CSMA 2022
15ème Colloque National en Calcul des Structures
16-20 Mai 2022, Presqu'île de Giens (Var)

L'apport des ondelettes spatiales pour la modélisation multi-échelles des milieux continus

S. Mokhtari[1], P. Argoul[1]

[1] *MAST/EMGCU, Université Gustave Eiffel, 77454 Marne-la-Vallée, France, {samy.mokhtari,pierre.argoul}@univ-eiffel.fr*

Résumé —
La modélisation des milieux matériels doit permettre de prendre en compte les différentes échelles spatiales mises en jeu. Pour cela, des processus de remontée d'échelles sont classiquement utilisés pour transférer l'information depuis une échelle fine (microscopique) vers une échelle plus "grossière" (mesoscopique ou supérieure). Face aux limitations des techniques de remontée d'échelles par moyennage spatial, la transformée en ondelettes continue est mise en avant, avec des apports concernant le traitement des conditions aux limites, des relations de fermeture et des non-linéarités.
Mots clés — milieu continu, modélisation multi-échelles, ondelettes spatiales.

1 Introduction

Observée à très petite échelle (nanoscopique), la matière est discrète, granulaire, constituée d'atomes et molécules. Pourtant, en prenant du recul et en changeant d'échelle d'observation, un milieu matériel peut apparaître continu, au sens où ses propriétés semblent varier continûment dans l'espace. Une telle description continue (et même différentiable) en espace ouvre la voie à des lois de conservation écrites sous forme intégrale ou différentielle. Pour construire des champs continûment différentiables en espace, l'approximation des milieux continus repose sur une hypothèse de stricte séparation d'échelles, entre d'une part l'échelle caractéristique de la modélisation l_{mod} (i.e. la plus faible longueur d'onde capturée par les champs décrivant le milieu matériel), et d'autre part l'échelle spatiale d'observation l_{obs}. Sous cette hypothèse $l_{mod} \ll l_{obs}$, les processus classiques de remontée d'échelles se basent sur des moyennages (ou des procédés équivalents) sur des volumes de contrôle, parfois appelés Volumes Elémentaires Représentatifs, afin de construire des variables définies à une échelle de plus en plus "grossière". Ces variables, en réalité constantes par morceaux sur la géométrie du milieu, apparaissent néanmoins continues et différentiables du point de vue de l'échelle spatiale d'observation l_{obs}. Cependant, remonter ainsi les échelles de modélisation par moyennages successifs tend à réduire l'écart entre l_{mod} et l_{obs}. Dès lors, nous pouvons nous interroger sur l'existence d'une échelle d'observation limite l^*_{obs} (ou de modélisation limite l^*_{mod}) en-dessous (respectivement au-dessus) de laquelle il n'est plus possible de considérer des variables ainsi construites comme différentiables. Or, l'identification d'une telle grandeur limite peut être complexe dans le cas d'un milieu possédant une large gamme d'échelles spatiales intermédiaires entre l'échelle mesoscopique (des systèmes thermodynamiques) et l'échelle d'observation, sans séparation claire. Par ailleurs, les processus classiques de remontée d'échelles font face à d'autres problématiques majeures, notamment liées aux conditions aux limites, aux relations de fermeture micro-macro, et au traitement des non-linéarités.

Afin de répondre à ces multiples problématiques, il convient de proposer une méthodologie de remontée d'échelles à même de construire des variables rigoureusement continues et différentiables en espace, et ce quel que soit l'écart entre l'échelle spatiale caractéristique de la modélisation l_{mod} et l'échelle spatiale d'observation l_{obs}. Cette nouvelle méthodologie se doit également de répondre aux défis des conditions aux limites, des relations de fermeture et des non-linéarités. Le présent article se propose de montrer en quoi la transformée en ondelettes continue (en espace) permet de répondre à ces enjeux multiples. Pour y parvenir, la section 2 rappellera tout d'abord les bases de l'approximation des milieux continus. La section 3 présentera par la suite le processus de remontée d'échelles par ondelettes spatiales, au cœur de cet article. La section 4 discutera des avancées et limitations de cette nouvelle méthodologie, avant une conclusion générale en section 5.

2 Approximation des milieux continus et remontée d'échelles : rappels

Afin de rappeler les procesus classiques de remontée d'échelles, considérons un système $S = \bigcup_{i=1}^{N} \{M_i\}$ composé d'un agrégat de N "particules" M_i distinctes, ne pouvant pénétrer les unes dans les autres. Ces particules peuvent aussi bien être les atomes/ions/molécules d'un système thermodynamique (solide ou fluide) observé à l'oeil nu ou via un maillage dans une simulation, ou bien les planètes et étoiles d'une galaxie par exemple. Ainsi, dans le présent article, nous considèrerons donc que :

- l_{obs} désigne l'échelle caractéristique d'observation du sysème S, qui peut aller d'une cellule élémentaire d'un maillage, jusqu'à par exemple la taille caractéristique d'une galaxie, en passant par une observation à l'oeil nu ;
- l_{mod} désigne l'échelle (ou longueur d'onde) caractéristique de la modélisation : nous distinguerons au niveau zéro l'échelle "microcopique" l_{micro} (ex : libre parcours moyen des particules dans un solide ou fluide, ou des planètes dans une galaxie), puis l'échelle "mesoscopique" l_{meso} (avec $l_{micro} \ll l_{meso} \ll l_{obs}$), et par la suite les échelles spatiales intermédiaires $l \in \;]l_{meso}, l_{obs}]$.

Sous l'hypothèse de séparation d'échelles $l_{mod} \ll l_{obs}$, l'approximation des milieux continus permet de décrire le milieu S avec des champs perçus comme continus et différentiables en espace. A titre d'exemple, la répartition de la masse dans le système S peut être décrite par un champ ρ satisfaisant :

$$\int_{\Omega} \rho \; \mathrm{d}\mu = \sum_{i=1}^{N} m_i, \tag{1}$$

où Ω est un ouvert borné délimitant le système S, μ désigne la mesure de Lebesgue, et m_i la masse de chaque particule. Sous réserve d'une régularité suffisante des champs décrivant le système S, il est possible d'écrire des lois de conservation sous forme intégrale ou différentielle, comme illustré par l'équation de conservation de la masse ci-dessous :

$$\forall \, \underline{x} \in \Omega, V(\underline{x}) \subset \Omega, \; \iiint_{V(\underline{x})} \frac{\partial \rho}{\partial t}(\underline{r}, t) \, \mathrm{d}V + \oiint_{S(\underline{x})} \underline{j}(\underline{r}, t) \cdot \underline{\underline{\mathrm{d}S}} = 0, \tag{2}$$

$$\text{ou : } \frac{\partial \rho}{\partial t}(\underline{r}, t) + div\left(\underline{j}\right)(\underline{r}, t) = 0, \tag{3}$$

où $\underline{j}$ représente le vecteur densité de courant. L'équivalence entre les formes globale (2) et locale (3) de l'équation de conservation est assurée dès lors que les hypothèses du théorème de Green-Ostrogradski sont vérifiées, à savoir notamment le caractère continûment différentiable en espace du vecteur densité de courant $\underline{j}$. Il est à noter que la capacité à écrire les lois de conservation en formulation forte, à l'instar de l'équation (3), est un pré-requis indispensable à l'écriture de toute formulation variationnelle.

Comme évoqué en introduction, les variables "approximativement" continues et différentiables qui interviennent dans des lois de conservation du type (3) sont classiquement construites par moyennages sur des volumes de contrôle, ou Volumes Elementaires Représentatifs. La taille de ces volumes peut être associée à différentes échelles spatiales de modélisation :

$\boxed{1}$ *modélisation à l'échelle "microscopique" l_{micro} (niveau zéro)*

Le domaine Ω est vu comme la réunion disjointe de boules ouvertes $B_o(M_i, \varepsilon_i)$ (voir Figure 1) contenant une seule et unique particule : $\Omega = \bigcup_{i=1}^{N} B_o(M_i, \varepsilon_i)$.

Nous pouvons dès lors définir sur Ω un champ de densité ρ_{micro}, en procédant par moyennage volumique sur chacune des boules ouvertes $B_o(M_i, \varepsilon_i)$:

$$\rho_{micro} = \sum_{i=1}^{N} \frac{m_i}{\mu\left(B_o(M_i, \varepsilon_i)\right)} \chi_{B_o(M_i, \varepsilon_i)}, \tag{4}$$

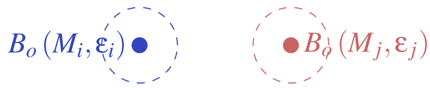

FIGURE 1 – Schéma de 2 particules M_i / M_j

où χ désigne la fonction indicatrice, et $\mu(B_o(M_i, \varepsilon_i))$ la mesure de Lebesgue (i.e. le volume) de chaque boule ouverte. Pour un système thermodynamique (solide ou fluide) en condition standard, $l_{micro} \sim 10^{-10}$ m à 10^{-7} m.

$\boxed{2}$ *modélisation remontée à l'échelle "mesoscopique" l_{meso} :*

Le domaine Ω est vu comme la réunion disjointe de volumes mésoscopiques $\mathrm{d}\tau_i$: $\Omega = \bigcup_{i=1}^{p} \mathrm{d}\tau_i$. Le champ mesoscopique ρ_{meso} est alors défini sur Ω là encore par moyennage sur chaque volume mesoscopique :

$$\rho_{meso} = \sum_{i=1}^{p} \frac{m(\mathrm{d}\tau_i)}{\mu(\mathrm{d}\tau_i)} \chi_{\mathrm{d}\tau_i}. \tag{5}$$

Il est à noter que moyenne statistique et moyenne volumique sur $\mathrm{d}\tau_i$ sont équivalentes (à de faibles fluctuations près) grâce au nombre important de particules contenues dans le volume mesoscopique $\mathrm{d}\tau_i$.

$\boxed{3}$ *modélisation remontée à des échelles supérieures $l \in \,]l_{meso}, \ldots, l_{obs}]$:*

Cette démarche de remontée d'échelles se poursuit fréquemment au-délà de l'échelle mesoscopique. On la retrouve en effet (avec quelques variantes) notamment dans :

- l'homogénéisation (analytique) des matériaux hétérogènes (voir notamment [1, 2, 3] et [5, 6, 7, 8, 9]) : on retrouve du moyennage volumique, ou bien du développement asymptotique pour le cas des matériaux périodiques (la composante d'ordre 0 d'un tel développement étant équivalente au moyennage volumique).
- la Simulation des Grandes Échelles [10] ou la méthode Variationnelle Multi-Échelles [11] pour les écoulements turbulents : on remonte alors les échelles soit par produit de convolution (avec une fenêtre de filtrage généralement de type porte, soit l'équivalent d'un moyennage volumique), soit par décomposition vectorielle entre des espaces comportant respectivement les composantes basses-fréquences et hautes-fréquences. Bien souvent, le produit de convolution n'est pas explicitement calculé, et l'on suppose que la discrétisation spatiale des équations assure un filtrage "implicite" des longueurs d'ondes.
- les écoulements diphasiques [12] ou les approches milieux poreux pour l'interaction fluide-solide [13] : du moyennage volumique est à nouveau utilisé.

Les processus de remontée d'échelles par moyennage sur des volumes de contrôle ou V.E.R. font face à de multiples limitations intrinsèques :

- les variables construites par remontée d'échelles sont fondamentalement constantes par morceaux. Dès lors, plus l'échelle de modélisation l_{mod} se rapprochera de l'échelle d'observation l_{obs}, moins il sera possible de considérer les variables comme continûment différentiables en espace. Il sera dès lors impossible d'écrire des lois de conservation sous forme intégrale ou différentielle.
- des variables moyennées en espace sont par essense insensibles aux hautes-fréquences. Cela pose donc la question de la capacité des processus de remontée d'échelles à traiter les effets de bords et conditions aux limites. La remontée d'échelles par développement asymptotique est également confrontée à la problématique des conditions aux bords. En effet, l'hypothèse de périodicité indispensable à cette approche n'est plus valide à proximité des bords du domaine.
- cette problématique des conditions aux limites rend nécessaire l'introduction d'une relation de fermeture permettant de connecter les petites échelles spatiales (présentes notamment près des

interfaces/bords) aux plus grandes. Le plus souvent, cette relation de fermeture est empirique ou nécessite des hypothèses restrictives (ex : modèle de turbulence, tenseur de localisation...).

- les processus de remontée d'échelles (que ce soit par moyennage spatial ou développement asymptotique) sont également confrontés à la problématique des non-linéarités. Face à l'obstacle analytique que ces dernières représentent, il est d'usage, dans la communauté des matériaux hétérogènes, de se tourner vers des techniques d'homogénéisation numérique [15, 16, 17]. Ces approches supposent cependant que les mêmes équations de conservation sont applicables pour le problème "fin" et le problème "grossier". Nous verrons cependant dans la section suivante que cela n'est pas le cas.

Afin de répondre à ces multiples problématiques, nous proposons en section 3 un processus de remontée d'échelles fondée sur la transformée en ondelettes continue (en espace).

3 Un processus de remontée d'échelles fondé sur les ondelettes spatiales

Avant de détailler le processus de remontée d'échelles au cœur de ce travail, rappelons tout d'abord la définition de la transformée en ondelettes continue (isotrope) dans $\mathbb{R}^d$, où $d \in \{2,3\}$.

Definition 3.0.1 *Transformée en ondelettes continue isotrope [18, 19]*

Soit $\Psi \in L^1\left(\mathbb{R}^d\right) \cap L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$ une fonction à valeurs réelles ou complexes, et de moyenne nulle. Une telle fonction Ψ est appelée ondelette mère. Si celle-ci est isotrope, la transformée en ondelettes continue (isotrope) d'un signal $f \in L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$ est définie, avec une formulation en énergie, comme suit :

$$\forall a > 0,\ \underline{u} \in \mathbb{R}^d,\ \mathcal{W}[f]\,(a,\underline{u}) = \frac{1}{\sqrt{a}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \Psi\left(\frac{\underline{x}-\underline{u}}{a}\right)^* f(\underline{x})\,\mathrm{d}\underline{x}. \tag{6}$$

Avec les notations $\widetilde{\Psi}(\underline{x}) = \Psi(-\underline{x})$ et $\Psi_a(\underline{x}) = \frac{1}{\sqrt{a}^d}\Psi\left(\frac{x}{a}\right)$, la définition (6) se ré-écrit :

$$\forall a > 0,\ \underline{u} \in \mathbb{R}^d,\ \underline{k} \in \mathbb{R}^d,\ \left\{ \begin{array}{ccc} \mathcal{W}[f]\,(a,\underline{u}) & = & \left(f * \widetilde{\Psi}_a^*\right)(\underline{u}), \\ \mathcal{F}\left[\mathcal{W}[f](a,\cdot)\right](\underline{k}) & = & \mathcal{F}\left[f\right](\underline{k}) \times \sqrt{a}^d\, \mathcal{F}\left[\Psi\right](a\underline{k})^*, \end{array} \right. \tag{7}$$

où $\mathcal{F}[f](\underline{k}) = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^d} f(\underline{x}) e^{-i\underline{k}\cdot\underline{x}}\,\mathrm{d}\underline{x}$ désigne la transformée de Fourier. Il est à noter que la définition (7) peut être étendue à l'espace des distributions tempérées $S'\left(\mathbb{R}^d\right)$ (dual de l'espace de Schwartz $S\left(\mathbb{R}^d\right)$) :

$$\begin{aligned} \forall f \in S'\left(\mathbb{R}^d\right),\ g \in S\left(\mathbb{R}^d\right),\ \left\langle \mathcal{F}\left[\mathcal{W}[f](a,\cdot)\right],\, g\right\rangle_{S',S} &= \left\langle \mathcal{W}[f](a,\cdot),\, \mathcal{F}[g]\right\rangle_{S',S}, \\ &= \left\langle f,\, \mathcal{W}\left[\mathcal{F}[g]\right](a,\cdot)\right\rangle_{S',S}, \end{aligned} \tag{8}$$

où la dernière égalité découle du caractère isotrope de l'ondelette Ψ.

Compte tenu des contraintes imposées sur l'ondelette mère (moyenne nulle, énergie finie), celle-ci possède un support bien localisé dans le domaine spatial et le domaine fréquentiel. Cette localisation nous permettra de préserver le sens local des nouvelles variables construites par remontée d'échelles.

3.1 Lois de conservation et remontée d'échelles par ondelettes spatiales

Afin d'illustrer le processus de remontée d'échelles par ondelettes, et ses possibilités d'application, considérons un domaine Ω muni d'une description "approximativement" continue à l'échelle l_{meso} (une modélisation à l'échelle l_{micro} serait toute aussi acceptable). Le domaine Ω peut être un agrégat hétérogène de différents milieux continus, avec pour chacun des lois de conservations écrites sur leur propre sous-domaine Ω_i (on se focalise ici sur la conservation de la masse et de la quantité de mouvement) :

$$\left\{\begin{array}{rcll} \partial_t \rho_i + div\left(\rho_i \underline{v_i}\right) & = & 0 & \text{in } \Omega_i(t), \\ \partial_t\left(\rho_i \underline{v_i}\right) + \underline{div}\left(\rho_i \underline{v_i} \otimes \underline{v_i}\right) & = & \underline{div}\left(\underline{\underline{\sigma_i}}\right) & \text{in } \Omega_i(t), \end{array}\right. \tag{9}$$

avec ρ_i le champ de densité, $\underline{v_i}$ le champ Eulérien des vitesses et $\underline{\underline{\sigma_i}}$ le tenseur des contraintes de Cauchy. On négligera ici tout effort de volume. Chacun des milieux continus i peut par ailleurs voir en son sein coexister de multiples échelles spatiales (ex : un écoulement interagissant avec un matériau poreux).

Le système d'équations (9) correspond à la forme conservative des lois de conservation. On suppose ici que $l_{meso} \ll l_{obs}$ afin que les équations ci-dessus soient valides. Le système (9) doit être complété par des conditions aux limites dynamiques et cinématiques, une loi de comportement ou équation d'état, ainsi que par une donnée initiale. Par souci de simplicité, on considère ici la coexistence de 2 milieux continus distincts, soit $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$. Chacun des 2 milieux peut éventuellement posséder une interface avec le domaine extérieur $\Omega_{ext} = \mathbb{R}^d \setminus \Omega$. Afin de remonter les variables et lois de conservation à une échelle supérieure $l \geq l_{meso}$, nous appliquons la transformée en ondelettes continue sur les équations (9). Pour cela, deux étapes sont nécessaires :

$\boxed{1}$ tout d'abord étendre les lois de conservations au sens des distributions sur $\mathbb{R}^d$;

$\boxed{2}$ puis appliquer la transformée en ondelettes continue sur les EDP étendues.

3.1.1 Extension des lois de conservation au sens des distributions sur $\mathbb{R}^d$, $d \in \{2,3\}$

Cette première étape est indispensable de par l'impossibilité de définir un produit de convolution sur un domaine borné, et par le caractère potentiellement non-régulier des solutions. Pour ce processus d'extension, on se limite ici à des solutions non-régulières de type C^1 par morceaux sur $\mathbb{R}^d$, et possédant un nombre fini de surfaces de discontinuité dans le plan $(t, \underline{x})$ (voir [14]). Ces discontinuités peuvent être propres à la Physique de chaque milieu (ex : ondes de chocs dans un fluide), ou bien causées par les interfaces et le processus d'extension. Le cadre des solutions C^1 par morceaux nous permet d'affirmer que la version étendue de chaque milieu continu devra satisfaire les lois de conservation (9) au sens fort dans chaque région de l'espace où les variables du milieu seront régulières (i.e. en dehors des interfaces et surfaces de discontinuités). Afin d'étendre les lois de conservation, il convient de partir de la définition de la formulation faible sur $\mathbb{R}^d$, comme illustré ci-dessous avec l'équation de conservation de la masse :

$$\forall \varphi \in D\left(\mathbb{R}^d \times]0,+\infty[\right),\ \langle \partial_t \rho_i + div\left(\rho_i \underline{v_i}\right), \varphi \rangle_{D',D} = -\int_0^{+\infty} \int_{\mathbb{R}^d} \left(\rho_i \partial_t \varphi + \rho_i \underline{v_i} \cdot \underline{\nabla}\, \varphi\right) \mathrm{d}\underline{x}\, \mathrm{d}t. \tag{10}$$

En décomposant (par relation de Chasles) l'intégrale sur $\mathbb{R}^d \times]0,+\infty[$ sur les sous-domaines $\widetilde{\Omega}_{ext}$, $\widetilde{\Omega}_i$ et $\widetilde{\Omega}_j$ (avec $\widetilde{\Omega} = \Omega \times]0,+\infty[$), en utilisant une formule de Green pour chacune des 3 intégrales, en exploitant le fait que les solutions sont C^1 par morceaux, ainsi que la continuitié de la composante normale du champ de vitesse à travers les interfaces, nous obtenons l'équation de conservation de la masse étendue sur $\mathbb{R}^d$ (où $\widetilde{s} = (s,t)$ et $\mathrm{d}\widetilde{s} = \mathrm{d}s\, \mathrm{d}t$) :

$$\begin{aligned} \left\langle \partial_t \rho_i + div\left(\rho_i \underline{v_i}\right), \varphi \right\rangle_{D',D} = & -\int_{\partial\widetilde{\Omega}_i \cap \partial\widetilde{\Omega}_j} [\rho_i]^i_j \left(\underline{v_j} \cdot \underline{n}_{i\to j}\right)(\underline{\widetilde{s}}) \varphi(\underline{\widetilde{s}})\, \mathrm{d}\underline{\widetilde{s}} \\ & -\int_{\partial\widetilde{\Omega}_i \setminus \partial\widetilde{\Omega}_j} [\rho_i]^i_{ext} \left(\underline{v_i}\right)_i (\underline{\widetilde{s}}) \cdot \underline{n}_{i\to ext}(\underline{\widetilde{s}}) \varphi(\underline{\widetilde{s}})\, \mathrm{d}\underline{\widetilde{s}} \\ & -\int_{\partial\widetilde{\Omega}_j \setminus \partial\widetilde{\Omega}_i} [\rho_i]^j_{ext} \left(\underline{v_i}\right)_j (\underline{\widetilde{s}}) \cdot \underline{n}_{j\to ext}(\underline{\widetilde{s}}) \varphi(\underline{\widetilde{s}})\, \mathrm{d}\underline{\widetilde{s}}, \end{aligned} \tag{11}$$

Il convient bien sûr d'introduire les vecteurs normaux $\widetilde{n} \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$ propres à chaque interface ou surface de discontinuité (une surface de discontinuité Σ peut se propager avec une célérité $c \neq 0$ à l'intérieur du milieu associé) : $\underline{\widetilde{n}}_{i\to ext} = \begin{pmatrix} 0 & \underline{n}_{i\to ext} \end{pmatrix}^T$, $\underline{\widetilde{n}}_{i\to j} = \begin{pmatrix} 0 & \underline{n}_{i\to j} \end{pmatrix}^T$ et $\underline{\widetilde{n}}_{\Sigma} = \begin{pmatrix} -c & \underline{\nu} \end{pmatrix}^T$. Le même procédé d'extension doit également être appliqué sur la loi de conservation de la quantité de mouvement, ainsi que sur la loi de comportement. Les intégrales de bords visibles dans le membre de droite de l'équation (11) traduisent ici les sauts de discontinuité $\left(\text{ex : } [\rho_i]^i_j = (\rho_i)_i - (\rho_i)_j\right)$ sur la densité du milieu étendu i aux passages des interfaces et parois.

3.1.2 Lois de conservation filtrées et régularisées par ondelettes spatiales

L'équation de conservation de la masse étant étendue sur $\mathbb{R}^d$, nous pouvons désormais appliquer la transformée en ondelettes continue sur l'équation (11). Pour cela, il suffit d'utiliser le résultat (8). En optant pour une ondelette mère Ψ (ou une fonction d'échelle, aussi appelée ondelette père) régulière (C^∞), nous obtenons une nouvelle loi de conservation de la masse, filtrée et régularisée, pour le milieu i étendu sur $\mathbb{R}^d$. Les variables d'état de cette nouvelle loi sont les coefficients en ondelettes des variables du milieu originel. Par ailleurs, grâce aux propriétés de régularisation du produit de convolution, la nouvelle loi de conservation peut être écrite en formulation forte : $\forall a > 0$, $\underline{u} \in \mathbb{R}^d$, $t > 0$,

$$
\begin{aligned}
&\partial_t \mathcal{W}[\rho_i](a,\underline{u},t) + div\left(\mathcal{W}\left[\rho_i \underline{v_i}\right]\right)(a,\underline{u},t) \\
&= -\int_{\partial\Omega_i \cap \partial\Omega_j} \widetilde{\Psi}^*_a(\underline{u}-\underline{s})\,[\rho_i]^i_j \left(\underline{v_j}\cdot\underline{n}_{i\to j}\right)(\underline{s},t)\,\mathrm{d}\underline{s} \\
&\quad -\int_{\partial\Omega_i \setminus \partial\Omega_j} \widetilde{\Psi}^*_a(\underline{u}-\underline{s})\,[\rho_i]^i_{ext} \left(\left(\underline{v_i}\right)_i\cdot\underline{n}_{i\to ext}\right)(\underline{s},t)\,\mathrm{d}\underline{s} \\
&\quad -\int_{\partial\Omega_j \setminus \partial\Omega_i} \widetilde{\Psi}^*_a(\underline{u}-\underline{s})\,[\rho_i]^j_{ext} \left(\left(\underline{v_i}\right)_j\cdot\underline{n}_{j\to ext}\right)(\underline{s},t)\,\mathrm{d}\underline{s}.
\end{aligned}
\tag{12}
$$

On procède de la même façon pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement et la loi de comportement.

L'équation (12) est ainsi la loi de conservation de la masse d'un milieu équivalent/homogénéisé i, défini sur tout l'espace $\mathbb{R}^d$, et dépourvu d'interfaces et de parois. Grâce au support spatial bien localisé des ondelettes, les coefficients en ondelettes $\left(\mathcal{W}[\rho_i](a,\cdot) \quad \mathcal{W}\left[\rho_i\underline{v_i}(a,\cdot)\right]\right)^T$ deviendront rapidement négligeables sur le domaine Ω_{ext} si les variables originelles du milieu sont étendues par des constantes sur Ω_{ext}. Ainsi, d'un point de vue numérique, il ne sera pas nécessaire de mailler tout l'espace $\mathbb{R}^d$ afin de traiter les conditions aux bords sur les parois extérieurs.

Par ailleurs, compte tenu des propriétés de filtrage de l'ondelette mère Ψ (équivalente à un filtre passe-bande), les coefficients en ondelettes $\left(\mathcal{W}[\rho_i](a,\cdot) \quad \mathcal{W}\left[\rho_i\underline{v_i}\right](a,\cdot)\right)^T$, solutions des nouvelles lois de conservation, ne capturent désormais qu'une certaine gamme de longueurs d'ondes, qui peut être contrôlée à souhait grâce au paramètre d'échelle a de l'ondelette. Ainsi, il est désormais possible, grâce à des lois de conservation similaires à (12), de remonter les échelles spatiales autant de fois que nécessaire, avec à disposition des variables rigoureusement continues et différentiables en espace, qui ne sont rien d'autre que les coefficients en ondelettes des variables "fines" du milieu continu originel.

4 Discussion

Le processus de remontée d'échelles par ondelettes spatiales ayant été présenté, cette section se propose d'en résumer les avancées et limitations.

4.1 Des variables rigoureusement continues et différentiables

L'utilisation d'un produit de convolution avec une ondelette Ψ (ou une fonction d'échelle) régulière permet d'aboutir à des variables rigoureusement continues et différentiables. Ainsi, quand bien même la taille du système ou le pas du maillage se rapprocherait de la longueur d'onde caractéristique de la modélisation, des lois de conservation telles que (12) resteraient pleinement valables.

4.2 Un traitement rigoureux des conditions aux limites

A la différence des méthodes de remontée d'échelles usuelles (quelle que soit la formulation mathématique utilisée), le processus basé sur la transformée en ondelettes continue permet de transformer des conditions aux limites surfaciques pour le milieu originel en termes volumiques pour le milieu équivalent (cf. intégrales de bords apparaissant dans les équations filtrées). La méthodologie proposée dans cet article permet ainsi de retrouver analytiquement le principe des méthodes de Frontières-Immergées utilisées notamment en interaction fluide-solide.

4.3 Une relation de fermeture analytique

Afin de traiter les termes volumiques restituant les conditions aux limites, il est indispensable d'avoir accès aux variables fines $\left(\rho_i \quad \rho_i \underline{v_i}\right)^T$. Or, les lois de conservations filtrées donnent uniquement accès aux variables filtrées $\left(\mathcal{W}[\rho_i](a,\cdot) \quad \mathcal{W}\left[\rho_i \underline{v_i}\right](a,\cdot)\right)^T$. Une relation de fermeture "micro-macro" est donc indispensable. La transformée en ondelettes continue offre justement une relation de fermeture analytique, grâce à une transformée en ondelettes inverse (voir expression (13) ci-dessous pour le cas 3D) permettant de reconstruire les variables fines à partir des variables filtrées :

$$\underline{\underline{\sigma_i}}(\underline{x},t) = \frac{4\pi}{C_\Psi} \int_0^{+\infty} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{W}\left[\underline{\underline{\sigma_i}}\right](a,\underline{u},t) \frac{1}{\sqrt{a}^3} \Psi\left(\frac{\underline{x}-\underline{u}}{a}\right) \mathrm{d}\underline{u} \right) \frac{\mathrm{d}a}{a^4}, \tag{13}$$

où $C_\Psi = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\mathcal{F}[\Psi](\underline{k})|^2}{\|\underline{k}\|^3} \mathrm{d}\underline{k}$ est appelée constante d'admissibilité de l'ondelette mère Ψ. En pratique, la relation de fermeture (13) est tronquée en limitant le nombre de coefficients en ondelettes calculés et utilisés pour reconstruire les variables fines. Il est également possible de travailler avec la fonction d'échelle (ondelette père) plutôt que l'ondelette mère, qui permet de construire des variables "grossières" par filtrage passe-bas (et non plus passe-bande). Ces variables basses-fréquences peuvent également être utilisées pour reconstruire approximativement les variables fines.

4.4 Un traitement analytique des non-linéarités

Bien que la transformée en ondelettes soit une transformation linéaire, elle offre, via sa formule de reconstruction (13), un outil analytique permettant de traiter explicitement les non-linéarités. En effet, il est possible de reconstruire, à chaque pas de temps, les différentes variables composant un terme non-linéaire, afin d'en déduire analytiquement la transformée en ondelettes (directe). Un tel traitement des non-linéarités implique bien évidemment un coût de calcul qui peut être significatif, et il convient donc de s'assurer que le surplus de précision obtenu sur la réponse du modèle vaut l'effort investi.

4.5 Convergence des variables filtrées et régularisées vers les variables fines

Le recours à la transformée en ondelettes continue permet de démontrer analytiquement une convergence (ponctuelle et en énergie) des variables filtrées et régularisées vers les variables fines, lorsque le nombre de coefficients en ondelettes $\mathcal{W}[f](a_k,\cdot)$ calculés augmente (ou lorsque la longueur d'onde de coupure λ_c de la fonction d'échelle diminue). Cette convergence théorique a été étudiée dans [20, 21], et également confrontée à un cas test numérique d'interaction fluide-solide 2D (écoulement compressible à travers une géométrie solide poreuse). Le modèle filtré et régularisé par ondelettes (appliqué au fluide) a démontré sa capacité, sur ce cas test, à converger vers une solution de référence à l'échelle fine fournie par un code DNS (Direct Numerical Simulation). Ce cas test, ainsi que d'autres à l'étude, pourront être présentés lors du congrès.

Par ailleurs, il est à noter que la démarche consistant à approcher la solution d'un problème de manière régularisée peut notamment faire écho aux méthodes de viscosité évanescente ou viscosité artificielle [22] utilisées en mécanique des fluides, ou encore à la méthode de régularisation de Tikhonov [23], très souvent utilisée pour la résolution de problèmes inverses mal posés.

5 Conclusion

Cet article propose une approche originale de la modélisation multi-échelles, fondée sur l'application de la transformation en ondelettes continue en espace directement sur les équations de conservation d'un milieu continu. La remontée d'échelles est ainsi le fruit d'un produit de convolution entre une ondelette régulière et isotrope et les variables du milieu originel. Cette opération permet de construire des variables continûment différentiables, qui seront solutions de nouvelles lois de conservation adaptées à l'échelle spatiale retenue. La transformée en ondelettes inverse fournit par ailleurs une opération de déconvolution, qui permet de traiter analytiquement conditions aux limites, relations de fermeture et non-linéarités (au prix d'un certain temps de calcul).

Le formalisme en ondelettes offre de plus des arguments de convergence ponctuelle et en énergie des solutions régularisées vers les solutions fines (potentiellement non-régulières) du problème initial.

Enfin, la méthodologie de remontée d'échelles par ondelettes spatiales s'ouvre à de multiples champs d'application physiques (matériaux hétérogènes, milieux poreux, turbulence, électromagnétisme...), avec par ailleurs un libre choix pour la méthode de discrétisation spatiale (éléments finis, volumes finis, différences finies...).

Références

[1] J.D. Eshelby. *The elastic field outside an ellipsoidal inclusion*, Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Mathematical and Physical Sciences, 561-569, 1959.

[2] R. Hill. *Elastic properties of reinforced solids : some theoretical principles*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 357-372, 1963.

[3] Z. Hashin, S. Shtrikman. *A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 127-140, 1963.

[4] J.R. Willis. *Variational and related methods for the overall properties of composites*, Advances in Applied Mechanics, 1-78, 1981.

[5] A. Bensoussan, J.L. Lions, G. Papanicolaou, *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*, North-Holland, 1978.

[6] E. Sanchez-Palencia. *Non-Homogeneous Media and Vibration Theory*, Springer, 1980.

[7] L. Tartar. *Compensated compactness and partial differential equations*, Nonlinear Analysis and Mechanics : Heriot-Watt Symposium, 136-212, 1979.

[8] G. Allaire. *Homogenization and two-scale convergence*, Journal on Mathematical Analysis, 1482-1518, 1992.

[9] F. Murat, L. Tartar. *Topics in the mathematical modeling of composite materials*, A. Cherkaev and R.V. Kohn (Eds.), 1997.

[10] M. Lesieur. *Turbulence in fluids*, Springer : Berlin/Heidelberg, Germany, 2008.

[11] T.J.R. Hughes, L. Mazzei, A.A. Oberai. *The multiscale formulation of large eddy simulation : Decay of homogeneous isotropic turbulence*, Physics of Fluids, 13, 2, 2001.

[12] S. Banerjee, A.M.C. Chan. *Separated flow models-1 : Analysis of the averaged and local instantaneous formulations*, International Journal of Multiphase Flow, 1-24, 1980.

[13] G. Ricciardi. *Fluid-structure interaction modelling of a PWR fuel assembly subjected to axial flow*, Journal of Fluids and Structures, 156-171, 2016.

[14] E. Godlewski, P.-A. Raviart. *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*, Springer : Berlin/Heidelberg, Germany, 1996.

[15] J.M. Guedes, N. Kikuchi. *Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 143-198, 1990.

[16] H. Moulinec, P. Suquet. *A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 69-94, 1998.

[17] F. Feyel, J.-L. Chaboche. *FE^2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 309-330, 2000.

[18] B. Torrésani. *Analyse continue par ondelettes*, CNRS Editions/EDP Sciences, 1995.

[19] S.G. Mallat. *A Wavelet Tour of Signal Processing*, Academic Press : Cambridge, MA, USA, 2008.

[20] S. Mokhtari. *A wavelet-based multi-scale and homogenized modeling for pressure waves propagation in congested media*, Université Paris-Est, PhD Thesis, 2021.

[21] S. Mokhtari, G. Ricciardi, V. Faucher, P. Argoul, L. Adélaïde. *Multiscale Filtering of Compressible Wave Propagation in Complex Geometry through a Wavelet-Based Approach in the Framework of Pressurized Water Reactors Depressurization Transient Analysis*, Fluids, 5, 64, 2020.

[22] J. Von Neumann, R.D. Richtmyer. *A Method for the Numerical Calculation of Hydrodynamic Shocks*, Journal of Applied Physics, 21, 3, 232-237, 1950.

[23] A.N. Tikhonov and V.A. Arsenin. *Solution of Ill-posed Problems*, Winston & Sons, Washington, 1977.