement par [Bruggeman, 1935] et [Archie, 1942]. Ce dernier participe à la prise en compte des granulats dans l’augmentation de la longueur du parcours suivi par les espèces ioniques. Suivant [Nguyen et al., 2006] le coefficient de diffusion macroscopique \tilde{D} s’écrit alors,

$$\tilde{D}(\tilde{\phi}) = \tau f_{p/m} D_0 e^{k\phi} \quad (3.34)$$

Dans (3.34) $\tilde{\phi}$ est la porosité à l'échelle du béton, selon l'expression,

$$\tilde{\phi} = f_{p/m} \cdot f_{m/c} \cdot \phi \quad (3.35)$$

où $f_{p/m}$ et $f_{m/c}$ sont respectivement les proportions volumiques de pâte dans le mortier et de mortier dans le béton.

Finalement, une dernière modification est à apporter au modèle décrit par les équations précédentes. Celle-ci a trait à l'accélération du phénomène de lixiviation due à l'emploi de nitrate d'ammonium. Bien que certains auteurs proposent d'augmenter le coefficient de diffusion [Sellier, 2006], nous avons choisi de décrire cette accélération par une modification de la concentration initiale en calcium liquide dans la solution interstitielle de 22 mol.m⁻³ à 2730 mol.m⁻³.

Une fois ce modèle ainsi que le schéma de résolution numérique mis en œuvre validés dans le sens « direct » [de Larrard, 2010], c'est sur l'identification inverse que se sont portés les efforts numériques. Cette thématique est très générale pour les modèles de comportement macroscopique dont la base est phénoménologique car il existe, potentiellement, des paramètres à identifier non accessibles par la mesure directe. C'est le cas ici de la tortuosité τ .

Dans un premier temps, une analyse de sensibilité de la réponse du modèle aux différents paramètres permet de recenser les variables sur lesquelles l'attention doit être portée. L'outil privilégié ici est le coefficient de corrélation linéaire — coefficient de Pearson [Rodgers and Nicewander, 1988] — entre deux séries de variables x et y (ici les profondeurs dégradées à une échéance en fonction des paramètres du modèle). Ainsi, à partir de la définition d'intervalles de variation, deux cents jeux de données ont été générés à partir d'un algorithme Latin Hypercube Sampling [McKay et al., 1979] et évalués au travers du modèle numérique. Les résultats obtenus permettent de mettre en évidence certaines corrélations assez fortes et donc une dépendance statistique. En revanche, l'absence de corrélation linéaire ne permet pas de conclure à une indépendance statistique dans la mesure où d'autres corrélations pourraient être envisagées [Rodgers and Nicewander, 1988].

Pour le modèle décrit par les équations précédentes l'analyse montre l'importance de la porosité déduite de l'équilibre en calcium solide puis des paramètres reliés à la diffusion, τ et k . Ainsi l'identification du modèle peut se concentrer sur deux paramètres principaux : la porosité initiale ϕ et le coefficient de diffusion effectif, lui-même dépendant de la porosité au travers de trois grandeurs (D_0 , k et τ), aucun d'eux n'étant mesurable. Les autres paramètres sont, d'après l'étude de sensibilité, négligeables en première approche. Parmi les trois paramètres reliés à la diffusion, le coefficient de tortuosité τ a été choisi comme référence du processus de diffusion.

Le processus d'identification inverse a pour objectif la construction d'un outil numérique reliant les quantités de sortie du modèle à ces paramètres d'entrée, ou à un sous-ensemble. Cet outil permet de mettre au jour une relation inverse, implicite et en général non accessible de façon simple. Parmi les différents outils numériques répondant à cet objectif nous nous sommes tournés vers les Réseaux de Neurones

Artificiels [Hertz et al., 1991]. Ceux-ci permettent d'approximer une fonction inconnue et peut être entraînés sur la base de jeux de données — entrées et sorties — mesurés ou simulés. Ici la fonction à identifier relie la porosité — mesurable —, les profondeurs dégradées aux quatre échéances et l'évolution de la température au coefficient de tortuosité.

Sur un plan formel un neurone artificiel fonctionne comme un intégrateur en effectuant la somme pondérée de ses entrées. Le résultat est par la suite soumis à une fonction de transfert qui produit la sortie du neurone. Cette opération est illustrée par la figure 3.3 où p_i sont les R entrées du neurone, w_i les poids associés à chaque entrée et b le biais ou seuil d'activation. La relation,

$$n = \sum_{i=1}^R w_i p_i - b \quad (3.36)$$

introduit le niveau d'activation du neurone n .

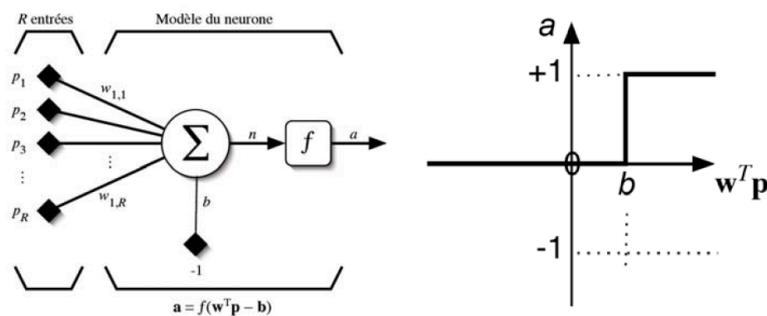


FIGURE 3.3 – Illustration du fonctionnement d'un neurone artificiel, d'après [Pari-zeau, 2004]

Un Réseau de Neurones Artificiels (RNA) est un assemblage de plusieurs neurones, organisés en couches successives. La figure 3.4 montre que, dans une couche de S neurones, chacun d'eux est relié à toutes les entrées de la couche, conduisant ainsi à $R \times S$ poids w_i pour cette couche.

La topologie d'un réseau complet est définie par la combinaison de couches de neurones, de sorte que les sorties des neurones d'une couche correspondent aux entrées des neurones de la couche suivante. La dernière couche du réseau est la « couche de sortie ». Elle doit compter autant de neurones qu'il existe de données de sortie au réseau. Les couches précédentes sont appelées « couches cachées » et permettent de décrire la « richesse » de la fonction à approximer.

La figure 3.6 montre la structure du réseau mis en œuvre dans le cadre de cette étude. Il est constitué d'une couche cachée et d'une couche de sortie; la porosité, les épaisseurs dégradées et les températures correspondantes constituent les données d'entrée et le coefficient de tortuosité représente la sortie.

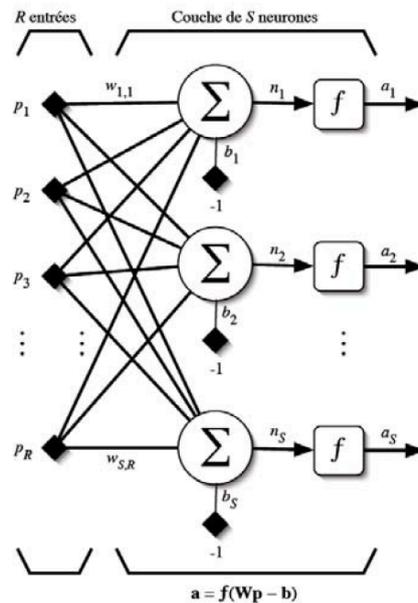


FIGURE 3.4 – Représentation d’une couche constituée de S neurones, d’après [Pari-zeau, 2004]

La phase d’apprentissage de ce Réseau de Neurones Artificiels nécessite un ensemble de données complètes — entrées et sorties — et a pour objectif de fixer les valeurs des poids et des biais de façon à approximer la relation entrées–sorties avec une erreur la plus faible possible. Il s’agit donc d’un processus itératif basé sur une rétro-propagation de cette erreur ; celle-ci est évaluée comme étant la distance entre les sorties de référence et celles fournies par le réseau avec les entrées correspondantes. Sur la base de ce type d’algorithme, le phénomène de « sur-apprentissage » ou de « sur-entraînement » apparaît lorsque les données d’entraînement ne sont pas représentatives du phénomène physique sous-jacent ou si la topologie du réseau n’est pas adaptée — principalement lorsque le nombre de couches est trop important. La minimisation de l’erreur conduit alors à construire implicitement une fonction trop « complexe » comme celle illustrée schématiquement par la figure 3.5a. La validation croisée permet d’arrêter le processus d’apprentissage lorsqu’un entraînement supplémentaire conduit à une augmentation de l’erreur et non à sa diminution. Cette stratégie d’apprentissage repose sur deux ensembles indépendants de données : l’un pour l’apprentissage à proprement parler et l’autre pour la validation, c’est-à-dire le calcul d’un indice de performance (ici l’erreur induite par la prédiction sur ce second jeu de données).

De tels ensembles de données complètes ne sont généralement pas disponibles et il est donc nécessaire de les créer numériquement (c’est le cas ici puisque la tortuosité τ n’est jamais accessible par la mesure). Afin de générer ce jeu de données, le modèle numérique — déterministe — pour la lixiviation a permis l’évaluation d’un

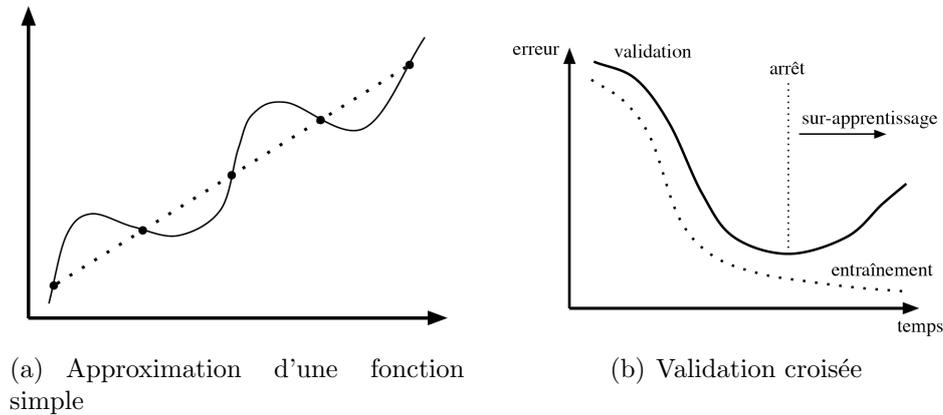


FIGURE 3.5 – Illustrations du phénomène de sur-apprentissage et de la validation croisée, d'après [Parizeau, 2004]

ensemble de cinq cents paramètres d'entrées indépendants : une valeur de porosité $\phi \in [0, 11; 0, 18]$, une valeur de tortuosité $\tau \in [0, 13; 0, 25]$ et des valeurs moyennes de température pour les périodes de dégradation. L'évaluation de ces cinq cents points conduit, pour chacun, à une estimation des épaisseurs dégradées correspondantes à 28, 56, 98 et 210 jours. Une validation croisée peut ainsi être menée sur la base de trois cents d'entre eux pour l'apprentissage et deux cents pour la validation.

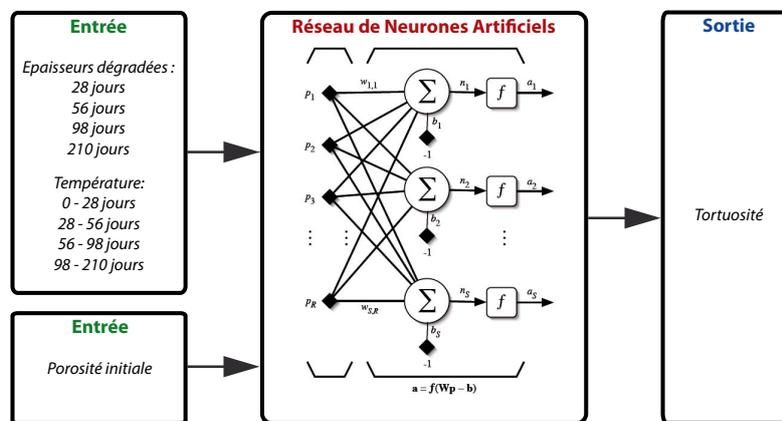


FIGURE 3.6 – Représentation schématique du réseau de neurones mis en oeuvre pour l'identification du coefficient de tortuosité, d'après [de Larrard, 2010]

Une fois le réseau correctement entraîné, celui-ci doit être en mesure de proposer une prédiction fiable pour des points non compris dans les données initiales (bien que restant dans les intervalles de variation choisis initialement). Afin de valider cet apprentissage, la porosité initiale ainsi que les profondeurs de dégradation mesurées ont conduit à la prédiction, par le réseau, d'une valeur de tortuosité pour chaque

éprouvette. Sur cette base il est donc possible de comparer les cinétiques de dégradation mesurée et simulée. La figure 3.7 met en avant cette comparaison pour les cas extrêmes concernant les deux chantiers suivis par le groupe APPLET. Les résultats expérimentaux sont présentés sous la forme d'intervalles de confiance à 99% pour chaque échéance.

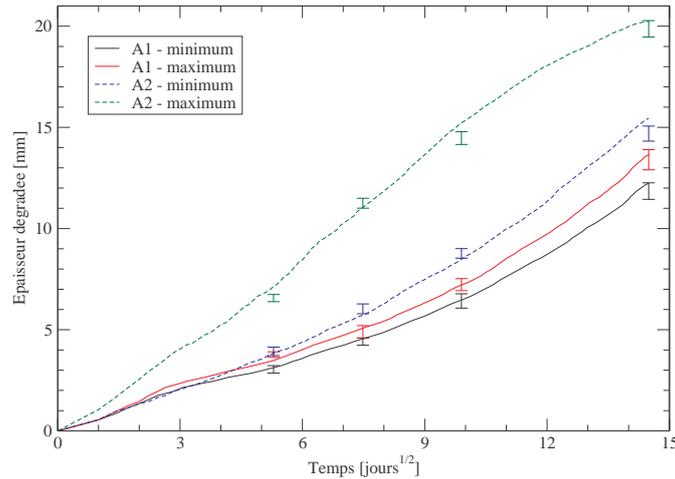


FIGURE 3.7 – Validation du processus d'entraînement du RNA au travers de comparaisons entre prédictions et résultats expérimentaux, d'après [de Larrard, 2010]

Finalement, cet outil d'identification inverse qu'est le RNA entraîné permet l'identification de la tortuosité pour l'ensemble des éprouvettes du groupe APPLET ainsi que la quantification de la variabilité associée. D'une manière plus générale il nous apparaît important de souligner ici les possibilités importantes relatives aux « méthodes heuristiques ». Par leur nature stochastique, elles sont généralement la seule voie permettant de résoudre des problèmes d'optimisation ou d'identification complexes pour lesquelles on observe une explosion combinatoire des possibilités. De plus ce sont, la plupart du temps, des méthodes sans gradient ce qui constitue un avantage majeur par rapport aux méthodes directes. Pour ces deux raisons il nous semble que leur mise en œuvre en collaboration avec des méthodes issues de la mécanique numérique constitue un cadre bien adapté à l'identification et à l'emploi de modèles phénoménologiques complexes. Ce point est illustré dans la suite de ce chapitre, consacré aux liens entre modèles macroscopiques et variabilités, par deux applications à très long terme sur des structures simples en béton.

3.3.3 Mises en œuvre pour la prévision de durées de vie

La prévision de la durée de vie d'une structure conduit nécessairement vers une approche probabiliste. Celle-ci permet de mettre en avant les variabilités associées à l'environnement dans laquelle cette structure est plongée ainsi que les incertitudes

liées à sa conception. Nous nous intéressons ici à l'influence des variabilités observées expérimentalement dans le cadre de la campagne APPLLET sur la durabilité d'un élément de structure simple en béton. Il s'agit d'un poteau cylindre non armé, sollicité en compression simple à 30 % de sa capacité portante. Conjointement à ce chargement mécanique et au fluage qui en découle à long terme, le poteau est supposé être exposé à une dégradation en eau pure. Nous ne détaillons pas ici les modèles choisis pour décrire les comportements mécaniques à court et long termes (voir [de Larrard, 2010]), ni l'ensemble des hypothèses mises en avant dans cette démarche. Celles-ci conduisent à des expressions uni-dimensionnelles très simplifiées, couplées au modèle numérique de lixiviation présenté précédemment, et qu'il est facile d'intégrer temporellement sur la base d'un schéma implicite. Nous insistons en revanche sur la distribution des résultats et sur les durées de vie associées, ainsi que sur un outil d'explication des différents paramètres du modèle.

A partir d'une méthode d'intégration stochastique indirecte effectuée sur la base de mille points d'intégration, la distribution des durées de vie de cet élément de structure est représentée sur la figure 3.8. La durée de vie dans le cadre d'une approche déterministe est de 1060 années alors que l'espérance obtenue numériquement est de 980 ans. Comme nous l'avons expliqué cette différence est caractéristique d'un problème stochastique multiplicatif. L'écart-type observé est égal à 393 ans conduisant ainsi à un coefficient de variation de 40%. Cette valeur est à rapprocher des variabilités introduites concernant les paramètres d'entrée, lesquelles varient de 10 à 25%. Ainsi le problème couplé envisagé ici propage et étend l'incertitude initiale.

Afin de déterminer des fractiles associés à ces durées de vie, leur distribution est modélisée par une loi Log-normale (figure 3.8). 1% des poteaux atteignent leur ruine avant 370 ans, 5% avant 482 ans et 10% avant 554 ans. Ces valeurs permettent d'associer un risque à une durée de vie maximale. Il s'avère néanmoins également pertinent de rechercher quels paramètres du modèle influent de façon prépondérante sur la durée de vie ainsi que les combinaisons de ces mêmes paramètres conduisant à des comportements non souhaités. Le premier point peut se concrétiser au travers d'une recherche de corrélations linéaires — coefficient de Pearson [Rodgers and Nicewander, 1988]. Quant au second point, cette recherche *d'explication* des paramètres peut être conduite grâce à la méthodologie des arbres de décision.

L'analyse de sensibilité [de Larrard, 2010] conduit, pour l'élément de structure qui nous intéresse ici, à mettre en avant le rôle d'un paramètre de la loi d'évolution choisie pour l'endommagement mécanique — paramètre A du modèle d'endommagement de Mazars [Mazars, 1984] — schématiquement relié à la résistance en compression du béton. De plus, du fait du mode de sollicitation, le coefficient de Poisson apparaît également parmi les paramètres les plus influents. Enfin, le coefficient de tortuosité τ , caractéristique de la cinétique de dégradation par l'eau pure, ainsi que le module du matériau présentent également des corrélations importantes avec les durées de vie calculées.

Au delà de la définition de cet ensemble de paramètres, confirmant en grande partie les raisonnements intuitifs, une méthodologie d'explication des grandeurs d'entrée

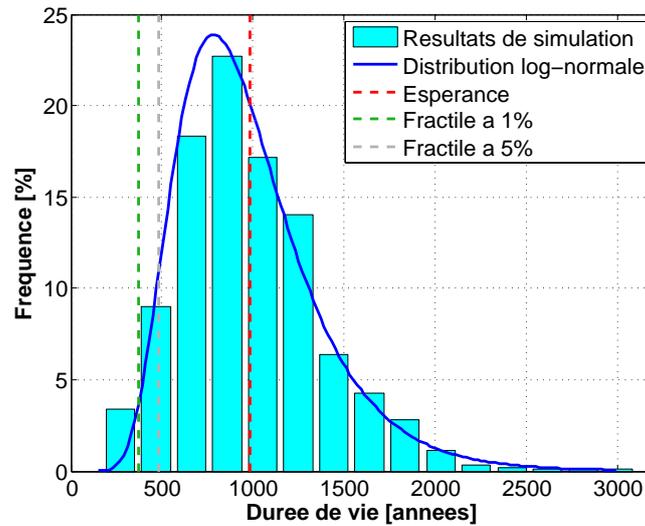


FIGURE 3.8 – Distribution des durées de vie du poteau en eau pure et sollicité en compression simple, et identification d’une loi Log-normale, d’après [de Larrard, 2010]

du modèle doit permettre de quantifier des seuils pour chacune d’entre elles et établir ainsi des catégories de structure. Cette catégorisation peut conduire à estimer *a priori* la durée de vie d’une structure donnée, c’est-à-dire d’une réalisation. Les arbres de décision [Breiman et al., 1984] sont des outils de post-traitement des données statistiques obtenues qui répondent à cette problématique. L’idée sous-jacente est de définir des classes de durées de vie afin d’organiser les réalisations. La première catégorie est constituée des structures dont la durée de vie est inférieure à 370 ans (fractile à 1%). La seconde catégorie est une classe intermédiaire regroupant les structures dont la durée de vie est comprise entre 370 et 482 ans (fractile à 5%). Enfin la dernière catégorie englobe toutes les réalisations dont la durée de vie est supérieure à 482 ans, soit 95% des structures.

La méthodologie de construction de l’arbre de décision est la suivante : chaque catégorie est ordonnée selon une succession de conditions portant sur les paramètres. Chaque condition — par exemple : le paramètre A est supérieur à un seuil donné — constitue un embranchement. La première condition donne donc naissance à deux branches, correspondant à deux catégories de population : les individus satisfaisant la condition et ceux ne la satisfaisant pas. De la même façon, une nouvelle condition donnera naissance, sur chaque branche, à deux nouvelles branches. Les extrémités sont appelées des feuilles et correspondent à une des catégories définies préalablement (dans notre cas, un intervalle de durée de vie). Ainsi chaque catégorie sur la quantité d’intérêt principale — la durée de vie — est atteinte en suivant une succession de conditions sur les paramètres du modèle.

Le nombre important de paramètres peut amener à construire un arbre de déci-

sion complexe et difficilement interprétable. On procède dans ce cas à un élagage, c'est à dire qu'on remplace un embranchement par une feuille, correspondant à la catégorie principale apparaissant au-delà de cet embranchement. En répétant cette opération, l'élagage permet de construire un arbre de décision uni-dimensionnel facilement interprétable, en ne faisant apparaître que les critères les plus importants et portant sur les paramètres les plus significatifs. L'arbre de décision obtenu pour l'élément de structure qui nous intéresse ici apparaît de façon schématique sur la figure 3.9. On peut résumer les conclusions de cet outil, complétant celles de l'étude de sensibilité, sous la forme :

- si $A \geq 0,84$, alors la structure est non pathogène (durée de vie supérieure à 482 ans) ;
- si $A < 0,84$ mais $\nu < 0,19$, alors la structure est non pathogène ;
- si $A < 0,84$ et $\nu \geq 0,19$ et $E < 45$ GPa, alors la structure est pathogène (fractile à 1% des durées de vie les plus courtes) ;
- si $A < 0,84$ et $\nu \geq 0,19$ et $E \geq 45$ GPa mais $\tau < 0,126$, alors la structure est non pathogène ;
- si $A < 0,84$ et $\nu \geq 0,19$ et $E \geq 45$ GPa mais $\tau \geq 0,126$, alors la structure présente une durée de vie intermédiaire (entre 370 et 482 ans).

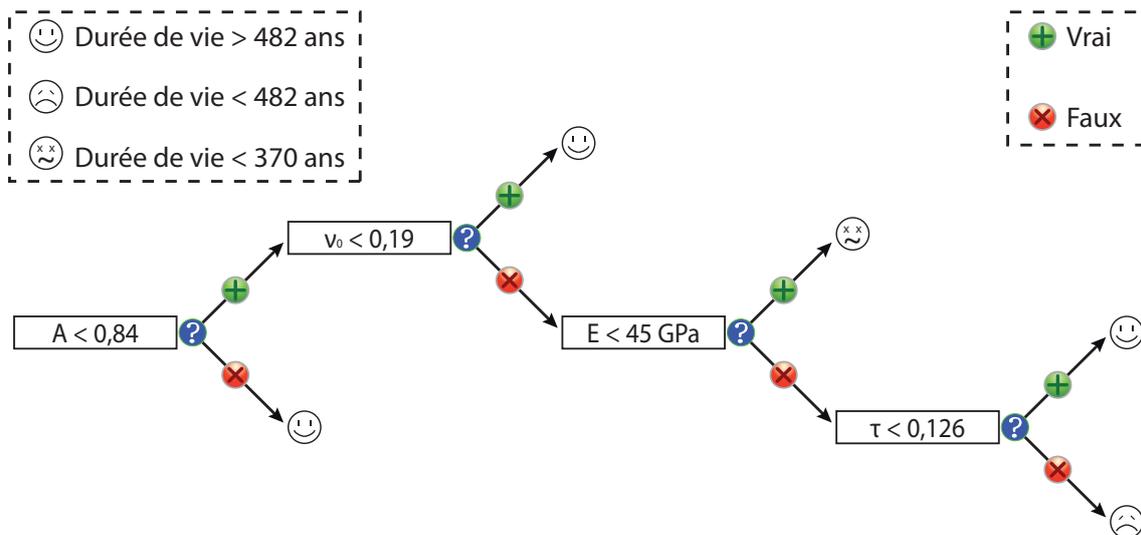


FIGURE 3.9 – Représentation schématique de l'arbre de décision, d'après [de Larrard, 2010]

L'utilisation d'un outil tel que les arbres de décision conduit ainsi à la possibilité de prédire *a priori* le comportement d'une structure donnée en la classant dans un groupe de réponse probable. Par comparaison avec une analyse de sensibilité, cette explication des paramètres d'entrée du modèle choisi apporte ainsi une information supplémentaire de nature à aider une prise de décision.

Le cadre probabiliste trouve un champ d'application naturel et vaste dans l'estimation des durées de vie d'une structure et d'autres cas d'étude ont été envisagés, notamment dans le cadre de la thèse de Thomas de Larrard [de Larrard, 2010]. L'analyse d'une alvéole de stockage de déchets radioactifs et en particulier du comportement à très long terme de sa paroi en béton est un exemple permettant la mise en avant du rôle de la variabilité spatiale. Ainsi, sur la base d'une géométrie simplifiée, la mise en œuvre numérique de la décomposition de Karhunen–Loève permet la génération de réalisations de champs corrélés tri-dimensionnels (correspondant ici à un champ de porosité et un champ de tortuosité) indépendants. De façon générale, considérer des champs fortement corrélés — c'est-à-dire avec une longueur de corrélation supérieure à la taille de la structure envisagée — conduit à une plus grande variabilité de la solution et donc à des durées de vie estimées — en pratique des fractiles — plus courtes. *A contrario*, les champs faiblement corrélés conduisent à des solutions moins dispersées — et donc des durées de vie estimées plus longues —, mettant en avant le rôle crucial de la longueur de corrélation et de la covariance des champs en général.

Pour les matériaux hétérogènes et à l'échelle mesoscopique, la longueur de corrélation peut être estimée sur la base de techniques d'analyse d'images telles que le covariogramme [Serra, 1982]. En l'absence d'image, il est possible de se rattacher à des résultats analytiques, par exemple pour des modèles de sphères non recouvrantes et mono-dimensionnelles [Torquato, 2002]. La longueur de corrélation ainsi obtenue permet alors de définir une taille caractéristique pour le maillage. Au-dessus de cette taille chaque élément peut être vu comme un VER et la prise en compte de la variabilité spatiale à l'échelle mesoscopique n'est pas nécessaire. Dans le cas contraire, la variance marginale peut alors être évaluée en rapport avec la taille du maillage adopté : en considérant un matériau bi-phasique, il s'agit d'évaluer les fluctuations locales de fraction volumique. Une démarche de ce type est actuellement menée, en lien avec le comportement mécanique au jeune âge de structures en béton, dans le cadre du projet ANR MEFISTO.

À l'échelle macroscopique, la variabilité spatiale n'est pas liée à l'hétérogénéité du matériau mais aux variations inhérentes à son processus de fabrication (variabilité inter gâchées pour les matériaux cimentaires) ainsi qu'à son mode de mise en œuvre (passes successives, reprise de bétonnage, etc ...). Malgré les efforts développés dans le cadre du projet APPLLET [Poyet and Torrenti, 2010], notamment autour de la fabrication *in situ* d'un voile et d'un nombre important de mesures effectuées, il est encore difficile de se prononcer sur des longueurs de corrélation à adopter. Dans le cas d'une analyse structurelle, il semble donc raisonnable de considérer des longueurs correspondant aux différentes étapes de construction. Quoi qu'il en soit, il nous semble important d'insister ici sur l'importance de la variabilité spatiale à une échelle plus fine. L'emploi d'un modèle de comportement macroscopique, c'est-à-dire basé sur la notion de VER, et de maillages dont les éléments sont bien souvent plus petits que le VER ainsi défini, doivent conduire à prendre en compte ces fluctuations spatiales.

3.4 Perspectives : morphologie des matériaux hétérogènes

La nécessité de prise en compte des aspects probabilistes est patente dans les processus de modélisation numérique des matériaux hétérogènes. A l'échelle macroscopique ces aspects se reflètent dans l'acquisition de données expérimentales — pour lesquelles une variabilité inhérente est observée — et, en conséquence, dans le choix et l'identification d'un modèle prédictif.

A une échelle plus fine, les modèles mécaniques tels que celui décrit dans la première partie de ce document mettent en avant une nouvelle source de variabilités au travers de la description morphologique du matériau, c'est-à-dire de l'agencement de ses différentes phases. Au modèle mécanique doit donc nécessairement s'ajouter un modèle morphologique, permettant la représentation des phases considérées comme étant les plus importantes, à une échelle donnée.

Considérant les matériaux cimentaires à une échelle intermédiaire dite « mesoscopique », cette modélisation est généralement faite de manière simple, par exemple au travers d'un milieu bi-phasique de type matrice-inclusions, fait d'un assemblage de sphères non recouvrantes ([Torquato, 2002]). Ces modèles sont bâtis sur un processus de points de Gibbs (processus de points marqués [Stoyan, 1995]), pour lesquelles le nombre de points dans un volume V suit une loi de Poisson d'intensité λV (λ est donc l'espérance du nombre d'inclusions par unité de volume). Les diamètres sont alors choisis suivant une granulométrie donnée ou, en l'absence d'information pertinente, à partir d'une distribution théorique. Bien que de formulation simple, ces modèles peuvent néanmoins être délicats à mettre en œuvre numériquement et coûteux, notamment lorsque l'on souhaite atteindre des compacités élevées. De plus la quantité d'information physique nécessaire à la description d'une morphologie donnée — une réalisation — est directement proportionnelle au nombre d'inclusions N envisagées : $4N$ pour un modèle de sphères, $7N$ pour des ellipsoïdes. Enfin la description de formes élémentaires non régulières est difficilement envisageable par ce type d'approches.

Ces raisons nous ont récemment conduits à nous tourner vers des modèles morphologiques dont le contenu « aléatoire » est plus marqué. Ceux-ci sont basés sur des champs aléatoires *corrélés* dont le « seuillage » conduit à des formes complexes. Dans le cas uni-dimensionnel, ce seuillage est illustré par la figure 3.4 où f est une réalisation du champ $f(x, \omega) : M \mapsto \mathbb{R}$ et u le seuil choisi.

L'excursion A_u associée à ce seuillage est définie par l'ensemble des points de M pour lesquels la réalisation f prend des valeurs supérieures à u :

$$A_u \equiv A_u(f, M) \triangleq \{x \in M : f(x) \geq u\} \quad (3.37)$$

Ce principe s'étend aux cas où $M \subset \mathbb{R}^2$ et $M \subset \mathbb{R}^3$, définissant ainsi des excursions bi- ou tri-dimensionnelles (Fig.3.11(b)). Celles-ci présentent des aspects très variés, notamment au vu du seuil choisi. Les figures 3.12(a) et 3.12(b) présentent deux

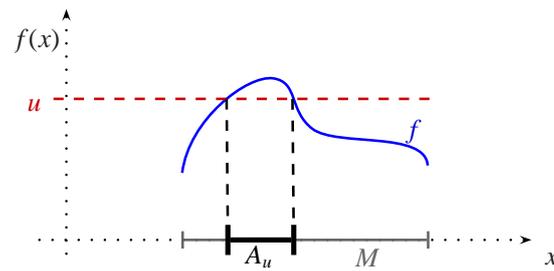
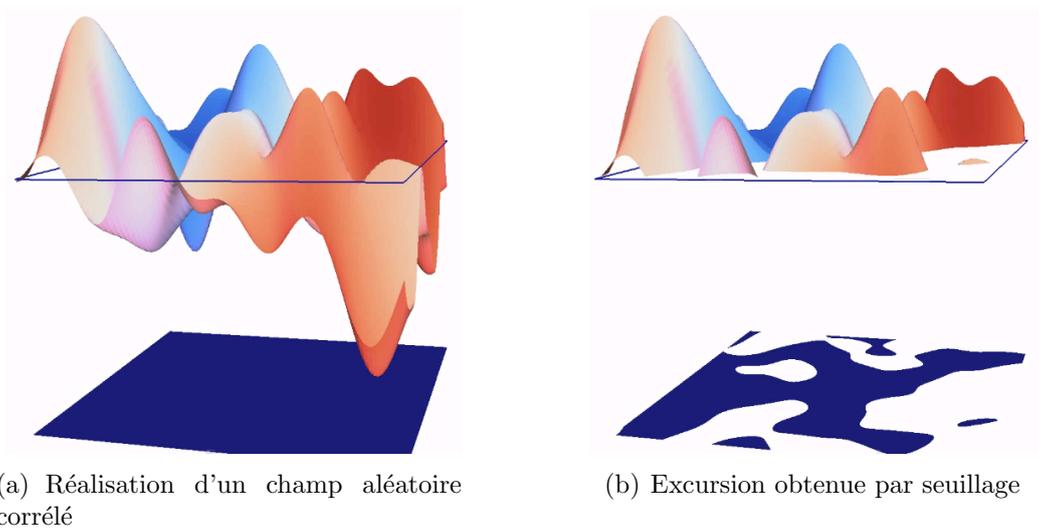


FIGURE 3.10 – Représentation uni-dimensionnelle du principe de seuillage d’une réalisation, d’après [Roubin, 2010]



(a) Réalisation d’un champ aléatoire corrélé

(b) Excursion obtenue par seuillage

FIGURE 3.11 – Exemple d’excursion bi-dimensionnelle, d’après [Roubin, 2010]

excursions obtenues à partir de la même réalisation mais à des niveaux de seuillage différents. Il apparaît clairement que les formes obtenues ont des topologies très variées. Pour un seuil bas l’excursion occupe une part importante du domaine $M \subset \mathbb{R}^3$ — ici un cube — avec quelques « trous » et de nombreuses « anses » évoquant la morphologie d’un matériau poreux. A l’inverse, pour un seuil élevé l’excursion a un volume plus réduit correspondant à plusieurs éléments de formes diverses mais déconnectés. C’est ce type de morphologie qui est manifestement le plus adapté pour les applications visées par notre travail mais il nous apparaît important de remarquer d’ores-et-déjà la richesse de modélisation possible, notamment autour des matériaux poreux.

Cette richesse est déjà mentionnée dans les travaux de [Serra, 1982] et [Roberts and Garboczi, 1999], notamment en lien avec les matériaux cimentaires pour ce dernier. Elle conduit naturellement à rechercher une description morphologique globale — volume, taille et nombre de composants, etc... — au travers de grandeurs statistiques et non pour une réalisation donnée. Il existe pour cela de nom-

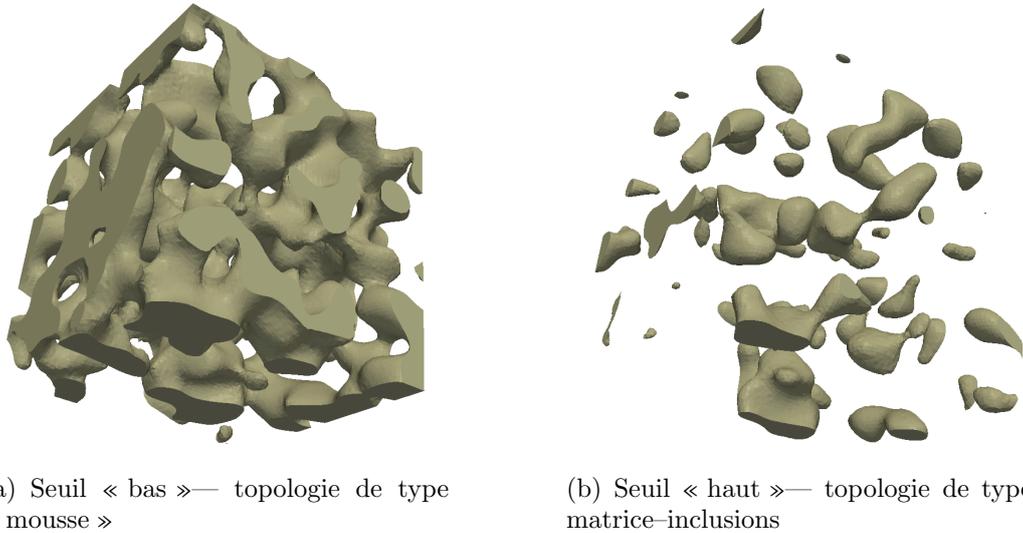


FIGURE 3.12 – Influence du seuil sur la topologie d’une excursion tri-dimensionnelle, d’après [Roubin, 2010]

breuses voies, définissant chacune un ensemble de $n + 1$ grandeurs en dimension n et connues sous une variété de noms : Quermassintegrales, fonctionnelles de Minkowski ou de Steiner, volumes intrinsèques ou courbures de Lipschitz-Killing (LKC). Ces différentes caractéristiques géométriques et topologiques ne diffèrent que pour des questions d’échelles ou d’ordonnancement, et c’est au dernier ensemble que nous faisons référence par la suite. Pour un ensemble A de dimension n , les $n + 1$ LKC $\mathcal{L}_0(A), \dots, \mathcal{L}_j(A), \dots, \mathcal{L}_n(A)$ peuvent être vues comme une mesure du *volume en j dimensions*, $0 \leq j \leq n$. Si $n = 2$ on obtient ainsi les trois grandeurs suivantes :

- $\mathcal{L}_2(A)$ est l’aire de A ;
- $\mathcal{L}_1(A)$ est la moitié du périmètre de A ;
- $\mathcal{L}_0(A)$ est la caractéristique d’Euler de A qui, en deux dimensions, est définie par le nombre de composants connectés dans A auquel on retranche le nombre de trous dans A .

Pour le cas tri-dimensionnel qui nous intéresse par la suite,

- $\mathcal{L}_3(A)$ est le volume de A ;
- $\mathcal{L}_2(A)$ est la moitié de l’aire de A ;
- $\mathcal{L}_1(A)$ est le double du *diamètre du pied à coulisse* de A ;
- $\mathcal{L}_0(A)$ est la caractéristique d’Euler de A qui, en trois dimensions, est définie par la somme du nombre de composants connectés dans A et du nombre de trous auquel on retranche le nombre de anses. Une sphère pleine ou un cube sont topologiquement identiques (caractéristique d’Euler $\chi = 1$) mais différents d’une sphère creuse ($\chi = 2$) ou d’un tore ($\chi = 0$).

Il apparaît clairement que l’ensemble de ces grandeurs fournissent une description à la fois géométrique et topologique — au travers de la caractéristique d’Euler — d’un ensemble. Des résultats — [Adler and Taylor, 2007] et [Taylor, 2006] — ont été ob-

tenus très récemment au sein de la communauté morpho-mathématique permettant de calculer les *espérances* des LKC associées aux excursions de champs aléatoires. Exploités au cours du stage de M2 d'Emmanuel Roubin [Roubin, 2010] dans le cas de champs Gaussiens, ces travaux permettent d'explicitier les espérances des LKC de l'ensemble des excursions A_u d'un champ $f(\mathbf{x}, \omega)$ défini sur un cube $M = \prod_{i=1}^{n=3} [0, T]$ sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} E[\mathcal{L}_0(A_u)] = \left[\frac{\sqrt{2}}{2\pi^2} \frac{T^3}{L_c^3} \left(\frac{u^2}{\sigma^2} - 1 \right) + \frac{3\sqrt{2}}{2\pi^{3/2}} \frac{T^2}{L_c^2} \frac{u}{\sigma} + \frac{3\sqrt{2}}{2\pi} \frac{T}{L_c} \right] e^{-\frac{u^2}{2\sigma^2}} + \Psi\left(\frac{u}{\sigma}\right) \\ E[\mathcal{L}_1(A_u)] = \left[\frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/2}} \frac{T^3}{L_c^3} \frac{u}{\sigma} + \frac{3\sqrt{2}}{4} \frac{T^2}{L_c} \right] e^{-\frac{u^2}{2\sigma^2}} + 3T\Psi\left(\frac{u}{\sigma}\right) \\ E[\mathcal{L}_2(A_u)] = \frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{T^3}{L_c} e^{-\frac{u^2}{2\sigma^2}} + 3T^2\Psi\left(\frac{u}{\sigma}\right) \\ E[\mathcal{L}_3(A_u)] = T^3\Psi\left(\frac{u}{\sigma}\right) \end{array} \right. \quad (3.38)$$

Dans ces relations apparaissent explicitement les caractéristiques du champ aléatoire corrélé : variance σ et longueur de corrélation L_c (le champ est ici supposé centré). Bien que ses relations correspondent à un modèle Gaussien de covariance (3.25), il est tout à fait possible de les établir pour d'autres modèles [Roubin, 2010].

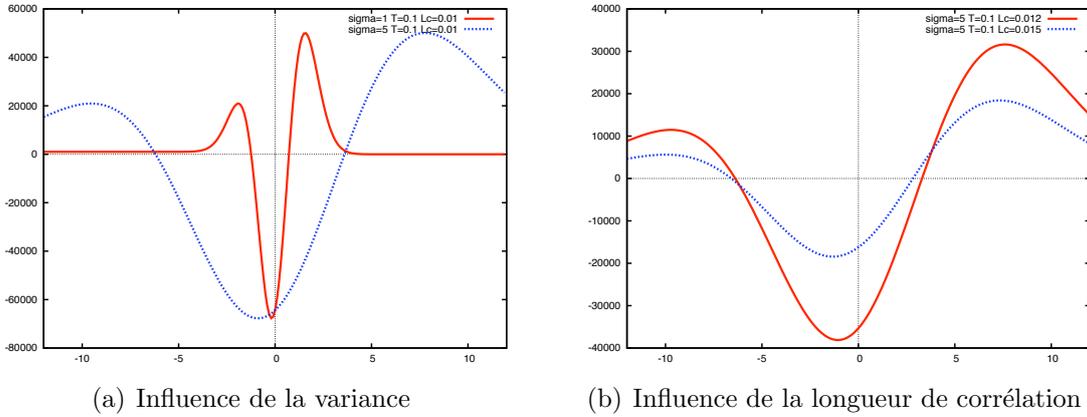


FIGURE 3.13 – Evolutions théoriques de l'espérance de la caractéristique d'Euler *spécifique* de l'ensemble des excursions d'un champ Gaussien centré, d'après [Roubin, 2010]

La figure 3.13(a) présente l'influence de la variance du champ $f(\mathbf{x}, \omega)$ sur l'espérance de la caractéristique d'Euler spécifique. Pour des seuils très négatifs celles-ci tendent vers celle du cube — plus précisément $1/T^3$ — tandis que, pour des valeurs élevées de u , les deux courbes tendent vers zéro. Entre ces deux valeurs extrêmes l'excursion passe par deux topologies très différentes et qui se traduisent par une caractéristique d'Euler négative (prédominance de anses à la manière d'un réseau

poreux) puis positive. De nombreux auteurs (voir par exemple [Okun, 1990]) associent le changement de signe de $E[\mathcal{L}_0(A_u)]$, et donc le basculement de morphologie, au seuil de percolation.

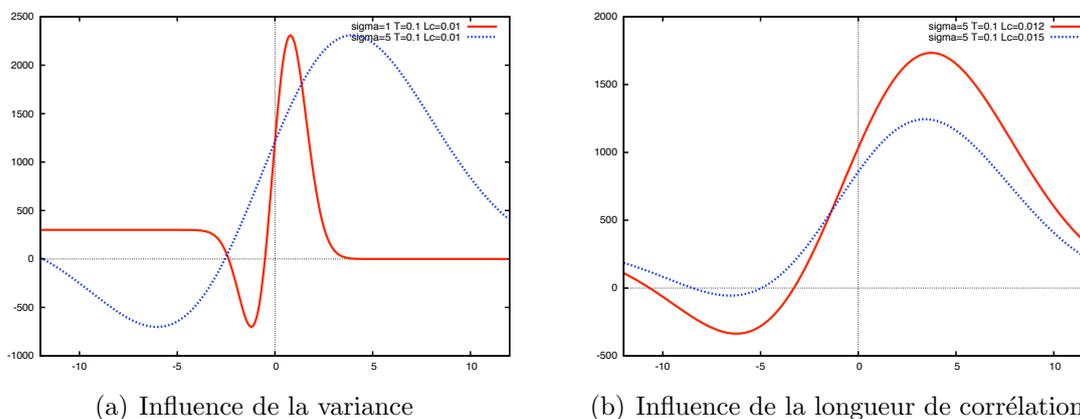


FIGURE 3.14 – Evolution théorique de l'espérance du diamètre moyen *spécifique* de l'ensemble des excursions d'un champ Gaussien centré, d'après [Roubin, 2010]

La figure 3.13(b) présente l'influence de la longueur de corrélation sur cette même caractéristique d'Euler. Il apparaît clairement qu'un champ plus faiblement corrélé — longueur de corrélation plus petite — conduit à des valeurs extrêmes de $E[\mathcal{L}_0(A_u)]$ plus importante. Dans le domaine d'une morphologie du type matrice-inclusions ceci se traduit par un nombre de composants connectés plus élevés et de tailles plus petites. Quant à la topologie de type « mousse », les excursions présentent alors des anses plus nombreuses et plus fines.

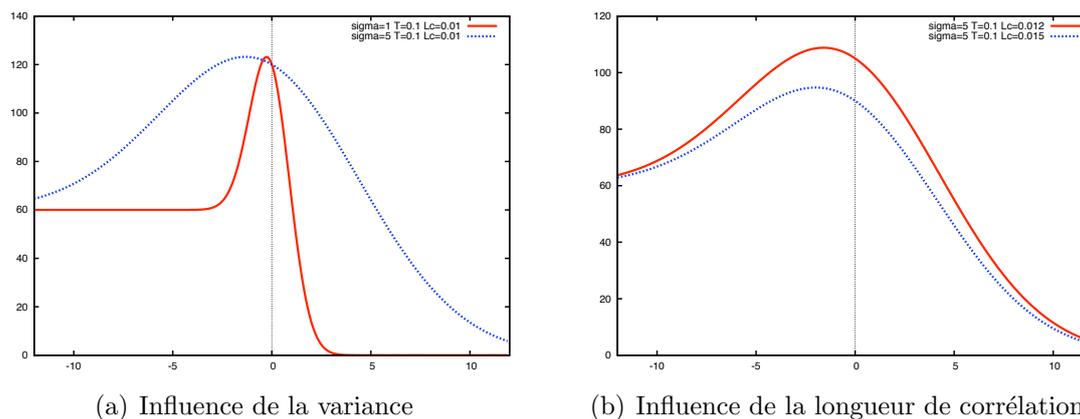


FIGURE 3.15 – Evolution théorique de l'espérance de la surface *spécifique* de l'ensemble des excursions d'un champ Gaussien centré, d'après [Roubin, 2010]

Ces évolutions relatives à la morphologie de A_u sont également mises en évidence au travers des trois autres grandeurs morphologiques décrites précédemment :

Fig.3.14(a) et Fig.3.14(b) pour l'espérance du diamètre du pied à coulisse, Fig.3.15(a) et Fig.3.15(b) pour l'espérance de la surface spécifique et Fig.3.16(a) et Fig.3.16(b) pour le volume spécifique. Chacune de ces courbes, images des relations (3.38), montrent l'évolution de la morphologie lorsque le seuil évolue. On observe également le rôle primordial de la fonction de covariance — ici au travers de la longueur de corrélation — ainsi que de la variance marginale.

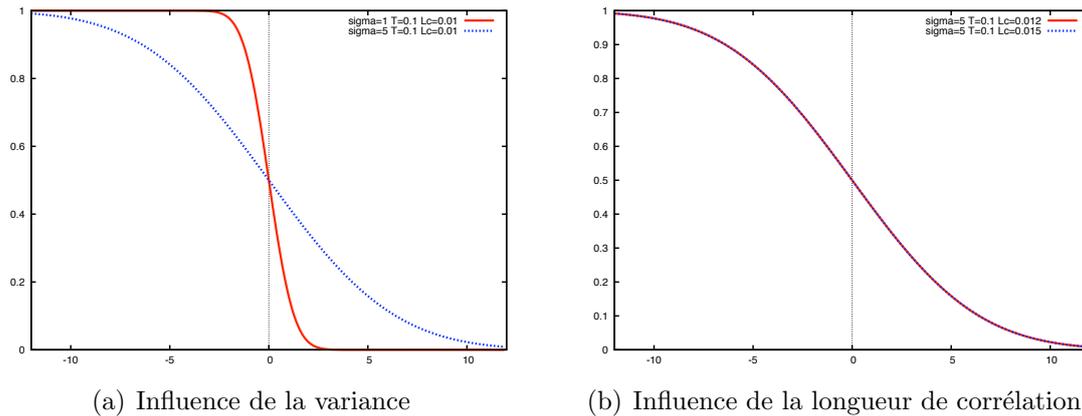
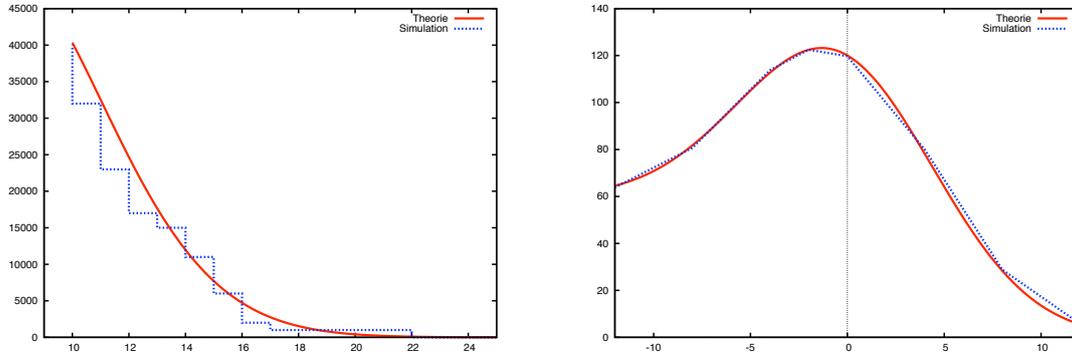


FIGURE 3.16 – Evolution théorique de l'espérance du volume *spécifique* de l'ensemble des excursions d'un champ Gaussien centré, d'après [Roubin, 2010]

Il est notable de constater que, même si les travaux de [Adler and Taylor, 2007] conduisent à exprimer les espérances des quatre descripteurs morphologiques, la variabilité constatée « expérimentalement » dans la gamme des excursions qui nous intéressent ici est très réduite. La figure 3.17(a) montre par exemple la comparaison entre l'espérance théorique de $E[\mathcal{L}_0(A_u)]$ et son estimateur au travers d'une seule réalisation. Cette dernière a été mesurée pour des valeurs de seuil élevées permettant de réduire la caractéristique d'Euler au nombre de composants connectés. La même comparaison est faite au travers de la figure 3.17(b) pour le volume spécifique. La courbe représentant l'estimateur de $E[\mathcal{L}_3(A_u)]$ pour un échantillon de trois réalisations est très proche de l'espérance théorique et la variabilité est très réduite.

Au final, l'ensemble des relations (3.38) permettent d'établir un lien inverse entre les caractéristiques morphologiques recherchées et les paramètres du champ Gaussien sous-jacent aux excursions. Cette approche paramétrique a permis la mise en place d'un modèle morphologique générant des géométries de type matrice-inclusions bien adaptées aux matériaux cimentaires à l'échelle mesoscopique [Roubin, 2010]. Couplé à la stratégie de modélisation pour les matériaux hétérogènes présentée dans la première partie de ce document, ce modèle morphologique conduit à des résultats qualitativement équivalents à ceux obtenus sur la base d'un modèle de sphères non recouvrantes (Fig.3.18).

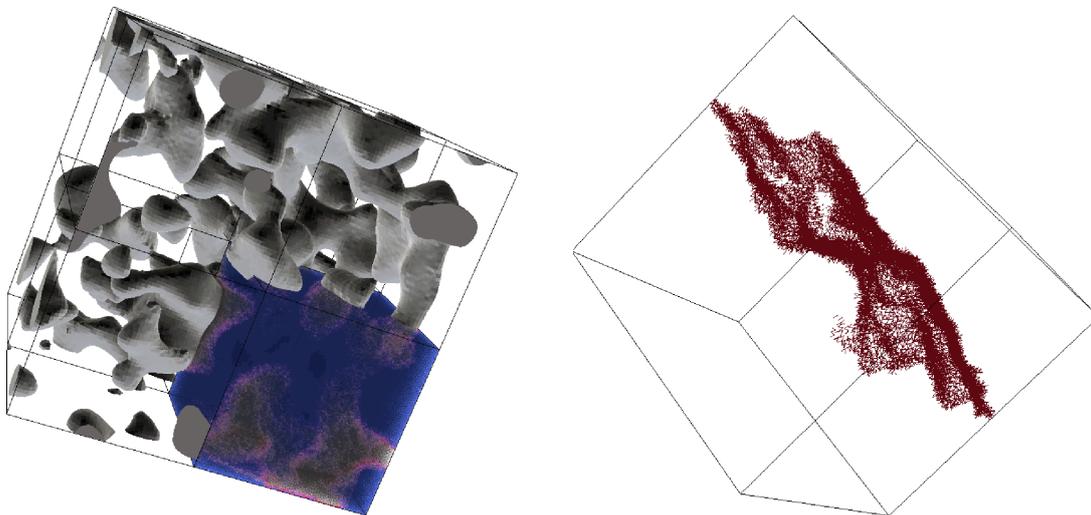
De nombreuses perspectives nous semblent ouvertes en association avec les idées et les outils présentés ici. La possibilité de mettre en place une classe de modèles mor-



(a) Caractéristique d'Euler : une réalisation

(b) Surface spécifique : trois réalisations

FIGURE 3.17 – Comparaisons entre les espérances théoriques et les estimateurs obtenus pour l'ensemble des excursions d'un champ Gaussien centré, d'après [Roubin, 2010]



(a) Projection de l'excursion sur un treillis

(b) Faciès de fissuration

FIGURE 3.18 – Exemple de projection d'une excursion sur un treillis spatial et faciès de fissuration obtenu en traction simple, d'après [Roubin, 2010]

phologiques s'appuyant sur très peu de paramètres — ici trois : variance, longueur de corrélation et seuil — quelle que soit la taille du domaine considéré, est un point qui semble extrêmement intéressant, notamment en comparaison avec des modèles classiques tels que ceux basés sur des sphères non recouvrantes. Afin de mettre en œuvre cette classe de modèles, une approche non paramétrique du problème d'identification paraît nécessaire. Celle-ci doit en effet permettre d'inclure le choix de la fonction de covariance dans le processus d'identification et ainsi s'affranchir de la définition *a priori* d'un modèle. Ainsi de nombreuses formes de fonctions de covariance sont à explorer dans l'avenir, conduisant à des morphologies sans doute très diverses.

Enfin, il nous apparaît notable de faire le lien entre la notion de seuillage et la problématique de l'évolution, au cours du temps, d'une morphologie. Ainsi, de part l'évolution temporelle du seuil $u(t)$, la méthodologie présentée ici doit permettre de modéliser, par exemple, la formation progressive d'hydrates autour de grains de ciment anhydres ou bien la précipitation — germination et croissance de cristaux — d'espèces chimiques au sein d'une porosité. Profitant du très faible nombre de paramètres mis en jeu et de résultats analytiques puissants, un grand nombre d'applications de ce type devrait pouvoir profiter du seuillage de champs aléatoires corrélés.

3.5 Conclusions

Les aspects probabilistes constituent un enjeu majeur dans la modélisation numérique en Génie Civil. Les sources de variabilité sont en effet telles que les modélisateurs ne peuvent à présent plus se contenter de fournir un ensemble de résultats sans leur associer un degré d'incertitude, au travers par exemple d'intervalles de confiance portant sur les espérances de quantités d'intérêt définies à l'avance. Comme nous l'avons vu, le calcul de ces informations statistiques nécessite de mettre en place une méthode *d'intégration* stochastique. La plupart des travaux synthésés dans ce document se portent sur les méthodes de Monte Carlo — méthodes directes — qui sont très peu intrusives. Elles présentent des propriétés de convergence qui, bien que modestes, sont parfaitement établies pour une très large classe de problèmes, linéaires ou non. Enfin, leur mise en œuvre pratique est grandement facilitée, d'une part par le contexte introduit par la Programmation Orientée Composant — décrite dans le chapitre suivant — ainsi que par l'emploi de la décomposition de Karhunen–Loève. Cette dernière constitue un outil indispensable dans la mise en place de ces schémas numériques stochastiques. Elle permet de plus une mise en données probabilistes au travers de champs aléatoires corrélés.

Les champs aléatoires corrélés sont, de notre point de vue, la forme de mise en données probabilistes la plus riche et la plus adéquate pour les problèmes rencontrés en Génie Civil. Ils permettent en effet de décrire les variabilités spatiales, à l'échelle macroscopique, de l'ensemble des propriétés du matériau. A cette échelle,

ces variabilités sont inhérentes aux incertitudes concernant la formulation, à la nature des composants élémentaires, aux processus de mise en œuvre *in situ* ainsi qu'aux conditions environnementales. Les champs aléatoires sont donc parfaitement adaptés à cette échelle et ils conduisent à constituer un lien étroit avec l'acquisition expérimentale d'informations. Ainsi de nombreuses voies sont actuellement ouvertes dans ce domaine, notamment autour de la notion de longueur de corrélation et de l'identification des fonctions de covariance en général.

A une échelle plus fine, le caractère hétérogène de la morphologie des matériaux cimentaires conduit plus naturellement vers des modèles morphologiques discrets. Néanmoins, nous pensons que, ici encore, les champs aléatoires corrélés peuvent prendre une place importante, notamment au travers de seuillages de leurs réalisations et des excursions ainsi obtenues. En lien avec les développements actuels issus de la communauté morpho-mathématique, les propriétés géométriques et topologiques de ces excursions peuvent être reliées aux caractéristiques du champ aléatoire considéré. Sur cette base il est donc possible de modéliser une très large classe de morphologies, allant d'inclusions dans une matrice jusqu'à des réseaux poreux, avec très peu d'informations. De nombreuses voies sont ouvertes dans ce domaine, notamment en référence aux méthodes multi-échelles intégrées.

Enfin, il apparaît clairement que les approches probabilistes conduisent à produire des quantités très importantes de résultats, numériques ou expérimentaux. Ainsi, les démarches d'explication des variables statistiques nous semblent d'une grande importance dans l'analyse de ces données. Ces méthodes, issues du domaine du « data mining » [Kantardzic, 2003], permettent d'extraire des connaissances et ainsi de contribuer à la recherche des phénomènes physiques pertinents.

Chapitre 4

Programmation Orientée Composant — POC : Applications aux problèmes multi-physiques

Contents

4.1	Principes de la POC	86
4.1.1	La POC comme une extension de la Programmation Ori- entée Objet	86
4.1.2	Le middleware CTL	87
4.2	Exemple d'un composant EF : coFeap	88
4.3	Exemples de couplages faibles	92
4.4	Exemples de couplages forts	95
4.4.1	Problèmes d'interaction fluide–structure	96
4.4.2	Transferts dans les milieux fissurés	97
4.5	Conclusions et perspectives autour de la POC	103

La Programmation Orientée Composant est un aspect majeur des travaux synthétisés dans ce document. Son utilisation au sein de notre équipe a permis d'adopter une véritable démarche de projet et de développement numérique collaboratif : pérennisation des codes, répartition des fonctionnalités, définition d'interfaces communes, etc ... Ses aspects ont été rendus possibles par un long travail de collaboration avec l'équipe du Pr. Matthies à la TU Braunschweig en Allemagne, initié par des séjours, en 2004 et 2005, et prolongé par les thèses en cotutelle de Martin Hautefeuille (2005–2009) et Christophe Kassiotis (2006–2009). Cette collaboration particulièrement fructueuse continue actuellement au travers de la thèse de Mehdi Asali, actuellement en première année.

Nous décrivons ici tout d'abord les principes définissant la POC, le middleware CTL et, à titre d'exemple, le composant `coFeap`. Nous montrons par la suite comment la POC permet la mise en œuvre d'une résolution numérique entièrement partitionnée des problèmes multi-physiques, qu'ils soient faiblement ou fortement couplés.

4.1 Principes de la POC

L'idée fondatrice de la Programmation Orientée Composant est d'adopter une approche modulaire dans la démarche de conception de l'architecture d'un projet informatique. L'objectif est d'assurer une meilleure lisibilité et surtout une maintenance plus aisée en développant des « briques » logicielles réutilisables, nommées composants. Parmi les différentes propriétés définissant un composant ([[Mac Ilroy, 1968](#)] et [[Szyperski, 1998](#)]), l'encapsulation est la plus notable. Celle-ci conduit chaque composant à être utilisable dans différents contextes ou pour différents projets, toujours au travers de son interface. Cette dernière doit être donc mûrement réfléchie et sa définition concentrer une grande part du travail de réalisation d'un composant.

4.1.1 La POC comme une extension de la Programmation Orientée Objet

La POC peut être vue comme une extension de la Programmation Orientée Objet (POO), au niveau des logiciels eux-mêmes. De part l'encapsulation les classes comme les composants ne sont, en général, pas explorables mais permettent la réalisation d'un certain nombre de tâches — des méthodes — définies dans leur interface. Les composants ont, en outre, la possibilité de communiquer avec d'autres composants au travers d'un réseau. Ils permettent l'instantiation d'objets multiples, indépendants, le plus souvent au travers de ce réseau et conduisent donc à une distribution naturelle et aisée des tâches. L'intérêt pour la mécanique numérique est donc manifeste, aussi bien dans le cadre des approches multi-échelles intégrées, des méthodes de Monte-Carlo — instantiation d'un nombre important d'objets « code EF » — que pour les problèmes multi-physiques où plusieurs codes — chacun d'entre eux étant dédié à

une « physique » — coexistent.

Plusieurs raisons peuvent conduire à se placer dans le cadre de la POC. En premier lieu la volonté de réemployer, dans un contexte plus large, des logiciels existants et dont la fiabilité a été démontrée, leur offrant ainsi une durée de vie plus longue. En deuxième lieu, la possibilité de paralléliser un ensemble de tâches au sein d'un environnement distribué. Sur le plan du Génie Logiciel, la POC s'appuie sur des procédures d'appel à distance — remote procedure call (RPC) — qui conduit à la conception d'architectures du type client–service. Les logiciels ou les composants d'une architecture donnée sont divisés en deux catégories : les « clients » qui envoient des requêtes et les « services » qui les exécutent. Ce type d'architecture diffère de celles développées sur la base d'une communication explicite — explicit message passing — et qui sont les principaux concurrents de la POC au sein de la communauté du calcul scientifique (notamment autour du développement de MPI [Gropp et al., 1994]). Le principal inconvénient des implémentations basées sur une communication explicite a trait au mélange entre des problématiques algorithmiques et les questions liées à la communication. Ce point rend le code plus difficile à comprendre et requiert l'intervention d'un « expert » pour décider à quels endroits la communication doit avoir lieu. Suivant les principes de la POC et les procédures d'appel à distance RPC, le développement d'un composant est indépendant, d'une part de son implémentation interne et, d'autre part, des problématiques liées à la communication avec les autres composants. Ces dernières sont laissées à une couche logicielle intermédiaire, le middleware. Cette séparation rend les développements plus simples, plus fiables et, en général, plus aisés à maintenir.

4.1.2 Le middleware CTL

La POC nécessite l'utilisation d'un middleware. Celui-ci est une couche logicielle dans laquelle « baignent » les différents composants mis en œuvre. Ce middleware prend notamment en charge l'instantiation et la communication entre les composants [Orenstein, 2000].

Parmi les différents middleware accessibles aujourd'hui, Java™RMI, CORBA (Common Object Request Broker Architecture) et Microsoft® .NET sont les plus connus. Parmi ceux-ci, seul CORBA a des performances suffisantes, en termes de temps d'exécution et de transferts de grandes quantités d'informations, pour des applications scientifiques. Durant les dix dernières années, un nombre croissant de middlewares à vocation scientifique — CCA [Kohl and Bernholdt, 2002], Charm++ [Lawlor and Zheng, 1999] ou CTL [Niekamp, 1995] — ont été développés afin de s'affranchir des difficultés liées à l'utilisation de CORBA, notamment sa syntaxe complexe. Introduisant un langage et des concepts spécifiques, celui-ci est difficile d'utilisation pour les non-spécialistes.

Développé par Rainer Niekamp dans l'équipe du Pr. Matthies à la TU Braunschweig, CTL — Component Template Library — prend la forme d'une librairie C++. Ses avantages sont nombreux : description des interfaces en langage processeur

du C, gestion automatique du typage pour les langages Fortran, C, et C++, gestion de nombreux protocoles de communication (MPI, Pipe, TCP/IP, Thread, etc ...). Plusieurs études ont montré que ces performances sont tout à fait comparables à celles de CORBA. Sa simplicité d'utilisation — absence de langage spécifique — a permis à de nombreux utilisateurs, non-spécialistes des questions liées au Génie Logiciel — doctorants ou stagiaires —, d'être rapidement opérationnels avec les outils communs à l'équipe.

4.2 Exemple d'un composant EF : `coFeap`

L'utilisation de la POC au sein de la démarche présentée ici s'est principalement faite au travers de la réalisation du composant `coFeap`. Les bases de ce composant ont été jetées à l'occasion du séjour du Pr. R.L. Taylor et du Dr. R. Niekamp au LMT-Cachan à la fin de l'année 2003. Après avoir été utilisé lors de la thèse de Sergiy Melnyk, ce prototype de composant a été, par la suite, en totalité réécrit (et en partie également repensé) à l'occasion des thèses de Martin Hautefeuille et de Christophe Kassiotis.

Le composant `coFeap` est principalement basé sur le code de calcul par Eléments Finis Feap et sur une interface `simu.ci` originellement conçue par R. Niekamp [Niekamp, 2005]. Cette dernière a été établie avec la volonté de donner une définition abstraite d'un logiciel de simulation des phénomènes physiques, quelle que soit la méthode numérique sous-jacente, Eléments Finis, Volumes Finis ou toute autre. Ainsi les méthodes définies dans `simu.ci` sont représentatives des opérations de pre-traitement (par exemple la définition des conditions aux limites), de résolution et de post-traitement. Cette interface est, en pratique, d'une forme très proche d'une entête C++ :

```
#ifndef __SIMU_CI_
#define __SIMU_CI_

#include <ctl.h>

#define CTL_ClassTmpl SimuCI, ( scalar1 ), 1
#include CTL_ClassBegin

# define CTL_Constructor1 (const string /*filename*/), 1
# define CTL_Constructor2 (const string /*filename*/, \
                           const array<scalar1> /*param*/), 2

# define CTL_Method2 array<int4>, get_param, (const string) const, 1
# define CTL_Method3 void, set_param, (const array<int4> /*p*/), 1
# define CTL_Method4 void, get_state, (array<scalar1>) const, 1
# define CTL_Method5 void, set_state, (const array<scalar1> /*x*/), 1
# define CTL_Method6 void, set_load, (const array<scalar1> /*load*/), 1
[...]
```

```

# define CTL_Method9 void, get_residual, (array<scalar1> /*r*/) const, 1
# define CTL_Method10 int4, solve, (), 0
# define CTL_Method11 void, time_step, (const scalar1 /*dt*/), 1
[...]
# define CTL_Method15 void, get_nodes, (array<scalar1> /*nodes*/, \
                                       int4 /*dim*/) const, 2
# define CTL_Method16 void, get_mass, (array<int4> /*row's index*/, \
                                       array<int4> /*column's index*/, \
                                       array<scalar1> /*matrix*/) const, 3
# define CTL_Method17 void, get_stiff, (array<int4> /*row's index*/, \
                                       array<int4> /*column's index*/, \
                                       array<scalar1> /*matrix*/), 3

[...]
# define CTL_Method21 void, reaction, (array<scalar1> /*r*/) const, 1
# define CTL_Method22 void, get_load, (array<scalar1> /*loads*/) const, 1
# define CTL_Method23 void, plot, (int4 /*test*/) const, 1
# define CTL_Method24 void, set_residual, (const array<scalar1> /*r*/), 1

# include CTL_ClassEnd

#endif

```

Listing 4.1 – Extraits de la définition de l'interface `simu.ci` d'après [Niekamp, 2005]

Feap est, quant à lui, développé depuis plusieurs années par le Pr. Robert Taylor à l'université de Berkeley [Zienkiewicz and Taylor, 2001b]. Ce dernier est écrit en très grande majorité en Fortran et l'encapsulation au sein d'un composant CTL rend son utilisation simple et directe dans le cadre d'une architecture en C++. Une fois l'interface `simu.ci` mise en place, la réalisation pratique du composant consiste à implémenter chacune des méthodes qui y sont définies. Cette implémentation se fait dans le langage du code pris pour base, ici donc en Fortran. A titre d'exemple l'implémentation de la méthode « `get_nodes` », dont le rôle est de renvoyer l'ensemble des coordonnées des nœuds du maillage, est décrite ici par le Listing 4.2. Concrètement elle consiste simplement à recopier, dans un tableau Fortran nommé `x0`, les différentes coordonnées des nœuds et de fixer sa taille au travers de l'entier `s0`.

```

subroutine simu_get_nodes_impl(s0,x0,s1)

implicit none

include 'cdata.h'
include 'sdata.h'
include 'iofile.h'
include 'pointer.h'
include 'comblk.h'
include 'control.h'

```

```

integer s0,i,s1
real*8  x0(s0)

if(s0.lt.ndm*numnp) then
  s0 = ndm*numnp
else
  write(ioc,1000) numnp,ndm,s0
  s1 = ndm
  do i = 1,s0
    x0(i) = hr(np(43)+i-1)
  end do
endif

1000 format(/3x,'M_e_t_h_o_d_g_e_t_n_o_d_e_s' /
.         6x, 'number_of_nodes=', i11 /
.         6x, 'dimension_of_the_problem=', i2 /
.         6x, 'output_size=', i15 )

end

```

Listing 4.2 – Implémentation de la méthode `get_nodes` d’après [Kassiotis and Hautefeuille, 2008]

En pratique cette méthode sera appelée à partir d’un « client », en C++, sous la forme :

```

#include <simu.ci> /* interface */

int main () {

  ctl::location simuLoc = "<path>/libcofeap.so-1-lib";
  ctl::link simuLink ( simuLoc );
  SimuCI<double> my_CoFeap ( simuLink, "Cfile" ); /* instantiation */

  std::vector<double> nodes;
  my_CoFeap.get_nodes(nodes); /* invocation de la methode */
  return 0;
}

```

Listing 4.3 – Exemple de client invoquant la méthode `get_nodes` de `coFeap`

Il est intéressant de faire le rapprochement entre la définition de la méthode `get_nodes` (Listing 4.1), son implémentation (Listing 4.2) et son usage par un client (Listing 4.3). Bien que Feap soit écrit en Fortran et que, en conséquence, les coordonnées des nœuds soient représentées sous la forme d’un tableau de réels double

précision — `real*8` –, le client attend en effet un vecteur de réels double précision — vecteur `double` de la librairie standard du C++ ([Stroustrup, 1986]). Le transtypage est géré de manière transparente par CTL et le vecteur de la librairie standard devient, du point de vue du service, un tableau accompagné d'un entier donnant sa taille. Ceci peut s'observer,

- au niveau de la signature de la méthode dans l'interface du composant :
`(array<scalar1> /* nodes */ ,int4 /* dim */)`
- au niveau de l'appel dans le client : `my_CoFeap.get_nodes(nodes)` ;

Enfin, CTL permet différents types de communication entre clients et services. Un des points les plus notables à ce sujet a trait à la possibilité d'appeler des méthodes de manière asynchrone, c'est-à-dire non bloquante. Ce type d'appel conduit à une distribution simplifiée de n tâches sur $m < n$ composants. Nous illustrons par le Listing 4.4 ces appels non bloquants.

```
#include <simu.ci> /* interface */

int main () {

    ctl::location sh_Loc = "<path>/libcofeap.so_l_l lib";
    ctl::location ex_Loc = "<path>/cofeap.exe_l_l tcp";

    ctl::link sh_Link (sh_Loc);
    ctl::link ex_Link (sh_Loc);

    SimuCI<double> CoFeap_sh (sh_Link,"Cfile");
    SimuCI<double> CoFeap_ex (ex_Link,"Cfile");

    /* Appel d'une librairie */
    int res_ex = CoFeap_sh.solve();
    /* bloquant ... */

    /* Appel d'un executable */
    int res_sh = CoFeap_sh.solve();
    /* bloquant ... */

    /* Appel asynchrone */
    ctl::result<ctl::int> rr = CoFeap_sh.solve();
    /* non bloquant
       on peut faire autre chose en attendant le resultat */

    return 0;
}
```

Listing 4.4 – Différents types d'appels du composant `coFeap`

La réalisation de ce composant représente un point majeur du travail présenté ici et de la collaboration avec l'université de Braunschweig. Son utilisation s'est en

grande partie substituée au code Feap en lui-même et de nombreux travaux sont en cours grâce à cet outil, notamment pour toutes les applications multi-physiques dont plusieurs exemples sont décrits dans la suite de ce chapitre.

4.3 Exemples de couplages « faibles »

Parmi les différentes sollicitations auxquelles sont soumises les structures de Génie Civil, les aspects thermique et hydrique ont une grande importance. Les premiers ont principalement trait, d'une part au comportement au jeune âge des matériaux cimentaires — la réaction d'hydratation du ciment est à la fois exothermique et thermo-activée — et à la résistance au feu des structures. Quant aux aspects hydriques, ils sont prépondérants dans la prévision du comportement mécanique et de la durabilité — au travers notamment de la fissuration — des structures plongées dans un environnement à degré d'hygrométrie faible.

Ces deux types de sollicitations ont en commun de pouvoir être physiquement modélisées au travers d'un couplage faible : dans les deux cas, les déformations d'origine thermique ou hydrique sont vues comme des sollicitations appliquées à la structure. La prise en compte d'un couplage thermique fort, c'est-à-dire pour lequel le comportement mécanique de la structure influe sur les transferts de chaleur, relève de matériaux exhibant un comportement ductile et de sollicitations mécaniques engendrant des taux de déformations très élevés (de l'ordre de 10^5 s^{-1} voir [Ibrahimbegovic et al., 2001]). A notre connaissance ces aspects ne trouvent donc que très peu d'applications dans le domaine des matériaux cimentaires. En revanche, pour ce qui concerne les transferts de masse, l'apparition de fissures conduit nécessairement à une augmentation très significative des perméabilités apparentes et donc à une modification importante des transferts. Ce couplage fort est abordé dans la suite de cette partie (§ 4.4) et nous nous concentrons ici sur les couplages faibles.

Notre objectif n'est pas ici de détailler les modèles physiques associés aux comportements thermo- ou hydro-mécanique des matériaux cimentaires — voir par exemple [Heinfling et al., 1997] pour les modèles thermo-mécanique de béton et [Benboudjema et al., 2005] pour les modèles hydro-mécaniques — mais d'insister sur les méthodes de résolution partitionnées. Celles-ci présentent de nombreux avantages face aux méthodes de résolution globales et leur utilisation s'est généralisée. Le partitionnement du nombre total de degrés de liberté conduit en effet à des problèmes de tailles plus réduites et permet de ne pas être confronté à un système discret de grande taille. Cette possibilité de partitionnement est le plus souvent offerte par les codes de calcul EF (c'est le cas du code Feap). Bien qu'en théorie ce partitionnement permette également de tenir compte des différentes constantes de temps apparaissant pour les différentes « physiques », par exemple en utilisant des schémas d'intégration en temps différents pour chaque sous-problème, cette possibilité est en revanche assez peu présente dans les codes de calcul. La POC présente ici un grand intérêt en permettant la mise en place d'une architecture très « naturelle », axée autour de

plusieurs composants et d'un client s'appuyant sur différents algorithmes de résolution par blocs : Bloc-Jacobi ou Bloc-Gauss-Seidel ([Matthies et al., 2006b]). C'est sur ce type d'architecture que nos premières applications de la POC au couplage thermo-mécanique faible ont été menées. Il s'agit d'instantier deux composants EF — prototypes du composant `coFeap` — et d'adopter un schéma Gauss-Seidel avec des discrétisations en temps différentes (Fig.4.1, [Kassiotis et al., 2009]).

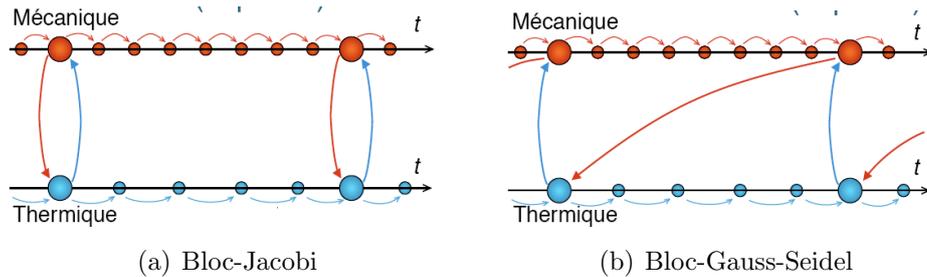


FIGURE 4.1 – Illustrations des schémas de résolution partitionnée sur la base de discrétisations en temps différentes, d'après [Kassiotis et al., 2009]

Au-delà de ce premier aspect, l'emploi de maillages indépendants, voire de méthodes numériques distinctes, est parfois souhaitable. C'est notamment le cas pour les problèmes d'interaction fluide-structure (bien qu'il s'agisse ici d'un exemple de couplage fort) sur lesquels nous revenons plus tard dans cette partie. Ici encore la POC nous est apparue comme étant une voie simple — sur le plan du Génie Logicielle — et fiable de mise en œuvre numérique.

Parmi les autres applications en lien avec la résolution de problèmes faiblement couplés, les transferts hydriques et leurs conséquences sur les matériaux cimentaires sont également à mettre en avant. Sur la base du modèle de comportement mécanique à l'échelle mesoscopique décrit dans le premier chapitre de ce document, une méthode multi-échelles séquencée peut être mise en place de façon à quantifier la fissuration due au séchage et donc au retrait différentiel entre les différents constituants à l'échelle mesoscopique (matrice cimentaire ou mortier et granulats). Absents dans une approche macroscopique homogénéisée, ces phénomènes de fissuration autour puis entre les granulats peuvent être quantifiés expérimentalement — par exemple au travers d'une technique de corrélation d'images — et numériquement, et comparés aussi bien sur la base des champs de déplacements obtenus que concernant les faciès et les ouvertures de fissures. Afin de rendre cette comparaison plus aisée, une démarche s'appuyant sur des matériaux modèles soumis à un séchage dans un environnement contrôlé a été mise en place dans [Lagier et al., 2010] et les outils numériques présentés dans ce document ont servi pour les simulations. Les figures 4.2 présentent cette comparaison sur la base des faciès de fissuration obtenus. Il apparaît clairement que la représentation explicite des inclusions rigides permet de prédire les zones d'apparition et de propagation des fissures.

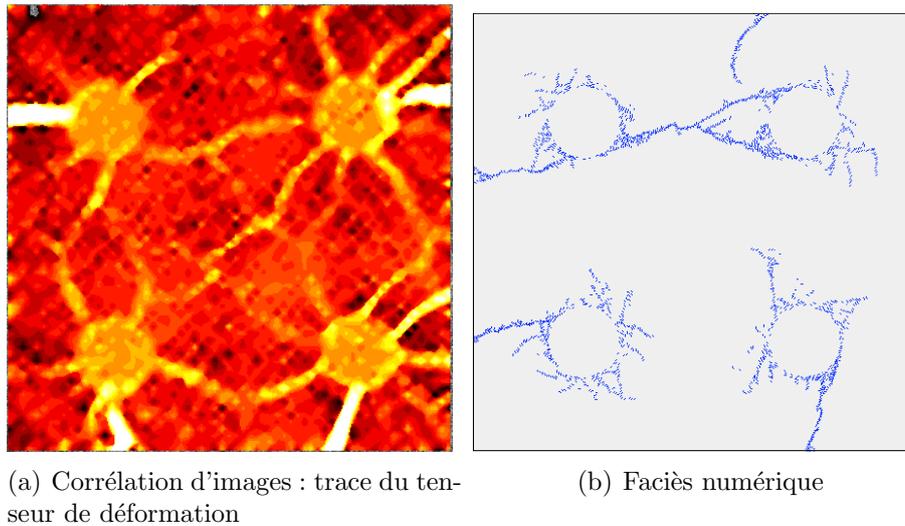


FIGURE 4.2 – Comparaison des faciès de fissuration obtenus par séchage de matériaux modèles, d'après [Lagier et al., 2010]

Enfin, toujours en lien avec les analyses multi-échelles séquencées basées sur le modèle de comportement mécanique à l'échelle mesoscopique, on peut citer la modélisation des conséquences de la Réaction Sulfatique Interne sur les bétons. Ces travaux sont effectués dans le cadre de la thèse de Mohamad Al Shaama, en collaboration avec l'IRSN et le LCPC. Sur la base d'un essai standardisé autour des bétons, l'objectif est ici de prédire numériquement la fissuration observée expérimentalement à l'échelle macroscopique et de prévoir les caractéristiques macroscopiques résiduelles. Ces travaux ont de plus permis de confirmer le mode de dégradation local envisagé, à savoir le gonflement, à l'échelle fine, de la matrice cimentaire. Ainsi une analogie avec un couplage thermo-mécanique faible peut être faite. La représentation explicite des granulats au travers des maillages non adaptés (Fig.4.3a) permet de modéliser l'expansion du mortier seul et les conséquences de cette variation de volume en présence de granulats, c'est-à-dire d'inclusions plus rigides que la matrice. La figure 4.3b montre les évolutions de ces gonflements dans le cas d'un comportement linéaire et avec prise en compte de la fissuration dans la matrice.

En accord avec les constatations expérimentales, les faciès de fissuration (Fig.4.4) obtenus montrent une rupture aux interfaces se prolongeant dans le mortier. La POC trouve ici un intérêt particulier dans le cadre de l'évaluation du module résiduel au cours du gonflement. Il est en effet aisé d'instantier, après chaque pas de calcul mécanique, un nouveau composant EF et de lui transférer l'ensemble des informations correspondant à son état de dégradation mécanique (déplacements en chaque nœud et variables internes en chaque point d'intégration). L'application d'une sollicitation de traction simple à partir de cet état « initial » conduit à une évaluation simple du module résiduel. Cette évaluation peut se mener, grâce aux fonctionnalités offertes

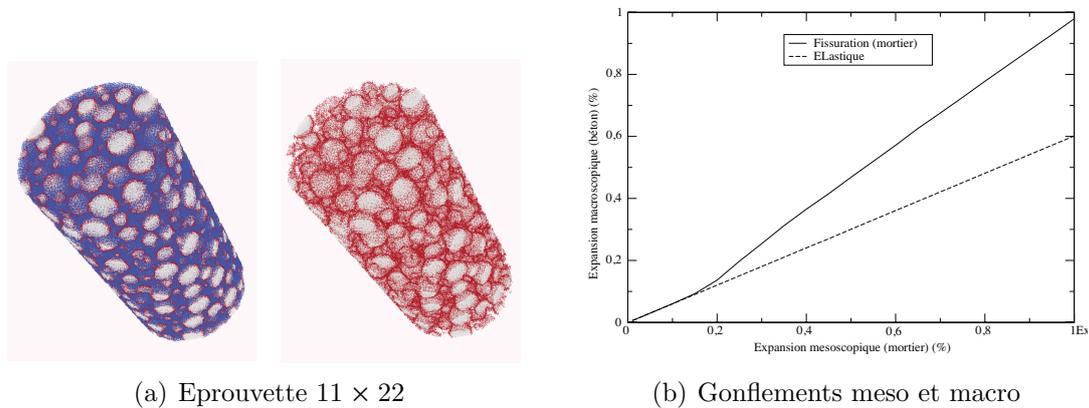


FIGURE 4.3 – Couplage faible pour la Réaction Sulfatique Interne

par le middleware CTL, de manière asynchrone, de sorte que le temps de calcul total n'est pas affecté.

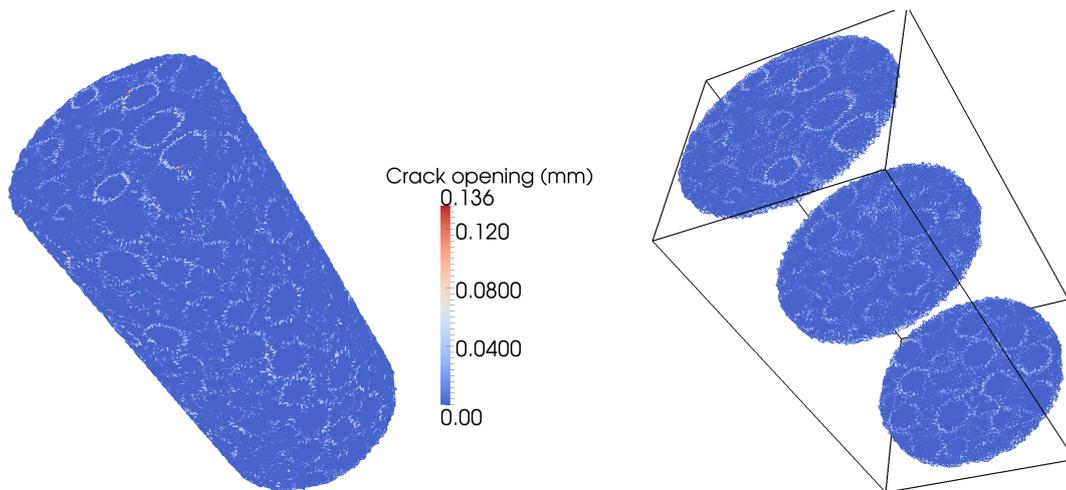


FIGURE 4.4 – Réaction Sulfatique Interne : faciès de fissuration

La figure 4.5 montre l'évolution de ce module en fonction du gonflement observé à l'échelle macroscopique. La diminution relative finale est proche de 50% ce qui correspond aux observations expérimentales effectuées par mesure ultra-sonore.

4.4 Exemples de couplages « forts »

Les problèmes de couplage fort sont ceux qui profitent le plus du cadre mis en place par la POC. Le chapitre 2 a mis en avant un cas important pour nos

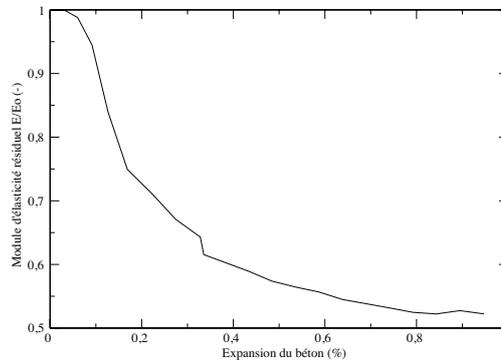


FIGURE 4.5 – Réaction Sulfatique Interne : module d'élasticité résiduel

travaux, au travers d'une méthode de calcul multi-échelles intégrée. Nous présentons ici deux autres situations d'importance en Génie Civil. D'une part, les problèmes d'interaction fluide–structure et, d'autre part, les transferts de masse dans un milieu fissuré.

4.4.1 Problèmes d'interaction fluide–structure

L'application de la POC aux simulations numériques de problèmes d'interaction fluide–structure a fait l'objet de la thèse de Christophe Kassiotis [Kassiotis, 2009]. Ce contexte informatique permet ici de réunir deux problèmes physiques qui, bien que pouvant être décrits avec un ensemble d'équations similaires, sont traditionnellement résolus au travers de méthodes numériques différentes. Dans cet esprit nous ne nous intéressons pas ici à chacun de ces sous-problèmes pris indépendamment mais bien au couplage spécifique induit par ces problèmes d'interaction.

Ce couplage fort trouve de nombreuses applications dans la prévision du comportement de structures — la thèse de Christophe Kassiotis a pour contexte la simulation de la phase d'inondation accompagnant l'arrivée d'un tsunami sur une côte — mais également dans la modélisation des matériaux cimentaires. Nous pensons ainsi que la modélisation du comportement macroscopique de ces matériaux a beaucoup à gagner au travers de la prise en compte explicite, à l'échelle fine, des écoulements dans son réseau poreux.

Les différentes méthodes numériques employées — Eléments Finis pour la mécanique du solide et Volumes Finis pour la mécanique des fluides — ont naturellement conduit à l'écriture et à l'utilisation de codes de calcul différents. La POC trouve donc, pour la mise en œuvre de ce couplage fort, un attrait important et correspondant à la volonté d'employer des logiciels existants — pour lesquels les performances sont établies — mais différents. Une architecture basée sur quatre composants est

donc mise en place :

- Un composant simulateur « Eléments Finis » pour la résolution du sous-problème lié au domaine solide. Celui-ci est constitué du composant `coFeap` dont les principes ont été présentés précédemment 4.2 ;
- Un composant simulateur « Volumes Finis » pour la résolution du sous-problème lié au domaine solide. Celui-ci est basé sur le code OpenFOAM et l'interface `simu.ci` ;
- Un composant permettant les transferts de champs entre les deux maillages ;
- Un composant dont le rôle est la résolution du couplage et l'intégration en temps du problème ;

Cette architecture a permis de valider plusieurs algorithmes de couplage ainsi que la résolution, distribuée, de problèmes de taille importante (voir [Kassiotis, 2009]). L'adaptation de ces algorithmes à des comportements de structures adoucissantes est encore à faire. Elle devrait conduire à des simulations sur la base du modèle, à l'échelle mesoscopique, présenté dans le premier chapitre de ce manuscrit.

4.4.2 Transferts dans les milieux fissurés

Les transferts de masse occupent une place importante dans la prédiction du comportement des matériaux cimentaires et de nombreuses problématiques, comme l'évaluation du niveau d'étanchéité d'une enceinte nucléaire ou la prévision du comportement à très long terme des alvéoles de stockage profond des déchets nucléaires, sont liées à ces aspects. Pour un matériau « sain » — c'est-à-dire en l'absence de fissure à l'échelle macroscopique — ces transferts prennent place dans les différentes porosités du matériau ou dans des fissures de dimensions très réduites, généralement créées au jeune âge. Ceci justifie pleinement l'utilisation de modèles de transferts macroscopiques homogénéisés, tels que ceux issus de la théorie des milieux poreux, et basés sur des propriétés de transfert effectives, le plus souvent isotropes. Ces grandeurs macroscopiques ont l'avantage de pouvoir être identifiées expérimentalement et les modèles conduisent à de bonnes prédictions pour des matériaux sains.

En présence de dégradations mécaniques, il est en revanche assez difficile de relier les grandeurs caractérisant numériquement la fissuration à l'évolution des propriétés de transfert homogénéisées. D'un côté, les modèles de fissuration répartie ne fournissent pas de grandeur directement exploitable pour évaluer le transfert au travers d'une fissure, par nature discret. Dans le cas d'un modèle d'endommagement isotrope il est ainsi difficile de relier le champ d'endommagement obtenu à un ensemble de fissures et aux ouvertures associées à chacune d'elles (voir [Matallah et al., 2010] pour des travaux récents sur ce sujet). De plus le caractère isotrope de ces modèles ne permet pas, par définition, de prédire l'orientation d'un écoulement au sein de ces fissures.

Cette problématique, liée à l'orientation et donc à l'anisotropie des transferts, se retrouve également du côté des modèles de transport macroscopiques. Ceux-ci n'ont, en effet, la possibilité de rendre compte d'un écoulement orienté qu'au travers de la

définition d'un tenseur de perméabilité macroscopique anisotrope. L'identification expérimentale de ces composantes est alors délicate et suppose la mise en place d'essais pour lesquels les directions de fissuration — ainsi que les ouvertures — sont contrôlées [Choinska et al., 2007].

Cette problématique du couplage fort entre fissuration et transfert est donc très dépendante des choix de modélisation faits pour chacun des sous-problèmes. Dans ce contexte, une approche par l'introduction de discontinuités fortes telle que celle présentée dans la première partie de ce document est d'un intérêt majeur car elle répond, de manière naturelle, à deux des difficultés mentionnées ci-dessus. Elle permet d'une part de quantifier les ouvertures de fissure — celles-ci font partie des inconnues du problème — et de déterminer leurs orientations respectives. D'autre part, l'approche mesoscopique, à la base d'une grande partie des travaux synthétisés ici, conduit à la possibilité de modéliser également les transferts à une échelle fine, au travers de lois issues de cas simples en mécanique des fluides. Ainsi, à l'échelle fine, nous considérons chaque fissure comme étant le siège d'un écoulement de Poiseuille entre deux plans espacés d'une distance égale à l'ouverture de fissure.

En se basant sur ces idées, nous avons développé une formulation numérique adaptée à un problème de transfert tri-dimensionnel, en présence de fissures discrètes. Elle se base sur le concept de double porosité, pour laquelle l'écoulement se produit dans des espaces dont les échelles sont très différentes.

Concrètement, elle consiste à résoudre un problème linéaire issu d'une formulation de type Eléments Finis de l'équation de conservation de la masse. La perméabilité du matériau, à l'échelle mesoscopique, est constituée de deux termes,

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_{iso} + \mathbf{k}_{ani} \quad (4.1)$$

où \mathbf{k}_{iso} est le tenseur correspondant aux transferts dans le matériau sain, c'est-à-dire dans les différentes porosités du matériau. Ce tenseur est supposé isotrope et s'exprime sous la forme,

$$\mathbf{k}_{iso} = \frac{k_{intr}}{\mu} \mathbf{1} \quad (4.2)$$

où k_{intr} est la perméabilité intrinsèque — de l'ordre de 10^{-17} m^2 — et μ la viscosité du fluide.

La partie anisotrope \mathbf{k}_{ani} de \mathbf{k} correspond quant à elle à la fissuration. La figure 4.6 montre un élément tétraédrique à la base de six éléments du treillis spatial formé pour le calcul mécanique. Chaque arête de ce tétraèdre est donc potentiellement enrichie par une discontinuité forte modélisant une fissure à l'échelle fine. En supposant la présence d'un écoulement dans le plan de cette fissure, il est ainsi possible de définir un tenseur de perméabilité dans le repère local de chaque arête sous la forme :

$$\mathbf{k}_{loc}^{nm} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_{nm} & 0 \\ 0 & 0 & k_{nm} \end{bmatrix}_{(e_I, e_{II}, e_{III})} \quad (4.3)$$

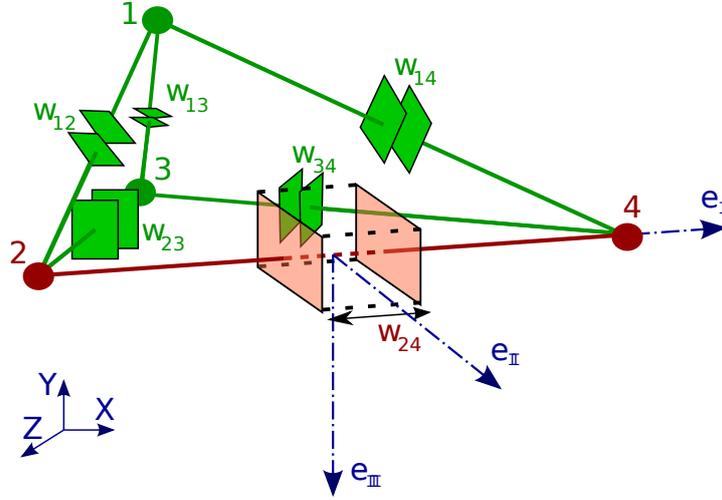


FIGURE 4.6 – Tétraèdre sous-jacent au treillis spatial et schématisation de la fissuration potentielle sur chaque arête

Dans (4.3) nous supposons que k^{nm} peut être estimé sur la base d'un écoulement de Poiseuille ([Poiseuille, 1840]) entre deux plans espacés de l'ouverture de fissure w :

$$k_{nm} = \frac{w^3}{12 \cdot \mu \cdot L} [m^2 \cdot Pa^{-1} \cdot s^{-1} = m^3 \cdot s \cdot kg^{-1}] \quad (4.4)$$

Par changements de base et assemblage au sens Eléments Finis, nous obtenons ainsi une matrice de perméabilité globale symétrique mais anisotrope. Il est notable que cette matrice permet de rendre compte des deux échelles de transferts ainsi que de l'orientation et de la connectivité des fissures à l'échelle fine.

Les applications directes de ce type de formulation sont liées au calcul de débits au travers de structures fissurées ainsi qu'au couplage hydro-mécanique fort. Des travaux sont en cours sur ces sujets dans le cadre de la thèse de Xavier Jourdain. En parallèle, et dans l'esprit des méthodes multi-échelles séquencées, cette formulation conduit également à la possibilité d'identifier un tenseur de perméabilité macroscopique défini sous la forme,

$$\mathbf{Q}_M = -\mathbf{K}_M \cdot \mathbf{G}_M \quad (4.5)$$

où \mathbf{Q}_M et \mathbf{G}_M sont le débit et le gradient de pression macroscopiques :

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_M &= \frac{1}{V_M} \int_{\Omega} \mathbf{q}(\mathbf{x}) \, d\Omega \\ \mathbf{G}_M &= \frac{1}{V_M} \int_{\Omega} \mathbf{grad}(p(\mathbf{x})) \, d\Omega \end{aligned} \quad (4.6)$$

En choisissant, pour un cube de côté L , des conditions aux limites homogènes au contour sous la forme,

$$p(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + p_0 \quad (4.7)$$

le gradient de pression macroscopique est $\mathbf{G}_M = \mathbf{A}$ où \mathbf{A} est un vecteur constant. Afin d'identifier les neuf composantes du tenseur macroscopique \mathbf{K}_M , le vecteur \mathbf{A} est choisi unitaire, successivement dans les trois directions de l'espace (Fig.4.7). La résolution des trois problèmes indépendants ainsi définis permet le calcul des débits macroscopiques \mathbf{Q}_M . Ceux-ci peuvent être estimés à partir des débits mesoscopiques au contour du problème sous la forme,

$$\mathbf{Q}_M = \frac{1}{V_M} \int_{\partial\Omega} \mathbf{x}(\mathbf{q}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}) d\Omega \quad (4.8)$$

où \mathbf{n} est la normale unitaire sortante au contour.

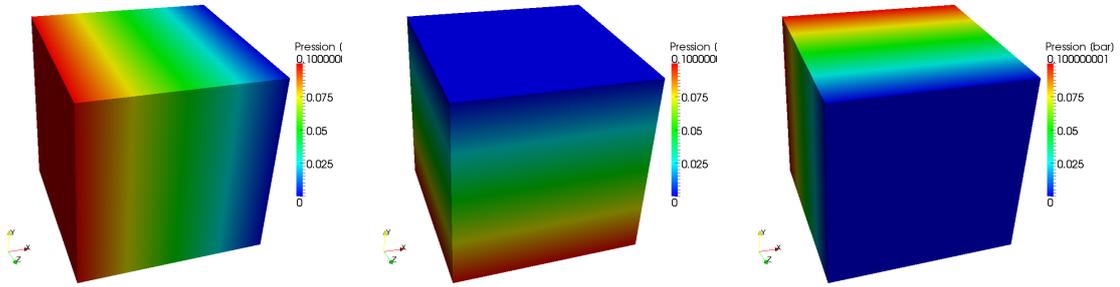


FIGURE 4.7 – Identification d'un tenseur de perméabilité macroscopique : application de conditions aux limites homogènes au contour

Cette méthode séquentielle permet la validation du modèle de transfert au travers de simulations sur des fissures macroscopiques « parfaites ». Celles-ci sont ici définies par deux plans (dans le plan Y-Z) d'espacement constant, projetés sur l'échelle mesoscopique (Fig.4.8a). En faisant varier l'ouverture de cette fissure modèle nous comparons la perméabilité théorique dans le plan de la fissure — composée de la perméabilité intrinsèque et du transfert de type Poiseuille dans la fissure — à la réponse du modèle. La figure 4.8b montre une parfaite adéquation entre ces deux résultats. De plus le tenseur de perméabilité macroscopique correspondant à une ouverture importante — 1 mm soit 1/100 de la taille du cube — est :

$$\mathbf{K}_M^{(w=10^0 \text{ mm})} = \begin{bmatrix} 3,5681 \cdot 10^6 & 3,1303 \cdot 10^4 & 2,7277 \cdot 10^4 \\ 3,1295 \cdot 10^4 & 1,1096 \cdot 10^8 & 1,1717 \cdot 10^4 \\ 2,7281 \cdot 10^4 & 1,1715 \cdot 10^4 & 7,5800 \cdot 10^7 \end{bmatrix} \cdot 10^{-17} m^2 \quad (4.9)$$

Ce tenseur peut être considéré comme étant symétrique et la prédominance de l'écoulement au travers de la fissure apparaît clairement (la perméabilité intrinsèque est ici de $10^{-17} m^2$) dans les termes diagonaux correspondants au plan de la fissure. De plus, les termes non diagonaux permettent de rendre compte des couplages entre le gradient de pression et l'écoulement résultant dans des directions orthogonales. Bien que ces termes soient de plusieurs ordres de grandeur inférieurs aux composantes diagonales, ils ne sont pas négligeables devant la perméabilité intrinsèque du matériau sain.

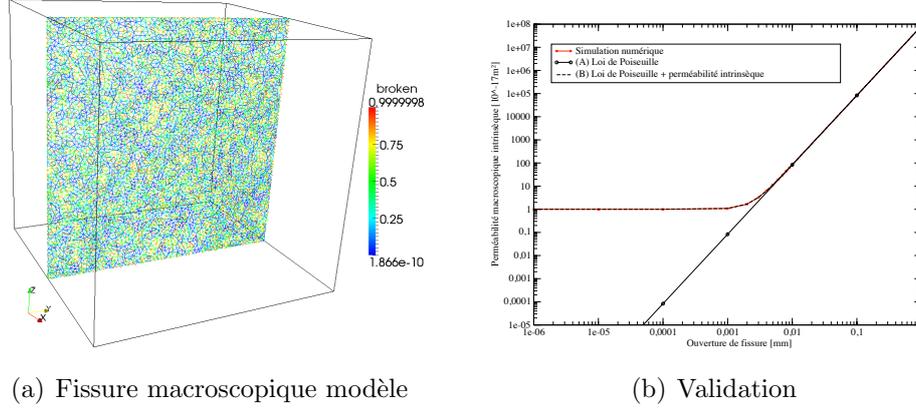


FIGURE 4.8 – Validation du modèle de transfert en milieu fissuré

La mise en œuvre de cette démarche séquentielle à deux échelles permet, pour une sollicitation macroscopique quelconque, d'évaluer l'évolution du tenseur de perméabilité macroscopique. Dans le cas de la traction simple, la figure 4.9a montre le faciès de fissuration obtenu par un déplacement imposé dans la direction X. La figure 4.9b représente quant à elle les évolutions des trois composantes diagonales du tenseur de perméabilité macroscopique en fonction de ce déplacement imposé. Ces composantes restent approximativement constantes et de l'ordre de la perméabilité du matériau sain jusqu'au pic. Bien qu'il apparaissent pendant cette phase de nombreuses fissures à l'échelle fine, celles-ci ne sont que très peu connectées entre elles et le nouveau réseau poreux ainsi créé n'est pas percolé. En conséquence les transferts dans les porosités initiales du matériau sont toujours dominants. La coalescence de ces fissures à l'échelle fine conduit brusquement à la formation d'une macro-fissure (Fig.4.9a). Sur le plan mécanique cette apparition correspond au passage du pic mais également à la percolation de ce nouveau réseau de transfert. En conséquence la perméabilité se trouve fortement augmentée. Finalement la poursuite de la simulation conduit à l'ouverture progressive de la fissure macroscopique, entraînant à la hausse les composantes du tenseur de perméabilité. Ces résultats sont également visibles à partir des composantes du tenseur \mathbf{K}_M obtenues pour différentes valeurs du déplacement imposé :

$$\mathbf{K}_M^{(u=0.002mm)} = \begin{bmatrix} 1,00000 & 0,00000 & 0,00000 \\ 0,00000 & 1,00000 & 0,00000 \\ 0,00000 & 0,00000 & 1,00000 \end{bmatrix} \cdot 10^{-17} m^2 \quad (4.10)$$

$$\mathbf{K}_M^{(u=0.012mm)} = \begin{bmatrix} 1,00239 & 0,00000 & 0,00000 \\ 0,00000 & 1,00245 & 0,00000 \\ 0,00000 & 0,00000 & 1,00029 \end{bmatrix} \cdot 10^{-17} m^2 \quad (4.11)$$

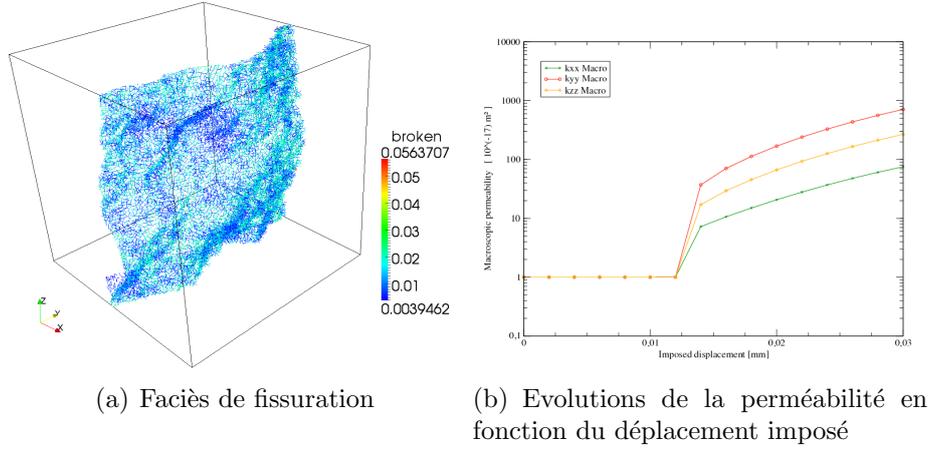


FIGURE 4.9 – Approche séquentielle pour l’estimation d’un tenseur de perméabilité macroscopique : cas d’une sollicitation de traction simple

$$\mathbf{K}_M^{(u=0.014mm)} = \begin{bmatrix} 7,22658 & 0,00489 & 1,72678 \\ 0,00483 & 37,117 & 1,69414 \\ 1,62682 & 1,69414 & 17,0611 \end{bmatrix} \cdot 10^{-17} m^2 \quad (4.12)$$

La fissure macroscopique étant approximativement comprise dans un plan normale X , les directions principales de perméabilité coïncident avec les axes du cube et les composantes diagonales de ces tenseurs dominant. Certains termes non diagonaux de (4.12) montrent que l’apparition de cette fissure peut induire des flux croisés comparables à ceux observés dans le matériau sain.

Ce modèle de transfert, développé dans le cadre de la thèse de Xavier Jourdain, apparaît donc comme étant un outil performant de prédiction des transferts de masse sur la base du modèle mécanique à l’échelle mesoscopique. C’est bien entendu la description de la fissuration à l’échelle fine au travers de discontinuités fortes qui constitue le point clé dans ces développements. La mise en œuvre de cet outil dans le cadre d’une méthode multi-échelle séquentielle nous apparaît ainsi prometteuse pour la détermination de tenseurs de perméabilité macroscopique et l’identification du lien entre des modèles macroscopiques de comportement mécanique et hydrique. Néanmoins, les limites liées aux écoulements de Poiseuille sont claires et la quantification de la rugosité des surfaces fissurées ainsi que de son impact sur l’écoulement apparaissent comme des étapes incontournables dans la suite de ce travail. Une campagne expérimentale, basée sur une technique optique d’acquisition de ces surfaces, est actuellement en cours de préparation. Celle-ci devra permettre de quantifier et de modéliser la rugosité à une échelle fine — par exemple sous la forme de champs aléatoires — ainsi que de conduire des simulations d’écoulements, basés sur les travaux issus de la thèse de Christophe Kassiotis §4.4.1. Ces simulations permettront d’identifier un coefficient de rugosité à appliquer à la relation de Poiseuille (4.4). Le

schéma séquencé peut alors être vu au travers de trois échelles :

- une échelle « micro » à laquelle correspondent les simulations de l'écoulement entre deux plans rugueux. Celles-ci conduisent à identifier un coefficient de rugosité mesoscopique ;
- l'échelle mesoscopique à laquelle la simulation hydro-mécanique est menée.
- l'échelle macroscopique à laquelle le tenseur de perméabilité, du matériau fissuré, est établi.

L'application de ce modèle de transfert aux calculs de débits de fuite est également envisageable bien que limitée à des éléments de taille réduite en raison de l'échelle choisie pour la modélisation mécanique. Ainsi plusieurs études comparatives sont et seront mises en œuvre dans le but de comparer des essais de perméabilité sur des bétons fissurés.

4.5 Conclusions et perspectives autour de la POC

Bien qu'au premier abord de nature abstraite, la Programmation Orientée Composant est un aspect prépondérant des travaux synthétisés dans ce document. Elle a en effet conduit à nombre d'avancées concrètes dans la mise en œuvre pratique des développements théoriques et permis la pérennisation de la plupart des outils informatiques qui en résultent. De plus, la simplicité d'utilisation du middleware CTL, développé par Rainer Niekamp dans l'équipe du Pr. Matthies, permet à des non spécialistes d'être rapidement opérationnels avec ces outils. Cet aspect est, de notre point de vue, un enjeu important, lié à la complexité croissante des technologies informatiques et donc à la nécessaire acquisition de connaissances en un temps limité.

Comme nous l'avons montré, le middleware CTL conduit à la mise en œuvre aisée de la communication entre les briques logicielles que sont les composants. Cette communication est affranchie des questions liées aux langages de programmation et donc aux typages des données. Cet aspect est une caractéristique majeure de CTL et en fait la pierre angulaire de la plupart de nos architectures logicielles. Il est ainsi possible de résoudre des problèmes couplés en assurant une indépendance complète des logiciels utilisés pour chaque sous-problème ainsi que des discrétisations spatiale et temporelle. Cette indépendance est, de notre point de vue, rendue nécessaire par la tendance croissante à utiliser des codes de calcul performants pour chaque sous-problème physique mais développés indépendamment et donc « incompatibles » au premier abord.

Ainsi, si les structures de Génie Civil constituent un terrain propice à l'établissement et à la résolution de problèmes multi-physiques, la compréhension et la modélisation des matériaux cimentaires ont également un grand intérêt à la mise en place d'architectures couplées robustes. Il nous apparaît ainsi essentiel que les couplages envisagés ici — en particulier les couplages forts — trouvent leur place au sein des approches multi-échelles intégrées. Ce point devrait permettre, à moyen

terme, de prendre explicitement en compte les phénomènes physiques attachés à des échelles plus fines.

Conclusions

Les travaux synthétisés dans ce document s'inscrivent dans une démarche de modélisation numérique des matériaux hétérogènes. En vue d'applications aux matériaux cimentaires, cette démarche numérique est, par essence, multi-échelles. L'objectif principal est, sur la base d'une échelle « fine » nommée mesoscopique, de sélectionner et de transférer les informations pertinentes relatives à la réponse macroscopique du matériau. Nous montrons ainsi comment la prise en compte explicite des hétérogénéités ouvre des perspectives importantes dans l'identification, la compréhension et la modélisation des phénomènes physiques à la base des comportements macroscopiques observés. Cette représentation permet en effet la prise en compte du comportement de chaque phase ainsi que des interfaces au travers de mécanismes simples.

En pratique, nos travaux de modélisation à l'échelle mesoscopique se sont appuyés sur un cadre homogène qui consiste en l'introduction d'enrichissements cinématiques au sein des modèles Eléments Finis. Ces enrichissements, dans leur version « faible », conduisent tout d'abord à la mise en œuvre de maillages non adaptés. En permettant la projection d'une morphologie sur un maillage quelconque et donc l'indépendance de ce dernier vis-à-vis des interfaces physiques, ces maillages non adaptés constituent un des points clé de notre travail, aussi bien pour le comportement mécanique que concernant les transferts thermique et hydrique. Dans leur version « forte », les enrichissements cinématiques permettent une modélisation cohérente et robuste de la fissuration. Une fissure est alors vue comme un saut dans le champ de déplacements dont l'amplitude correspond à l'ouverture. Cette ouverture progressive est directement contrôlée par l'énergie de fissuration. Les discontinuités fortes permettent de plus d'assurer l'objectivité du maillage vis-à-vis de la réponse macroscopique du matériau et constituent donc, de notre point de vue, une alternative essentielle aux modèles phénoménologiques à longueur interne.

Plusieurs illustrations pratiques nous ont donc permis de mettre en avant les capacités prédictives, pour les matériaux cimentaires, d'une association entre approche mesoscopique et méthodes d'analyse multi-échelles séquencées. De notre point de vue, cette méthodologie présente un potentiel important, relatif à ce qu'il convient d'appeler aujourd'hui le « virtual testing ». L'identification de modèles phénoménologiques au travers de ce type d'approches constitue clairement une voie promet-

teuse, notamment pour simuler des comportements multi-physiques de structures. Suivant un autre point de vue, la mise en œuvre relativement aisée des schémas multi-échelles séquencées incite à leur utilisation dans une démarche plus large, de compréhension et d'identification des mécanismes à l'origine des phénomènes observés macroscopiquement. On peut ici penser au fluage des bétons qui actuellement, bien que correctement modélisé à l'échelle du VER, ne conduit toujours pas à un consensus quant à son origine physique. Nos travaux ont également porté sur la Réaction Sulfatique Interne, pour laquelle la précipitation différée d'ettringite est à l'origine d'un gonflement. Comprendre si cette précipitation — et donc le gonflement résultant — prend place dans la pâte de ciment ou au niveau des interfaces est un autre exemple d'apport des méthodes numériques multi-échelles.

Au delà des approches séquencées, le transfert d'informations peut également être établi de l'échelle macroscopique vers l'échelle mesoscopique, mettant ainsi en place un couplage fort. Ce dialogue permanent entre les échelles permet d'assurer la représentativité des trajets de chargement vus par les composants de l'échelle mesoscopique. Il est donc mieux adapté aux sollicitations macroscopiques complexes pour lesquelles ces trajets sont potentiellement non proportionnels. Ces méthodes intégrées conduisent à la mise en place d'une formulation et d'une architecture logicielle dédiées. Celles développées au sein de notre démarche s'appuient sur les Multiplificateurs de Lagrange Localisés et permettent une distribution et une répartition de l'effort numérique global au travers d'une décomposition de domaine. Bien que complexes à mettre en œuvre, ces approches permettent d'envisager, à moyen terme, la prise en compte d'échelles plus fines associées aux matériaux cimentaires. Parmi les différentes voies possibles pour mettre en place un nombre de niveaux plus importants et donc atteindre des échelles plus petites, les méthodes multi-grilles nous semblent particulièrement prometteuses. De plus, au delà du cadre d'une modélisation du comportement mécanique, la simulation multi-physiques à plusieurs niveaux intégrée nous semble être une étape importante dans la modélisation des matériaux cimentaires. Ici se pose bien entendu le problème de l'association entre, d'une part le couplage des échelles et, d'autre part, celui dû aux différents phénomènes physiques à modéliser. Ce « couplage de couplages » conduit à des questions encore extrêmement ouvertes et dont une partie de l'avenir de la modélisation numérique en Génie Civil dépend.

Finalement, le dernier axe de travail que nous avons souhaité mettre en avant est relatif à l'ensemble des variabilités mises en jeu autour des matériaux cimentaires. Elles sont principalement liées, à l'échelle de la structure et donc des modèles macroscopiques, aux process et aux conditions de mise en œuvre de ces matériaux et conduisent à des variabilités spatiales à assez grande portée. A l'échelle mesoscopique, les variabilités trouvent leur origine dans le caractère hétérogène des matériaux considérés, principalement au travers de la distribution spatiale des phases. Cet aspect morphologique est encore peu exploité dans notre démarche même si nous

avons d'ores-et-déjà pu dégager une piste intéressante relative à l'emploi de champs aléatoires seuillés. De plus, il est à noter que les variabilités issues de l'échelle mesoscopique peuvent aussi avoir des conséquences importantes sur les modèles macroscopiques employés à une échelle trop faible. Basés sur la notion de VER, et donc par nature homogénéisés, les paramètres de ces modèles doivent néanmoins être affectés d'une variabilité, à courte portée, lorsqu'il sont utilisés avec des maillages insuffisamment grossiers et donc, *a priori*, sur des structures de « faibles » dimensions. Dans tous les cas, et pour toutes les sources de variabilité citées ci-dessus, la mise en données probabilistes est une étape cruciale. L'emploi de champs aléatoires corrélés fait ainsi partie intégrante de notre démarche et de nombreuses perspectives, associées à leur identification, permettent d'imaginer des liens entre la conception d'essais, le traitement des données ainsi collectées et la modélisation numérique.

Bibliographie

- Adler, R. and Taylor, J. (2007). *Random fields and geometry*. Springer. [78](#), [81](#)
- Adler, R. J. (1981). *The Geometry of Random Fields*. John Wiley and Sons, Wiley series in probability and mathematical statistics. [52](#), [59](#), [62](#)
- Archie, G. E. (1942). The Electrical Resistivity Log as an Aid in Determining Some Reservoir Characteristics. *Petroleum Technology*, 5 :54–62. [66](#)
- Barenblatt, G. I. (1962). Mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture. *J. of Applied Mechanics and Technical Physics*, 4 :55–129. [13](#)
- Ben Dhia, H. (1998). Multiscale mechanical problems : the Arlequin method. *Comptes rendus de l'académie des sciences, série IIb*, 326 :899–904. [38](#), [40](#)
- Benboudjema, F., Meftah, F., and Torrenti, J.-M. (2005). Interaction between drying, shrinkage, creep and cracking phenomena in concrete. *Engineering Structures*, 27(2) :239–250. [92](#)
- Benkemoun, N. (2010). PhD thesis, École Normale Supérieure de Cachan. en préparation. [6](#), [10](#), [18](#), [21](#), [22](#), [23](#), [25](#), [28](#), [29](#), [30](#), [31](#), [32](#), [33](#), [35](#), [54](#)
- Benkemoun, N., Hautefeuille, M., Colliat, J.-B., and Ibrahimbegovic, A. (2009). Modeling heterogenous materials failure : 3D meso-scale models with embedded discontinuities. *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, submitted. [28](#)
- Bensoussan, A., Lions, J. L., and Papanicolaou, G. (1978). *Asymptotic analysis for periodic structures*. North-Holland, Amsterdam. [23](#)
- Bernardi, C., Maday, Y., and Patera, A. T. (1994). *A new non conforming approach to domain decomposition : the Mortar Element Method*. Non-linear Partial differential equations and their applications. Pitman, London. [39](#)
- Berveiller, M. and Zaoui, A. (1979). An extension of the self-consistent scheme to plasticity-flowing polycrystals. *Journal of the mechanics and physics of solids*, 26 :325–344. [23](#)
- Bornert, M., Breteau, T., and Gilormini, P. (2001). *Homogénéisation en mécanique des matériaux – I*. Mécanique et Ingénierie des matériaux. Lavoisier – Hermes Science, Paris. [23](#), [39](#)
- Brancherie, D. and Ibrahimbegovic, A. (2009). Novel isotropic continuum-discrete damage model capable of representing localized failure of massive structures. *Engineering Computation*, 26 :under press. [24](#)

- Breiman, L., Friedman, J. H., Olshen, R. A., and Stone, C. J. (1984). *Classification and regression trees*. Wadsworth, Belmont. 72
- Brezzi, F. and Marini, L. D. (1994). A three-field domain decomposition method. In Quarteroni, A., Periaux, J., Kuznetsov, Y. A., and Widlund, O. B., editors, *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering*, pages 27–34, Providence, USA. AMS. 38
- Bruggeman, D. A. (1935). Calculation of various physical constants of heterogeneous substances. *Annalen der Physik (in German)*, 24 :636–679. 66
- Buil, M., Revertégat, E., and Oliver, J. (1992). *A Model of the Attack of Pure Water or Undersaturated Lime Solutions on Cement*, volume 2nd, pages 227–241. American Society for Testing and Materials, Philadelphia. 66
- Caffisch, C. A. (1998). Monte carlo and quasi-monte carlo methods. *Acta Numerica*, 7 :1–49. 53
- Champaney, L., Cognard, J.-Y., Duresseix, D., and Ladevèze, P. (1997). Large scale applications on parallel computers of mixed domain decomposition. *Computational Mechanics*, 19 :253–263. 38
- Choinska, M., Khelidj, A., Chatzigeorgiou, G., and Pijaudier-Cabot, G. (2007). Effects and interactions of temperature and stress-level related damage on permeability of concrete. *Cement and Concrete Research*, 37(1) :79 – 88. 97
- Cohen, A. and d’Ales, J.-P. (1997). Nonlinear approximation of random functions. *SIAM Journal of Applied Mathematics*, 57(2) :518–540. 62
- Dahlquist, G. and Björck, A. (1974). *Numerical Methods*,. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J. 31
- de Larrard, T. (2010). *Variabilité des propriétés du béton : caractérisation expérimentale et modélisation probabiliste de la lixiviation*. PhD thesis, Ecole Normale Supérieure de Cachan. 7, 54, 59, 60, 62, 65, 67, 70, 71, 72, 73, 74
- Delaplace, A. and Ibrahimbegovic, A. (2006). Performance of time-stepping schemes for discrete models in fracture dynamic analysis. *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 65 :1527–1544. 20, 27
- Delhumeau, G. (1999). *L’invention du béton armé — F. Hennebique 1890-1914*. Éditions du Linteau. 5
- Elishakoff, I. (1999). *Whys and Hows in Uncertainty Modelling – Probability, Fuzziness, and Anti-Optimization*. Springer-Verlag, Berlin. 57
- Farhat, C., Lesoinne, M., Le Tallec, P., Pierson, K., and Rixen, D. (2001). FETI-DP : a dual – primal unified FETI method – partI : A faster alternative to the two-level FETI method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50 :1523–1544. 38
- Farhat, C. and Roux, F.-X. (1991). A method of finite tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 32 :1205–1227. 38

- Felippa, C. A. (1989). Parametrized multifield variational principles in elasticity : II. hybrid functionals and the free formulation. *Communication in applied numerical methods*, 5 :89–98. 40
- Feyel, F. and Chaboche, J.-L. (2000). FE² multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 183 :309–330. 39, 40
- Feyel, F. and Chaboche, J.-L. (2001). Multi-scale non-linear FE² analysis of composite structures : damage and fiber size effects. *Revue européenne des Éléments Finis : NUMDAM'00 issue*, 10 :449–472. 6, 38
- Fraeijs de Veubeke, B. M. (1980). Matrix structural analysis : lecture notes for the international research seminar of the theory and application of finite element methods. Calgary, Alberta, Canada, July–August 1973. B. M. Fraeijs de Veubeke memorial volume of selected papers, Alphen aan den Rijn – the Netherlands. Sijthoff & Noordhoff. 42
- Freudenthal, A. M. (1968). *Statistical Approach to Brittle Fracture*. Academic Press, New York (USA). 29
- Frey, P. J. and George, P.-L. (1999). *Maillages, applications aux éléments finis*. Lavoisier – Hermes Science, Paris. 20
- Gel'fand, I. and Vilenkin, Y. (1964). *Generalized Functions—Volume 4 : Applications of harmonic analysis*. Academic Press, New York, NY. 59
- Geuzaine, C. and Remacle, J.-F. (2001–2010). Gmsh home page. <http://www.geuz.org/gmsh>. 10
- Ghanem, R. and Spanos, P. (1991). *Stochastic Finite Elements – A Spectral Approach*. Springer-Verlag, Berlin. 55
- Grgin, E. and Sandri, G. (1996). The quantum oscillator in phase space, part i. *FIZIKA B*, 5. 56
- Gropp, W., Lusk, E., and Skjellum, A. (1994). *Using MPI : Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface*. MIT Press. 87
- Hackbusch, W. and Khoromskij, B. N. (2000). A sparse h -matrix arithmetic : general complexity estimates. *J. Comput. Appl. Math.*, 125(1-2). 63
- Hackbusch, W. (1985). *Multi-Grid methods and application*. Springer, Berlin. 48
- Hashin, Z. and Shtrikman, S. (1963). A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the mechanics and physics of solids*, 11 :127–140. 23
- Hautefeuille, M. (2009). *Numerical Modeling Strategy for Heterogenous Materials : A FE Multi-scale and Component-based Approach*. PhD thesis, Université Technologique de Compiègne – Technische Universität Braunschweig. 6, 17, 21, 39, 40, 43, 44, 45, 46, 47, 48

- Hautefeuille, M., Melnyk, S., Colliat, J.-B., and Ibrahimbegovic, A. (2009). Failure model of heterogeneous structures using structured meshes and accounting for probability aspects. *Engineering Computation*, 26 :under press. 11
- Heinfling, G., Reynouard, J.-M., Merabet, O., and Duval, C. (1997). A thermo-elastic-plastic model for concrete at elevated temperature including cracking and thermo-mechanical interaction strain. 5th Compas. 92
- Hertz, J., Krogh, A., and Palmer, R. (1991). *An Introduction to the Theory of Neural Computation*. Springer Verlag, Addison Wesley. 67
- Hillerborg, A. (1991). Application of the fictitious crack model to different types of materials. *International Journal of Fracture*, 51 :95–102. 24
- Hughes, T. J. R. and Taylor, R. L. (1978). Unconditionally stable algorithms for quasi-static elasto-viscoplastic finite element analysis. *Computers and Structures*, 8 :169–175. 39
- Ibrahimbegovic, A., Chorfi, L., and Gharzeddine, F. (2001). Thermomechanical coupling at finite elastic strain : covariant formulation and numerical implementation. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 17 :275–289. 92
- Ibrahimbegović, A. and Wilson, E. L. (1991). A modified method of incompatible modes. *Communication in applied numerical methods*, 7 :187–194. 13, 15
- Jaynes, E. T. (2003). *Probability theory : the logic of a science*. Cambridge University Press, Cambridge. 57
- Jhikov, V. V., Kozlov, S. M., and Oleinik, O. A. (1994). *Homogenization of Differential Operators and Integral Functionals*. Springer, Berlin. 23
- Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., and Jeulin, D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40 :3647–3679. 38
- Kantardzic, M. (2003). *Data Mining : Concepts, Models, Methods, and Algorithms*. John Wiley Sons. 84
- Kassiotis, C. (2009). *Nonlinear Fluid-Structure Interaction : a Partitioned Approach and its Application through Component Technology*. PhD thesis, École Normale Supérieure de Cachan. 96, 97
- Kassiotis, C., Colliat, J.-B., Ibrahimbegovic, A., and Matthies, H. (2009). Multiscale in time and stability analysis of operator split solution procedure applied to thermomechanical problems. *Engineering Computations*, 26(1/2) :205–223. 92, 93
- Kassiotis, C. and Hautefeuille, M. (2008). *coFeap's Manual*. http://www.lmt.ens-cachan.fr/cofeap/files/cofeap_manual.pdf. 90
- Keese, A. (2004). *Numerical Solution of Systems with Stochastic Uncertainties, A General Purpose Framework for Stochastic Finite Elements*. PhD thesis, TU Braunschweig. 57

- Khoromskij, B. N., Litvinenko, A., and Matthies, H. (2009). Application of hierarchical matrices for computing the karhunen–loève expansion. *Computing*, 84(1-2). 63
- Kohl, J. A. and Bernholdt, D. E. (2002). CCA home page. <http://www.csm.ornl.gov/cca/>. 87
- Kouznetsova, V., Brekelmans, W. A. M., and Baaijens, F. P. T. (2001). An approach to micro-macro modeling of heterogeneous materials. *Computational Mechanics*, 27 :37–48. 39
- Kréé, P. and Soize, C. (1986). *Mathematics of Random Phenomena*. D. Reidel, Dordrecht. 58
- Kuipers, L. and Niederreiter, H. (2005). *Uniform distribution of sequences*. Dover Publications. 53
- Kun, F. and Herrman, H. J. (1996). A study of fragmentation processes using a discrete element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 138 :3–18. 20
- Lagier, F., Jourdain, X., De Sa, C., Benboudjema, F., and Colliat, J.-B. (2010). Drying cracks due to aggregate restraint : experimental and numerical analyses on controlled cementitious materials. *Submitted to Eng. Structures*. 93, 94
- Lanczos, C. (1995). An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 45 :255–282. 63
- Lawlor, O. S. and Zheng, G. (1999). Charm++ home page. <http://charm.cs.uiuc.edu/research/charm/>. 87
- Le Tallec, P. (1994). *Domain Decomposition Methods in Computational Mechanics*, volume 1 of *Computational Mechanics Advances*, pages 123–217. North Holland. 38
- Loève, M. (1977). *Probability Theory, Vols. I and II*. Springer-Verlag, Berlin. 52
- Mac Ilroy, M. D. (1968). Mass produced software components. NATO Software engineering conference – Garmish, Germany. 86
- Mainguy, M., Tognazzi, C., Torrenti, J. M., and Adenot, F. (2000). Modelling of leaching in pure cement paste and mortar. *Cement and Concrete Research*, 30 :83–90. 66
- Malliavin, P. (1997). *Stochastic Analysis*. Springer-Verlag, Berlin. 55
- Mandel, J. (1993). Balancing domain decomposition. *Communication in applied numerical methods*, 9 :233–241. 38
- Matallah, M., La Borderie, C., and Maurel, O. (2010). A practical method to estimate crack openings in concrete structures. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*. 97
- Matheron, G. (1975). *Random sets and integral geometry*. Wiley, New-York. 38

- Matthies, H. (2008). Stochastic finite elements : Computational approaches to stochastic partial differential equations. *Z. Angew. Math. Mech.*, 88 (11) :849–873. [52](#)
- Matthies, H. G., Niekamp, R., and Steindorf, J. (2006a). Algorithms for strong coupling procedure. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 195 :2028–2049. [17](#)
- Matthies, H. G., Niekamp, R., and Steindorf, J. (2006b). Algorithms for strong coupling procedures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195(17-18) :2028 – 2049. [92](#)
- Matthies, H. G. and Strang, G. (1979). Solution of non-linear finite-element equations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 14 :1613–1626. [31](#)
- Mazars, J. (1984). *Application de la mécanique de l'endommagement au comportement non linéaire et à la rupture du béton de structure*. PhD thesis, ENS Cachan. [72](#)
- McKay, M. D., Conover, W. J., and Beckman, R. J. (1979). A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. *Technometrics*, 21 :239–245. [67](#)
- Melnyk, S. (2006). *Modélisation du comportement inélastique non-linéaire des matériaux hétérogènes : Apport des maillages structurés*. PhD thesis, Ecole Normale Supérieure de Cachan. [6](#), [10](#), [11](#)
- Mindlin, R. D. and Eshel, N. N. (1968). On first strain-gradient theories in linear elasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 4 :109–124. [24](#)
- Moës, N., Cloirec, M., Cartraud, P., and Remacle, J.-F. (2003). A computational approach to handle complex microstructure geometries. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192 :3163–3177. [13](#)
- Moës, N., Dolbow, J., and Belytshko, T. (1999). A finite element method for crack growth without remeshing. *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 46 :131–150. [13](#), [24](#)
- Natke, H. and Ben-Haim, Y. (1997). *Uncertainty : Models and Measures*. Akademie-Verlag, Berlin. [57](#)
- Nguyen, V. H., Nedjar, B., Colina, H., and Torrenti, J. M. (2006). A separation of scales homogenisation analysis for the modelling of calcium leaching in concrete. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, (195) :7196–7210. [66](#)
- Niekamp, R. (1995). CTL home page. <http://www.wire.tu-bs.de/forschung/projekte/ctl/>. [87](#)
- Niekamp, R. (2005). *CTL Manual for Linux/Unix for the usage with C++*. Institut für Wissenschaftliches Rechnen – TU Braunschweig. <http://www.wire.tu-bs.de/forschung/projekte/ctl/files/manual.pdf>. [88](#), [89](#)

- Okun, B. L. (1990). Euler characteristic in percolation theory. *Journal of Statistical Physics*, 59(1/2). 79
- Oliver, J., Huespe, P.-J., and Sánchez, P.-J. (2006). A comparative study on finite elements for capturing strong discontinuities : E-fem vs x-fem. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195 :4732–4752. 18
- Orenstein, D. (2000). Quickstudy : Application Programming Interface (API). <http://www.computerworld.com>. 87
- Papoulis, A. (1984). *Probability, Random Variables, and Stochastic Processes*. McGraw-Hill, New York, NY. 58
- Parizeau, M. (2004). *Réseaux de neurones. Polycopiés de cours : Université Laval*. Canada. 68, 69, 70
- Park, K. C. and Felippa, C. A. (2000). A variational principle for the formulations of partitioned structural systems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 47 :395–418. 40
- Park, K. C., Felippa, C. A., and Gumaste, U. A. (2000). A localized version of the method of lagrange multipliers and its applications. *Computational Mechanics*, 24 :476–490. 6
- Park, K. C., Justino, Jr, M. R., and Felippa, C. A. (1997). An algebraically partitioned FETI method for parallel structural analysis : algorithm description. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 40 :2717–2737. 38, 42
- Perlot, C. (2005). *Influence de la décalcification des matériaux cimentaires sur les propriétés de transferts : application au stockage profond des déchets nucléaires*. PhD thesis, Universités de Toulouse et de Sherbrooke. 64
- Pijaudier-Cabot, G. and Bažant, Z. P. (1987). Nonlocal damage theory. *Journal of Engineering Mechanics (ASCE)*, 113 :1512–1533. 24
- Poiseuille, J.-L.-M. (1840). Recherches expérimentales sur le mouvement des fluides dans les tubes de très petits diamètres. 98
- Poyet, S. and Torrenti, J. M. (2010). Caractérisation de la variabilité des performances des bétons. application à la durabilité des structures (groupe de travail APPLET). In *Annales du BTP (sous presse)*. 75
- Rateau, G. (2003). *Méthodes Arlequin pour les problèmes mécaniques multi-échelles – Application à des problèmes de jonction et de fissuration de structures élan-cées*. PhD thesis, École centrale de Paris. 38
- Reed, M. and Simon, B. (1975). *Methods of modern mathematical physics II : Fourier Analysis and Self-Adjointness*. Academic Press, New York, NY. 60
- Roberts, A. P. and Garboczi, E. J. (1999). *J. Mech. Phys. Solids*, 47(10) :2029–2055. 77
- Rodgers, J. L. and Nicewander, W. A. (1988). Thirteen ways to look at the correlation coefficient. *The American Statistician*, 42(1) :59–66. 67, 72

- Roubin, E. (2010). Modélisation morphologique de matériaux hétérogènes par seuillage de champs aléatoires : application aux matériaux à matrice cimentaire. Mémoire de Master 2, Ecole Normale Supérieure de Cachan. 62, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82
- Sanchez-Palencia, E. (1980). *Non Homogeneous Media and Vibration Theory*. Lecture Notes in Physics. Springer, Berlin. 22
- Schwarz, H. A. (1869). Über einige Abbildungsaufgaben. *Gesammelte Mathematische Abhandlungen*, 11 :65–83. 38
- Schöberl, J. (2003–2010). Netgen mesher. 10
- Sellier, A. (2006). Modélisations numériques pour la durabilité des ouvrages de génie civil. HDR, Université Paul Sabatier, Toulouse, (in french). 66
- Serra, J. (1982). *Image analysis and mathematical morphology*. Academic Press, London. 75, 77
- Shinozuka, M. and Deodatis, G. (1997). Simulation of stochastic processes and fields. *Prob. Engrg. Mech.*, 14 :203–207. 58
- Simo, J. C. and Hughes, T. J. R. (1997). *Computational Inelasticity*. Interdisciplinary Applied Mathematics. Springer Verlag, New York, Berlin, Heidelberg. 17
- Simo, J. C., Oliver, J., and Armero, F. (1993). An analysis of strong discontinuities induced by strain-softening in rate independent inelastic solids. *Computational Mechanics*, 12 :277–296. 13
- Simo, J. C. and Rifai, M. (1990). A class of mixed assumed strain methods and the method of incompatible modes. *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 29 :1595–1638. 14
- Smolyak, S. (1963). Quadrature and interpolation formulas for tensor products of certain classes of functions. *Sov. Math. Dokl.*, 4. 53
- Stoyan, D. (1995). *Fractals, Random Shapes and Point Fields*. Wiley, Chichester. 76
- Stroustrup, B. (1986). *The C++ Programming Language*. Addison-Wesley and ACM Press, Reading, Massachusetts. 90
- Szyperski, C. (1998). *Component Software – Beyond Object-Oriented Programming*. Addison-Wesley and ACM Press, Reading, Massachusetts. 43, 86
- Taylor, J. (2006). A gaussian kinematic formula. *Ann. Probab.*, 34 :122–158. 78
- Torquato, S. (2002). *Random Heterogeneous Materials : Microstructure and Macroscopic Properties*. Springer–Verlag. 75, 76
- Torrenti, J.-M. (2010). *Annales du BTP*, page in press. 64
- Washizu, K. (1982). *Variational methods in elasticity and plasticity*. Pergamon Press, New York, 3 edition. 14

- Wells, G. N. and Sluys, L. J. (2000). Application of embedded discontinuities for softening solids. *Engineering Fracture Mechanics*, 65 :263–281. 24
- Wiener, N. (1938). The homogeneous chaos. *Amer. J. Math.*, 60 :897–936. 55
- Wilson, E. L. (1974). The static condensation algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 8 :198–203. 15
- Zienkiewicz, O. C. and Taylor, R. L. (2001a). *The Finite Element Method, Solid Mechanics*, volume 2. Butterworth Heinemann, Oxford, 5 edition. 13
- Zienkiewicz, O. C. and Taylor, R. L. (2001b). *The Finite Element Method, The Basis*, volume 1. Butterworth Heinemann, Oxford, 5 edition. 43, 89

